

«8D05303 –Техникалық физика» білім беру бағдарламасы бойынша философия докторы (PhD) дәрежесін алу үшін диссертациялық жұмысқа

## **АҢДАТПА**

### **ОМАРОВА ЖАНСАЯ БАҒДАТҚЫЗЫ**

#### **ФОТОВОЛЬТАИКА ҮШІН $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3$ ЖӘНЕ $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ НЕГІЗІНДЕГІ МЕТАЛЛОРОГАНИКАЛЫҚ ПЕРОВСКИТТЕРДІҢ ТИІМДІЛІК ШЕКТЕРІ**

##### **Жұмыстың жалпы сипаттамасы**

Диссертациялық жұмыста күн энергиясын фотоэлектрлік түрлендіргіштерге арналған  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3$  және  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$  негізіндегі жұқа перовскит үлдірлерінің тиімділігі мен тұрақтылық шегін зерттеу нәтижелері берілген.

##### **Жұмыстың өзектілігі**

Энергияның негізгі көзі ретінде қазбалы отынды тұтыну қоршаған ортаға көмірсутекті отындардың жану өнімдерінің қалдықтары есебінен айтарлықтай экологиялық мәселелер туғызуда. Бұл мәселенің шешімдерінің бірі кез келген нысанда экологиялық таза энергияны пайдалану болып табылады. Соңғы жылдары баламалы энергияның қарқынды дамып келе жатқан бағыттарының бірі - күн энергетика саласы. Бұл салада перовскиттік энергия түрлендіргіштеріне негізделген күн энергетикасының біртіндеп дамып келе жатқан бағытын ерекше атап өтуге болады. Фотоэлектрлік нарықта кремний күн элементтерімен қатар энергияны түрлендіру тиімділігі жоғары металлорганикалық қалайы немесе қорғасын галогенидтері негізіндегі перовскитті күн элементтері күшті бәсекелес болып табылады. Негізінде кремний күн элементтері баламалы энергия көзі ретінде материалдардың көптігі мен олардың қызмет ету мерзіміне байланысты (әдетте 25–30 жыл құрайды) фотоэлектрлік нарықта өзін жақсы көрсетті. Қазіргі таңда өнеркәсіпте қолданылатын кремний күн элементтері шамамен 20 % фотоэлектрлік энергияны түрлендіру тиімділігіне қол жеткізгенімен, олардың құнының жоғарылығы, өндірістің жоғары ғылыми қарқындылығы, сондай-ақ оларды қайта өңдеудің күрделілігі және пайдаланудан шыққан кремний күн панельдерін жою және т.б. сияқты кемшіліктері бар. Осыған орай перовскиттердің оң сипаттамаларына байланысты олар қатты күйдегі күн элементтері ретінде зерттеу саласына айтарлықтай әсер етті. Оларға кемтіктер мен электрондар үшін үлкен диффузия ұзындығы, тасымалдаушылардың жоғары қозғалғыштығы, жарық спектрінің кең жұтылу диапазоны және тасымалдаушылардың ұзақ қызмет ету мерзімі, сонымен қатар өндірудің қарапайымдылығы және фотовольтаиканың фото түрлендіруінің салыстырмалы түрде жоғары тиімділігі (шамамен 25%) жатады.

Дегенмен, перовскиттері күн энергиясын түрлендіргіш ретінде қолданудың бірқатар шешілмеген мәселелері бар. Бұл мәселелерге олардың құрылымдық тұрақтылығы мен тұрақты тиімділік шегі жатады, ол мәселелер бүгінгі күнге дейін перовскиттердің өнеркәсіпте кеңінен қолданылуын шектейді. Перовскитті күн элементінің тұрақтылығын сақтау үшін әдетте күн элементінің функционалдық қабаттарының бұзылуын тудыратын әртүрлі шартты факторлар ескеріледі. Солардың бірі атмосфералық ылғалдың адсорбциясы салдарынан атомаралық қашықтықтың қатты бұрмалануы байқалатын перовскиттің кристалдық құрылымындағы сутегі байланысының беріктігінің қарқынды бұзылуына әкелетін шартты факторлар болып табылады. Металлорганикалық перовскиттердің тұрақтылығын арттырудың бір жолы – инкапсуляция әдісі. Алайда, металлорганикалық перовскиттердің тұрақтылығына әсерін тигізетін қоршаған ортаның деградациялық әсері толық зерттелмеген. Тиісінше, металлорганикалық галоидтар негізінде күн элементтерінің тұрақтылығын арттыру жолдарын зерттеу өзекті мәселе болып табылады.

