

## АННОТАЦИЯ

Диссертация на соискание степени доктора философии (PhD)  
8D05302 – ФИЗИКА

БЕЙСЕМБЕКОВ МЕЙРХАН ҚҰРМАНҒАЗЫҰЛЫ

### **ИНВЕРТИРОВАННЫЙ ПЕРОВСКИТНЫЙ СОЛНЕЧНЫЙ ЭЛЕМЕНТ С ДЫРОЧНО- ТРАНСПОРТНЫМ СЛОЕМ НА ОСНОВЕ NiO<sub>x</sub>/ФТАЛОЦИАНИН.**

**Актуальность темы.** Инвертированные перовскитные солнечные элементы привлекают внимание благодаря улучшенной стабильности, совместимости с гибкими подложками, а также перспективами для использования в тандемных солнечных элементах. Однако их эффективность преобразования энергии немного уступает обычным PSCs. Основная проблема, ограничивающая дальнейший рост эффективности и стабильности инвертированных PSCs, связана с деградацией основных компонентов PSCs, нестабильностью фотовольтаических характеристик и не оптимизированной структурой инвертированных PSCs. Одним из ключевых компонентов инвертированных PSCs является слой с дырочной проводимостью, который формирует гетеропереход с фотоактивным перовскитным слоем. От эффективности инжекции и транспорта носителей заряда в HTLs, зависят фотовольтаические характеристики и стабильность инвертированных PSCs.

Оксид никеля считается одним из наиболее перспективных для создания эффективных перовскитных солнечных элементов с инвертированной p-i-n-структурой. На сегодняшний день для таких структур на основе NiO<sub>x</sub> достигнута рекордная эффективность преобразования энергии около 23%. Эти показатели были получены благодаря простоте синтеза, широкой полосе пропускания, выгодному расположению максимума валентной зоны, хорошей химической стабильностью по сравнению с другими неорганическими материалами.

Дальнейший прогресс в повышении эффективности и стабильности инвертированных PSCs упирается в фундаментальные ограничения, возникающие на гетерофазной границе перовскит/NiO<sub>x</sub>. Под воздействием постоянного освещения и нагрева в составе с перовскитом выделяются агрессивные соединения (I<sub>3</sub><sup>-</sup>, HI), повреждающие границу раздела и создающие большое количество дефектов. Эти дефекты формируют энергетический барьер для экстракции дырок и усиливают рекомбинацию носителей, что в итоге приводит к значительному падению стабильности и производительности PSCs.

В последнее время для улучшения фотоэлектрических характеристик и стабильности PSCs проводятся работы по созданию бислойных HTL материалов. Такие структуры позволяют минимизировать энергетический барьер для экстракции дырок и подавить их рекомбинацию на границе раздела. Ключевым аспектом является точный подбор материалов с соответствующей работой выхода, что обеспечивает оптимальный энергетический контакт с перовскитным активным слоем.

Одним из перспективных подходов к улучшению фотоэлектрических характеристик и стабильности PSCs является использование межфазного слоя фталоцианина и его металлокомплексов. Эти соединения химически и термически стабильны, обладают значительным оптическим поглощением в видимой области спектра, легко образуют упорядоченные тонкие пленки с высокой фотопроводимостью. Физические и химические свойства MPC хорошо регулируются путем оптимизации центральных ионов металла и структуры. Фталоцианины не имеют столь стремительной деградации под действием света, сопровождаемой выделением соединений йода аналогично используемому перовскитному материалу.

Таким образом, изучение механизмов транспорта и рекомбинации носителей в бислойных дырочно-транспортных слоев позволит целенаправленно создавать более эффективные и стабильные солнечные элементы, что приведет к упрощению технологии сборки инвертированных PSCs.

**Целью** является исследование влияния транспортного дырочного слоя NiO<sub>x</sub>/MPc на перенос зарядов и рекомбинацию в инвертированных перовскитных солнечных элементах.

