

АННОТАЦИЯ

диссертации на соискание степени доктора философии (PhD)
8D05302-Физика

ТАЖИБАЕВ СЕРЖАН КОЖАНУЛЫ

Влияние наноструктур фталоцианиновых комплексов на эффективность транспорта дырок в перовскитных солнечных элементах

Актуальность темы. Для увеличения эффективности преобразования солнечной энергии в электрическую проводятся работы по оптимизации слоев с дырочной проводимостью (hole transport layers, HTLs), которые формируют гетеропереход с фотоактивным перовскитным слоем. От эффективности инжекции и транспорта носителей заряда в HTLs, зависят фотовольтаические характеристики и стабильность перовскитных солнечных элементов (PSCs). В качестве дырочно-транспортного слоя в PSCs часто используется соединение Spiro-OMeTAD. Данное соединение имеет относительно высокую стоимость и низкую подвижность дырок. К тому же, несмотря на высокую эффективность традиционной структуры солнечного элемента, органические соединения имеют склонность к химической нестабильности и быстрой деградации, обладают свойством гигроскопичности, что приводит к ускоренной деградации фотоактивного слоя перовскита.

Для решения существующих проблем, связанных с использованием Spiro-OMeTADa в PSCs проводятся работы по оптимизации HTLs слоя и поиску новых материалов, которые позволят достигнуть повышения эффективности работы PSCs. Одним из перспективных материалов является фталоцианин и его металлокомплексы. Перспективность МРс связана с тем, что эти соединения химически и термически стабильны, обладают значительным оптическим поглощением в видимой области спектра, легко образуют упорядоченные тонкие пленки с высокой фотопроводимостью и каталитической активностью. Физические и химические свойства МРс хорошо регулируются путем оптимизации центральных ионов металла и структуры. Эффективность использования МРс в PSCs была подтверждена несколькими научными группами.

Таким образом, оптимизация структуры HTLs позволит улучшить фотовольтаические характеристики и избежать выявленных механизмов деградации, что обеспечит более длительную и эффективную работу PSCs. В связи с этим исследование влияния наноструктур МРс на эффективность транспорта носителей заряда PSCs является актуальной задачей. Понимание механизмов транспорта и рекомбинации носителей заряда в транспортном слое, содержащем наноструктуры МРс, даст возможность получить солнечные ячейки с улучшенными фотовольтаическими характеристиками и стабильностью работы, что приведет к упрощению технологии сборки PSCs.

Цель диссертационного исследования является исследование влияния наноструктур фталоцианина и его металлокомплексов на эффективность транспорта носителей заряда перовскитного солнечного элемента.

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

- исследование влияния толщины дырочно-транспортного слоя Spiro-OMeTAD на электротранспортные свойства в перовскитных солнечных элементах;
- получение наноструктур фталоцианинов методами термического вакуумного напыления и физического градиентно-температурного осаждения из паровой фазы;
- изучение влияния пленок фталоцианинов на процессы транспорта и рекомбинации носителей заряда в перовскитных солнечных элементах;
- изучение влияния природы центрального атома переходного металла на оптические и электрофизические свойства нанолент фталоцианинов;
- разработка технологии получения слоев с дырочным типом проводимости, содержащих наноленты и наночастицы фталоцианина;
- исследование влияния нанолент и наночастиц фталоцианина в пленке Spiro-OMeTAD на эффективность работы перовскитного солнечного элемента;
- исследование деградации перовскитных солнечных элементов, содержащих фталоцианин и его металлокомплексы.

Объектами исследования являлись солнечные элементы на основе органо-неорганических перовскитов. Пленки Spiro-OMeTAD допированные наноструктурами фталоцианинов. Перовскитные солнечные элементы, на основе бислойных пленок с дырочной проводимостью.

Методы исследования: Экспериментальные исследования осуществлялись с применением комплекса методов, включающих оптическую спектроскопию, рентгеновскую дифракцию, сканирующую и атомно-силовую микроскопию, а также вольтамперометрию и импедансную спектроскопию.

Научная новизна включает следующее:

1. Определены технологические условия получения наноструктур фталоцианинов методами термического напыления и физического градиентно-температурного осаждения из паровой фазы. Установлена связь между фазовыми состояниями нанолент и их электрофизическими свойствами.
2. Определена роль структурных особенностей молекулярных кластеров на вольтамперные характеристики, эффективность генерации и транспорта носителей заряда в наноструктурах металлофталоцианинов.
3. Установлена роль фазовых и структурных состояний молекулярных кластеров МРс на эффективность переноса заряда в транспортных слоях перовскитного солнечного элемента.
4. Показано, что введение промежуточного слоя фталоцианина кобальта в качестве дополнительного слоя для переноса дырок приводит к

существенному улучшению фотовольтаических характеристик и повышению стабильности перовскитного солнечного элемента.