**Бұл жұмыстың идеясы**  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3$  және  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$  негізіндегі перовскитті күн элементтерінің құрылымын зерттеу, олардың шығыс техникалық сипаттамалары геометриялық параметрлерін, көлемдік және беттік ақаулардың тығыздығын, электродтар мен тасымалдаушы қабаттарын сандық модельдеу және оңтайландыру арқылы таңдауға байланысты, сондай-ақ қоршаған ортаның әсерінен жұқа үлдірлі күн элементінің функционалдық қабатының деградациясын зерттеу.

#### **Диссертациялық жұмыстың мақсаты**

Бұл жұмыстың мақсаты металлорганикалық перовскитті күн элементінің энергияны түрлендіру тиімділігінің шегі мен тұрақтылығын анықтау болып табылады.

Осы мақсатқа жету үшін келесідей **міндеттерді** орындау қажет:

– Энергияны түрлендіру тиімділігінің шегіне әсер ететін әртүрлі сипаттамалары бар  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3$  және  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$  негізіндегі жұқа үлдірлі перовскитті күн элементінің сандық модельдеу алгоритмін жасау;

–  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3$  жұту қабатының көлемдік және беттік ақауларының энергияны түрлендіру тиімділігінің шегіне әсерін сандық зерттеу;

– SCAPS 1D бағдарламалық пакетінің көмегімен  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3$  жұту қабатының геометриялық өлшемдерін өзгерту арқылы перовскитті күн элементінің негізгі сипаттамаларының өзгеру диапазонын анықтау;

– Перовскитті күн элементінің тиімділік шегіне жақындау үшін перспективалы материалдарды қиыстыру арқылы кемтік тасымалдау мен контактілі қабаттарының оңтайлы сипаттамаларын анықтау;

–  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$  перовскит қабатының атмосфералық тұрақтылығына деградацияның әсерін зерттеу.

**Зерттеу нысаны** –  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3$  және  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$  металлорганикалық перовскиттерге негізделген жұқа үлдірлер мен күн элементтері.

**Зерттеу пәні** – жаңартылатын энергия көздері саласындағы күн энергиясын түрлендіру.

### **Зерттеу әдістері мен тәсілдері**

Зерттеу жұмысының мақсатына жету үшін келесі негізгі әдістер қолданылды: SCAPS-1D күн элементін модельдеу бағдарламасына негізделген сандық әдіс; «Quanta 200i 3D» растрлық электронды микроскоптағы микроскопия әдісі; «ФСМ 2203» типті FTIR спектрометрі арқылы орташа ИҚ диапазонындағы тербелмелі спектроскопия әдісі; QEX-10 кванттық тиімділікті өлшеуге арналған қондырғының көмегімен көрінетін диапазондағы оптикалық жұту әдісі.

### **Диссертациялық жұмыстың ғылыми жаңалығы, алғаш рет:**

1) Тәжірибелік нәтижелерге жақындау үшін көлемдік және беттік ақаулардың тығыздығының әсерін ескере отырып, қолданыстағы үлгілерден ерекшеленетін тиімді перовскитті күн элементінің жалпыланған моделі әзірленді;

2) Оңтайлы сипаттамаларды таңдау үшін сандық тәжірибенің көмегімен перовскитті күн элементінің тиімділігінің сіңіру қабатының қалыңдығына, кемтік-тасымалдау қабаты мен контактілі қабаттың түріне тәуелділігі сандық түрде анықталды;

3) Перовскит материалындағы гидратация процесіне байланысты пайда болған  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$  перовскит қабатындағы көлемдік ақаулар концентрациясының  $10^{12} \text{ см}^{-3}$ -ден аспайтын мәннен  $10^{16} \text{ см}^{-3}$ -тен асатын мәнге дейін жоғарылауы тәжірибелік түрде анықталды, бұл гидратацияға және тиімділіктің 30%-дан 15%-ға дейін төмендеуіне алып келеді.

**Жұмыстың ғылыми және практикалық құндылығы** жұмыста ұсынылған нәтижелер перовскитті күн элементінің тиімділігі туралы теориялық ұғымдарды дамытуға және фотовольтаикада қолдану үшін олардың оңтайлы параметрлерін табуға көмектеседі. Диссертациялық жұмыста ұсынылған  $\text{TiO}_2/\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3/\text{Cu}_2\text{O}$  оңтайлы перовскитті күн элементінің құрылымының нәтижелері Шокли-Кайссер тиімділігінің максималды теориялық шегіне жақындауға, сонымен қатар жаппай коммерцияландыруға енгізуге мүмкіндік береді.