Для достижения поставленной цели в процессе выполнения работы решались следующие **задачи**:

- исследование влияния среды и разных температур отжига на морфологические, оптические и фотоэлектрические характеристики пленок NiO<sub>x</sub>.
- получение наноструктур фталоцианинов методами термического вакуумного напыления и физического градиентно-температурного осаждения из паровой фазы;
- разработка технологии получения бислойных пленок на основе NiO<sub>x</sub> и наноструктур фталоцианинов;
- изучение процессов транспорта и рекомбинации носителей заряда в бислойных пленках NiO<sub>x</sub>/MPc;
- синтез перовскитного слоя на поверхности нанокомпозитной пленки NiO<sub>x</sub>/MPc;
- исследование влияния наноструктур фталоцианинов на фотовольтаические и электротранспортные характеристики инвертированных PSCs;
- изучение стабильности инвертированных перовскитных солнечных элементов на основе наноструктурированных пленок NiO<sub>x</sub>/MPc.

**Объектами исследования** являлись инвертированные перовскитные солнечные элементы. Наноструктурированные пленки оксида никеля. Наноструктуры фталоцианина и его металлокомплексов. Бислойные пленки на основе оксида никеля и наноструктур фталоцианинов.

**Методы исследования:** Экспериментальные исследования проводились методами оптической спектроскопии, сканирующей электронной микроскопии, атомно-силовой микроскопии, вольтамперометрии, импедансной спектроскопии и рентгеновской дифракции.

**Научная новизна** включает следующее:

1. Определены оптимальные технологические условия синтеза пленок оксида никеля. Установлена корреляция между температурой отжига и электрофизическими свойствами полученных пленок. Показано, что при увеличении температуры отжига пленок от 200°C до 450°C наблюдается увеличение значения среднеквадратического отклонения поверхности  $R_a$ , уменьшение толщины пленки NiO<sub>x</sub>, которое связано с формированием более плотной пленки.

2. Показано, что сопротивление внешних электродов прилегающих к NiO<sub>x</sub> увеличивается с ростом температуры отжига в то время как сопротивление рекомбинации на границе NiO<sub>x</sub>/электрод уменьшается. Наблюдаемое возрастание сопротивления пленки  $R_1$  при повышении температуры отжига связано с уплотнением пленки а уменьшение сопротивления  $R_2$  связано с усилением рекомбинации дырок на границе разделе NiO<sub>x</sub>/электрод. Формирование более плотной пленки NiO<sub>x</sub> в результате термического отжига способствует уменьшению значения условной подвижности дырок.

3. Определена взаимосвязь между структурными особенностями наноструктур металлофталоцианинов и эффективностью генерации и транспорта в них носителей заряда. Установлено, что уменьшение плотности границ зерен снижает количество дефектов, тем самым повышая эффективность переноса заряда и улучшая характеристики PSCs.

4. Установлено, что промежуточный слой МРс выполняет функцию фотоактивного слоя который расширяет спектральную чувствительность и приводит к возрастанию эффективности инвертированных PSCs. Показано, что введение фталоцианина кобальта в качестве промежуточного слоя для переноса дырок приводит к существенному улучшению фотовольтаических характеристик и повышению стабильности перовскитного солнечного элемента.

5. Установлено, что в нанолентах молекулы фталоцианина структурируются вдоль молекулярной оси и образуют ламельную структуру, будет возрастать длина свободного пробега носителей заряда. Это приводит к возрастанию проводимости промежуточного слоя МРс. Показано, что по мере перехода от  $\text{H}_2\text{Pc}$  к  $\text{CoPc}$  возрастает подвижность носителей заряда. В результате производительность PSCs с HTLs на основе  $\text{NiO}_x/\text{CoPc}$  показало самую высокую эффективность 20,7%, что выше, чем у PSCs с  $\text{NiO}_x$ (18,1%).

#### **Положения, выносимые на защиту**

1. При термическом отжиге пленок  $\text{NiO}_x$  от 200-450<sup>0</sup>С формируется тонкие плотные пленки с низким сопротивлением перехода на границе  $\text{NiO}_x/\text{Al}$ .