5. Установлено, что наноленты и наночастицы фталоцианина в пленке Spiro-OMeTAD способствуют уменьшению шероховатости и увеличению степени кристаллизации пленки. Показано, что введение наноструктур ZnPc в Spiro-OMeTAD приводит к снижению последовательного сопротивления и возрастанию эффективности PSCs.

Структура и объем диссертации. Структура диссертационной работы определена поставленными задачами и состоит из введения, 5 разделов, заключения, библиографии и приложения. Она изложена на 110 страницах машинописного текста, иллюстрируется 51 рисунками, 20 таблицами, содержит список использованной литературы из 195 наименования.

Положения, выносимые на защиту:

1. Генерация и транспорт зарядов в перовскитных солнечных элементах в значительной степени обусловлены морфологическими параметрами плёнок Spiro-OMeTAD. Экспериментальные результаты показали, что при скорости вращения подложки 5000 об/мин формируется слой Spiro-OMeTAD толщиной порядка 260 нм, при котором достигается максимальное значение коэффициента полезного действия (КПД) — 8,6 %.

2. Применение двухслойной дыркопереносной структуры способствует повышению эффективности экстракции дырок из перовскитного слоя и снижению вероятности их рекомбинации на пути к аноду. Введение дополнительного слоя приводит к уменьшению последовательного сопротивления в 1,8 раза, увеличению плотности фототока с 19,4 мА/см² до 22,1 мА/см², что, в свою очередь, обеспечивает почти двукратный рост КПД солнечного элемента.

3. Модификация слоя Spiro-OMeTAD наноструктурами фталоцианина в форме наночастиц и нанолент приводит к улучшению электрофизических свойств и повышению фотовольтаических параметров устройства. В частности, при введении наноструктур ZnPc проводимость плёнки возрастает с $1,4 \cdot 10^{-4}$ С/см до $3,2 \cdot 10^{-4}$ С/см, а коэффициент полезного действия устройства увеличивается с 8,6 % до 15,3 %.

Личный вклад диссертанта. Автор провёл исследования, направленные на получение наноструктур фталоцианина, и изготовил нанокомпозитные плёнки на основе Spiro-OMeTAD, содержащие наноленты и наночастицы фталоцианина и его металлокомплексов в качестве дыркопереносного слоя. Морфология поверхности полученных наноструктур и композитных плёнок была исследована с использованием атомно-силовой и сканирующей электронной микроскопии. Были измерены спектры поглощения, рентгенофазовые (РФА) спектры, вольт-амперные характеристики, импедансные спектры, а также стабильность солнечных элементов. Результаты экспериментальных измерений были обработаны с применением компьютерных методов. Анализ полученных данных и формулировка обобщённых выводов выполнялись совместно с научными руководителями.

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 увеличения эффективности и стабильности перовскитных солнечных элементов» (2023-2025 г.г.), АР19679938 «Разработка перовскитных солнечных элементов на основе бислойных наноструктурированных композитных пленок NiOx/MPc» (2023-2025 г.г.).

Апробация работы и публикации. Основные результаты работы докладывались и обсуждались на конференциях: Лазерные, плазменные исследования и технологии. ЛАПЛАЗ-2022: Сборник научных трудов VIII Международной конференции. Москва, 2022. – С.272; XIII международная конференция по фотонике и информационной оптике: Сборник научных трудов. М.: НИЯУ МИФИ, 2024. – С.295-296; Сборник трудов Международной научной конференции, посвященной 125-летию юбилею академика Каныша Сатпаева 2024. – С.105-109; Е.А. БӨКЕТОВТИҢ ҒЫЛЫМИ КӨКЖИЕКТЕРІ. Сборник трудов по материалам Международной научной конференции, посвященной 100-летию академика Е.А. Букетова. 26 сентября 2025. – С. 166-170.

Публикации. По результатам диссертационной работы опубликовано 8 печатных работ: 2 статьи в журналах, входящих в базы Thomson Reuters и Scopus (1 статья в Materials Chemistry and Physics, 2023, IF – 4.3, Q2, процентиль – 88; 1 статья в Synthetic Metals, 2025, IF – 4.6, Q2, процентиль – 87); 2 статьи в журналах, рекомендованных Комитетом по обеспечению качества в сфере науки и высшего образования МНВО РК и 4 публикаций в материалах международных и республиканских конференций.

Практическая значимость работы:

1. Полученные экспериментальные результаты исследования оптических и электрофизических свойств наноструктур фталоцианина и его металлокомплексы важны для практического применения их в оптоэлектронных устройствах и перспективных для использования в солнечных элементах третьего поколения.

2. Введение промежуточного слоя MPc блокирует канал деградации перовскита, предотвращая прямой контакт между перовскитным слоем и Spiro-OMeTAD. Это приводит к улучшению фотовольтаических характеристик и повышению стабильности PSCs.

3. Понимание механизмов транспорта и рекомбинации носителей заряда в транспортном слое, содержащем наноструктуры MPc, даст возможность получить перовскитные солнечные ячейки с улучшенными фотовольтаическими характеристиками, что приведет к упрощению технологии сборки PSCs.