

## АННОТАЦИЯ

диссертации на соискание степени доктора философии (PhD) по образовательной программе «8D05303 – Техническая физика»

**ОМАРОВА ЖАНСАЯ БАҒДАТҚЫЗЫ**

### **ПРЕДЕЛЫ ЭФФЕКТИВНОСТИ МЕТАЛЛООРГАНИЧЕСКИХ ПЕРОВСКИТОВ НА ОСНОВЕ $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3$ И $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ ДЛЯ ФОТОВОЛЬТАИКИ**

#### **Общая характеристика работы**

В диссертации представлены результаты исследования пределов эффективности и стабильности тонких перовскитных пленок на основе  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3$  и  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$  для фотоэлектрических преобразователей солнечной энергии.

#### **Актуальность**

Потребление ископаемого топлива в качестве основного источника энергии создает значительную экологическую нагрузку вследствие выбросов в окружающую среду продуктов горения. Одним из возможных решений этой проблемы является развитие и внедрение экологически чистой энергетики, основанной на применении технологий, альтернативных сжиганию углеводородных энергоносителей. В последние годы наиболее быстроразвивающейся областью альтернативной энергетики является солнечная фотовольтаика. Основным драйвером роста в этой сфере до настоящего времени являлись кремниевые солнечные элементы. Несмотря на ряд преимуществ, таких как обилие сырьевой базы, длительный срок эксплуатации и высокий коэффициент полезного действия (КПД), кремниевые солнечные элементы имеют и ряд недостатков, в числе которых относительно высокая стоимость, высокая степень наукоемкости процесса изготовления, а также сложность переработки и утилизации вышедших из эксплуатации солнечных модулей. Это обуславливает необходимость поиска новых материалов и полупроводниковых структур, среди которых наибольшее внимание в последнее время уделяется перовскитам на основе металлоорганических галогенидов олова или свинца. Перовскитные фотоэлементы отличаются не только высокой эффективностью преобразования солнечной энергии, превышающей 25%, но и относительной простотой изготовления, что позволяет им конкурировать на фотоэлектрическом рынке с кремниевыми солнечными элементами. Высокий КПД достигается благодаря широкому диапазону поглощения света, а также относительно большой, по сравнению с толщиной пленки, длине диффузии носителей тока, вследствие их высокой подвижности и времени жизни. Кроме того, возможность варьирования ширины запрещенной зоны в перовскитах позволяет применять их в комбинации с кремниевыми солнечными элементами в тандемных структурах.

Тем не менее, перовскитные фотопреобразователи имеют ряд нерешенных проблем. К ним относятся, в первую очередь, структурная стабильность и операционная устойчивость, которые на сегодняшний день ограничивают широкое применение данных устройств. Для обеспечения стабильности перовскитного солнечного элемента необходимо выявление причин, способствующих разрушению его функциональных слоев. Применительно к кристаллической структуре перовскита актуальным является исследование факторов, которые приводят к интенсивной деградации прочности водородной связи, которая приводит к сильному искажению межатомных расстояний, к примеру, вследствие адсорбции атмосферной влаги. Несмотря на значительный прогресс в этом направлении, деградирующее воздействие окружающей среды на стабильность металлоорганических перовскитов с точки зрения устойчивости молекулярных связей не изучено в полной мере. В связи с этим, исследование механизмов деградации и поиск пределов эффективности солнечных элементов на основе металлоорганических галоидных перовскитов являются актуальными задачами в современной фотовольтаике.

**Идея данной работы** заключается в исследовании структуры перовскитных солнечных элементов на основе  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3$  и  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ , выходные технические характеристики которых зависят от геометрических параметров, плотности объемных и поверхностных дефектов, выбора переходных слоев и электродов, посредством численного моделирования и оптимизации, а также исследовании деградации функционального слоя тонкопленочного солнечного элемента под воздействием окружающей среды.

### **Целью работы**

Целью данной работы является выявление предела эффективности преобразования энергии и стабильности металлоорганического перовскитного элемента.

### **Задачи исследования.**

– Разработать алгоритм численного моделирования тонкопленочного перовскитного солнечного элемента на основе  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3$  и  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$  с различными характеристиками, влияющими на предел эффективности фотопреобразования;

– Численно исследовать влияние объемных и поверхностных дефектов в поглощающем слое  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3$  на предел эффективности преобразования энергии;

– Выявить диапазон изменения основных характеристик перовскитного солнечного элемента путем изменения геометрических размеров поглощающего слоя  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3$  при использовании программного пакета SCAPS 1D;

– Определить оптимальные характеристики дырочного транспортного и контактного слоев посредством поиска перспективных материалов с целью приближения к пределу эффективности перовскитного солнечного элемента;

– Исследовать влияние деградации на атмосферную стабильность перовскитного слоя  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ .

**Объектом исследования** являются тонкие пленки и солнечные элементы на основе металлоорганических перовскитов  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3$  и  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ .

**Предметом исследования** являются преобразование солнечной энергии в области возобновляемых источников энергии.

**Методы исследования.** Для достижения цели исследовательской работы использовались следующие основные методы: численный метод с использованием программного моделирования солнечного элемента SCAPS 1D; метод микроскопии на растровом электронном микроскопе «Quanta 200i 3D»; метод колебательной спектроскопии в среднем ИК диапазоне при помощи FTIR-спектрометра типа «ФСМ 2203», метод оптического поглощения в видимом диапазоне при помощи установки по измерению квантовой эффективности QEX-10.

**Новизна и оригинальность диссертационной работы заключаются в том, что в ней впервые:**

1) Разработана обобщенная модель эффективного перовскитного солнечного элемента, отличающаяся от существующих моделей учетом влияния плотности объемных и поверхностных дефектов для приближения к экспериментальным результатам.

2) Численно установлена зависимость эффективности перовскитного солнечного элемента от толщины поглощающего слоя, вида дырочно-транспортного слоя и контактного слоя с помощью численного эксперимента для выбора оптимальных характеристик.

3) Экспериментально выявлено, что рост концентрации объемных дефектов в перовскитном слое  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ , вызванным процессом гидратации перовскитного материала, со значений, не превышающим  $10^{12} \text{ см}^{-3}$ , до значений свыше  $10^{16} \text{ см}^{-3}$ , приводит к гидратации и ухудшений КПД с 30% до 15%.

**Теоретическая и практическая значимость исследования** заключается в том, что представленные в работе результаты способствуют развитию теоретических представлений об эффективности перовскитного солнечного элемента и помогает найти их оптимальные параметры для применения в фотовольтаике. Результаты наилучшей структуры перовскитного солнечного элемента  $\text{TiO}_2/\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3/\text{Cu}_2\text{O}$ , полученные в данной диссертационной работе, позволяют приблизиться к максимальному теоретическому пределу эффективности Шокли-Квайссера, что приближает к повсеместному коммерческому внедрению.

Значимость, полученных результатов, подтверждается публикациями в международных рецензируемых изданиях и участием на регулярных международных конференциях, а также патентом РК № 7458, авторским свидетельством № 33477.

## **Основные положения, выносимые на защиту**

1. Разработанная обобщенная модель перовскитного солнечного элемента на основе  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3$  и  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ , учитывающая влияние объемных дефектов в светопоглощающем слое в диапазоне от  $10^{10}$   $\text{см}^{-3}$  до  $10^{17}$   $\text{см}^{-3}$  и поверхностных дефектов в диапазоне от  $10^{10}$  до  $10^{17}$   $\text{см}^{-2}$ , учёт которых позволяет варьировать КПД от 30% до 6%.

2. Оптимальная последовательность электропроводящих и полупроводниковых слоев FTO/ $\text{TiO}_2$ / $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3$ / $\text{Cu}_2\text{O}$ /Pt с толщиной светопоглощающего слоя, равной 700 нм, при которой достигается предел эффективности перовскитного солнечного элемента на основе  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3$  с КПД = 28 % и коэффициентом заполнения FF = 84%.

3. Влияние окружающей среды приводит к росту концентрации объемных дефектов в  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ , вызванных процессом гидратации перовскитного материала, со значений, не превышающих  $10^{12}$   $\text{см}^{-3}$ , до значений свыше  $10^{16}$   $\text{см}^{-3}$ , и предотвращение гидратации позволяет достичь двукратного роста КПД солнечного элемента с 15% до 30%.

## **Связь темы диссертационной работы с планами научных работ**

Диссертационная работа была частично реализована в соответствии с планами научно-исследовательских работ за 2018-2022 гг.: «AP05133651 - Производство и исследование перспективных возобновляемых источников на основе гибких органических полупроводниковых материалов» и «AP08855738 - Стеклообразующие органические молекулы в тонких пленках криовакуума структурно-фазовые превращения конденсатов и релаксационные процессы».

**Личный вклад автора** заключается в том, что им выполнен весь объем диссертационной работы, включая проведение экспериментальных работ, компьютерное моделирование и количественную оценку опыта, анализ научных материалов и подготовку к публикации. Постановка задач, выбор методов исследования и обсуждения результатов проводились совместно с научными консультантами.

**Достоверность и обоснованность полученных результатов** подтверждается наличием публикаций в журналах дальнего зарубежья с ненулевым импакт-фактором и в изданиях, рекомендованных Комитетом по обеспечению качества в сфере образования и науки МНВО РК, а также в трудах международных научных конференций ближнего и дальнего зарубежья.

## **Публикации**

По материалам диссертационной работы опубликовано 15 печатных работ: 9 работы в материалах Международных научных конференций, 4 в журналах из перечня КОКСОН МНВО РК для опубликования основных результатов диссертации на соискание ученой степени PhD и 2 статья в журнале дальнего зарубежья с высоким импакт-фактором, входящих в международные информационные ресурсы Web of Science (Clarivate Analytics, США) и Scopus (Elsevier, Нидерланды).

### **Объем и структура диссертации**

Диссертационная работа состоит из введения, четырех разделов, заключения и списка использованных источников. Работа изложена на 143 страницах печатного текста, содержит 52 рисунка, 8 таблиц и списка использованных источников из 223 наименований.