2. Бислойный транспортный слой  $\text{NiO}_x/\text{MPc}$  способствует усилению поглощения и улучшению транспорта дырок, что приводит к увеличению эффективности в инвертированных перовскитных солнечных элементов до 18,9%.

3. Ламельная структура промежуточного слоя нанолент  $\text{CoPc}$  между перовскитом и  $\text{NiO}_x$  повышает плотность носителей заряда при поглощении света и увеличивает подвижность дырок 3,7 раз, в результате КПД перовскитных солнечных элементов достигает 20,7%.

**Личный вклад диссертанта.** Автором выполнены работы по получению наноструктур фталоцианинов. Изготовлены бислойные пленки дырочно-транспортного слоя на основе  $\text{NiO}_x$  и фталоцианина и его металлокомплексов. Исследована морфология поверхности полученных наноструктур и бислойных пленок на атомно-силовом и сканирующем электронном микроскопе. Измерены спектры поглощения, РФА-спектры, ВАХ, спектры импеданса и стабильность солнечных ячеек. Проведена компьютерная обработка результатов экспериментальных измерений. Анализ полученных результатов и выводы работы в целом выполнены совместно с научными консультантами.

**Связь работы с научно-исследовательскими программами.** Диссертация выполнялась в соответствии с планами научно-исследовательской работы по Программам фундаментальных исследований, координируемых Комитетом науки Министерства науки и высшего образования Республики Казахстан: АР19576784 «Использование фталоцианина и его металлокомплексов для повышения эффективности и стабильности перовскитных солнечных элементов» (2023-2025.), АР19679938 «Разработка перовскитных солнечных элементов на основе бислойных наноструктурированных композитных пленок  $\text{NiO}_x/\text{MPc}$ » (2023-2025 г.г.).

**Апробация работы и публикации.** Основные результаты работы докладывались и обсуждались на конференциях: XIV Международная конференция по фотонике и информационной оптике: Сборник научных трудов. НИЯУ МИФИ. – Москва. – 2025. – С. 307-308; Сборник трудов по материалам Международной научной конференции, посвященной 100-летию академика Е.А. Букетова. – Караганда. – 2025. – С. 24 -27; Сборник трудов Международной научной конференции, Инновационное развитие современной физической науки: новые подходы и актуальные исследования. – Караганда. – 2025. – С. 29-33.

**Публикации.** По результатам диссертационной работы опубликовано 7 печатных работ: 3 статьи в журналах, входящих в базы ThomsonReuters и Scopus (1 статья в OpticalMaterials, 2024, IF – 3.9, Q2, процентиль – 72; 1 статья в Small. 2025, IF – 12.1, Q1, процентиль – 92; 1 статья в MaterialsLetters, 2025, IF – 2.7, Q3, процентиль – 73); 1 статья в журналах, рекомендованных Комитетом по обеспечению качества в сфере науки и

высшего образования МНВО РК и 3 публикаций в материалах международных и республиканских конференций.

#### **Практическая значимость работы**

1. Исследованные электрофизические свойства наноструктур на основе оксида никеля и фталоцианина определяют их потенциал для практического использования как в оптоэлектронных устройствах, так и в качестве компонентов инвертированных солнечных элементов.

2. Высокая химическая и температурная стабильность фталоцианинов позволит блокировать канал деградации перовскита, предотвращая прямой контакт между перовскитным слоем и оксидом никеля. Это приводит к улучшению фотовольтаических характеристик и повышению стабильности инвертированных PSCs.

3. Оптимизация методов нанесения и соответствующая модификация поверхности HTLs позволит создавать высокоэффективные и стабильные солнечные элементы, что снижает себестоимость производства инвертированных PSCs.

**Структура и объем диссертации.** Структура диссертационной работы определена поставленными задачами и состоит из введения, 4 разделов, заключения, библиографии и приложения. Она изложена на 99 страницах машинописного текста, иллюстрируется 49 рисунками, 17 таблицами, содержит список использованной литературы из 199 наименований.