Алынған нәтижелердің маңыздылығы халықаралық рецензияланатын басылымдардағы жарияланымдармен және тұрақты халықаралық конференцияларға қатысумен, сондай-ақ ҚР № 7458 патентімен, № 33477 авторлық куәлігімен расталады.

### **Қорғауға шығарылатын негізгі тұжырымдар**

1. Жарық жұтушы қабатта  $10^{10} \text{ см}^{-3}$ -ден  $10^{17} \text{ см}^{-3}$ -ге дейінгі диапазонда көлемдік ақаулар мен  $10^{10} \text{ см}^{-2}$ -ден  $10^{17} \text{ см}^{-2}$ -ге дейінгі диапазонда беттік ақаулардың әсері ескерілетін,  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3$  және  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$  негізіндегі перовскитті күн элементінің жалпыланған әзірленген моделі, оларды ескеру ПӘК-ті шамамен 30%-дан 6%-ға дейін түрлендіруге мүмкіндік береді.

2. Жарықты жұту қабатының қалыңдығы 700 нм тең FTO/ $\text{TiO}_2/\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3/\text{Cu}_2\text{O}/\text{Pt}$  электр өткізгіш және жартылай өткізгіш қабаттарының оңтайлы реттілігі кезінде  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3$  негізіндегі перовскитті

күн элементінің тиімділігі ПӘК=28 % және толтыру коэффициенті FF=84 % шегіне жетеді.

3. Қоршаған ортаның әсері перовскит материалының гидратация процесінде туындаған  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$  көлемдік ақаулар концентрациясының  $10^{12} \text{ см}^{-3}$  аспайтын мәндерінен  $10^{16} \text{ см}^{-3}$ -тен жоғары мәндеріне дейін ұлғаюына алып келеді және гидратацияның алдын алу күн элементінің ПӘК-ін 15%-дан 30%-ға дейін екі есе арттыруға мүмкіндік береді.

### **Диссертациялық жұмыс тақырыбының ғылыми-зерттеу бағдарламаларының жоспарларымен байланысы**

Диссертациялық жұмыс 2018-2020 жылдарға арналған, (ЖТН) AP05133651 «Иілгіш органикалық жартылай өткізгіш материалдар негізінде келешегі бар жаңартылатын көздерді өндіру және зерттеу», 2020-2022 жылдарға арналған, жеке тіркеу нөмірі (ЖТН) AP08855738 «Шыны түзетін органикалық молекулалардың криовакуумдық конденсаттарының жұқа қабықшаларындағы құрылымдық-фазалық трансформациялар мен релаксация процестері» ғылыми-зерттеу жұмыстарының (ҒЗЖ) жоспарларына сәйкес ішінара орындалды.

#### **Автордың қосқан үлесі**

Автор диссертациялық жұмыстың барлық бөлімін, соның ішінде жұмыстың мақсаты мен міндеттерін айқындауды, гипотезалар қою және тәжірибелік жұмыстар жүргізуді, компьютерлік модельдеу және тәжірибе нәтижелерін сандық бағалауды, ғылыми жарияланымдарды талдау және баспаға дайындауды толығымен орындады.

#### **Жұмыста алынған нәтижелер мен жасалған қорытындылардың сенімділік деңгейі және түсіндірмесі**

Диссертациялық жұмыста алынған нәтижелердің дұрыстығы ҚР БЖҒМ Білім және ғылым саласында сапаны қамтамасыз ету комитеті (БҒССҚЕК) ұсынған басылымдарда, импакт-факторы нөлден жоғары алыс шетелдердің журналдарында және халықаралық конференциялардың еңбектерінде жарияланымдардың болуымен расталады.

#### **Жарияланымдар**

Диссертациялық жұмыстың тақырыбы бойынша 15 ғылыми баспа жұмысы жарияланды, оның ішінде 9 жұмыс халықаралық конференцияларда тезис түрінде, 4 мақала философия докторы (PhD) ғылыми дәрежесін алу үшін БҒССҚЕК-і ұсынған ғылыми басылымдарда, 2 мақала Web of Science (Clarivate Analytics, АҚШ) және Scopus (Elsevier, Нидерланды) халықаралық ақпараттық ресурстарына кіретін ғылыми басылымдарда жарияланды.

#### **Диссертациялық жұмыстың құрылымы және көлемі**

Диссертациялық жұмыс кіріспеден, төрт тараудан, қорытындыдан және пайдаланылған әдебиеттер тізімінен тұрады. Жұмыс 143 беттік баспа мәтінінде ұсынылған, 52 сурет, 8 кесте және 223 пайдаланылған әдебиеттер тізімінен тұрады.