

**Секция 1. ЖАРАТЫЛЫСТАНУ ҒЫЛЫМДАРЫ: ІРГЕЛІ  
ЗЕРТТЕУЛЕР ЖӘНЕ ОЛАРДЫ ҚОЛДАНУ**  
**Секция 1. ЕСТЕСТВЕННЫЕ НАУКИ:**  
**ФУНДАМЕНТАЛЬНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ И ИХ ПРИМЕНЕНИЕ**

---

**ВЛИЯНИЕ НАНОЧАСТИЦ  $WS_2$  НА СТРУКТУРНЫЕ  
ОСОБЕННОСТИ ДЫРОЧНО-ТРАНСПОРТНОГО СЛОЯ  
PEDOT:PSS**

**Кабдиева А.У.**

Карагандинский университет имени академика Е. А. Букетова,  
докторант, г. Караганда, Республика Казахстан, [kabdiyeva95@inbox.ru](mailto:kabdiyeva95@inbox.ru)

**Абеуов Д.Р.**

Карагандинский университет имени академика Е. А. Букетова,  
магистрант, г. Караганда, Республика Казахстан, [dsk-02@mail.ru](mailto:dsk-02@mail.ru)

**Рожкова К.С.**

Карагандинский университет имени академика Е. А. Букетова,  
научный сотрудник-постдокторант, старший преподаватель,  
г. Караганда, Республика Казахстан, [ksusharogovaya@mail.ru](mailto:ksusharogovaya@mail.ru)

*В настоящей работе приведены результаты исследования влияния наночастиц  $WS_2$  на структурные особенности дырочно-транспортного слоя PEDOT:PSS. Разработана технология получения нанокomпозитных пленок PEDOT:PSS, допированных наночастицами  $WS_2$ . Показано, что наночастицы  $WS_2$  в структуре пленки PEDOT:PSS способствуют изменению шероховатости поверхности тем самым влияя на морфологию.*

**Ключевые слова:** Наночастицы, фотоактивный слой, PEDOT:PSS, атомно-силовая микроскопия, морфология, нанокomпозитные пленки.

На сегодняшний день солнечная энергетика является наиболее привлекательным альтернативным источником энергии. Она может быть преобразована непосредственно как в тепловую, так и в электрическую энергию. Фотоэлектрические технологии быстро развиваются и привлекают внимание ученых, исследователей и инженеров. Благодаря низкой стоимости и простоте технологии изготовления, солнечные элементы на основе полимерных материалов являются одними из наиболее перспективных фотоэлектрических устройств.

Полимерные солнечные элементы имеют многослойную структуру и состоят из нескольких функциональных слоев. Основным слоем явля-

ется фотоактивный слой, обычно это смесь фотоактивного полимера и производных фуллерена.

Фотоактивный полимер поглощает фотоны, что приводит к образованию экситонов. Экситон представляет собой пару электрона и дырки, связанных между собой кулоновской силой. Фотоиндуцированные экситоны диффундируют к границе раздела полимера и фуллерена, где носители заряда могут быть разделены.

Для транспорта носителей заряда к внешним электродам необходимы селективные по заряду слои для эффективного извлечения носителей заряда. В случае OSC решающее значение имеет дырочно-транспортный слой, который извлекает дырки из фотоактивного полимера. Одним из популярных и многообещающих дырочно-селективных и дырочно-транспортных материалов является PEDOT:PSS [1].

PEDOT:PSS является предметом огромного количества исследований и используется для ряда направлений в производстве тонкопленочной электроники. К таким направлениям можно отнести: перовскитные фотоэлектрические элементы PSC, органические фотоэлектрические элементы OSC, органические светоизлучающие диоды, прозрачные проводники, органические электрохимические транзисторы, гибкая электроника и термоэлектрические генераторы.

Одной из особенностей PEDOT:PSS является возможность использования в качестве потенциальной замены дорогих прозрачных оксидов металлов, таких как ITO и FTO. Было установлено, что он эффективен как в органических, так и в перовскитных фотоэлектрических устройствах. Кроме того, в сочетании с металлическими решетчатыми структурами полимер может обладать сопротивлением слоя, сравнимым с пленками оксидов металлов [2-3].

В данной работе исследовался полимерный материал поли(3,4-этилендиокситиофен) полистиролсульфонат (PEDOT:PSS). Модификация PEDOT:PSS проводилась путем добавления на этапе пробоподготовки наночастиц дисульфида вольфрама ( $WS_2$ ). Наночастицы были получены методом лазерной абляции вещества в жидкости. Структурная формула использованного соединения приведен ниже на рисунке 1.



Рисунок 1. Структурная формула использованного соединения

Наночастицы двумерных дихалькогенидов переходных металлов WS<sub>2</sub> были получены абляцией порошка WS<sub>2</sub> второй гармоникой твердотельного Nd:YAG лазера LQ 529 производителя SOLAR ( $\lambda_{сен} = 532$  нм,  $E_{имп} = 180$  мДж,  $\tau_{имп} = 20$  нс). В качестве среды использовался изопропанол. Концентрация навески порошка WS<sub>2</sub> составила 0,5% от общего объема спирта. Время абляции составляло от 15 до 30 минут.

Перед проведением экспериментов водный раствор PEDOT:PSS (1%, Ossila A14083) фильтровали при помощи 0,45 микрометрового шприцевого фильтра. Дырочно-транспортный слой PEDOT:PSS при помощи дозатора (30-50 мкл) наносился на поверхность ИТО или FTO подложек методом центрифугирования (на центрифуге SPIN150i, Semiconductor Production System) при скорости вращения 5000 об/мин. Время вращения центрифуги при данной скорости вращения – не менее 30 секунд. Затем, для кристаллизации пленки и полного удаления воды из слоя PEDOT:PSS, подложки подвергали термическому отжигу на атмосфере воздуха при температуре 120°C в течение 10 минут. По изображениям, полученным при помощи атомно-силового микроскопа, толщина нанесенной на поверхность подложки пленки дырочно-транспортного слоя PEDOT:PSS составила 20-40 нм. АСМ снимок поверхности пленки PEDOT:PSS приведен на рисунке 2.

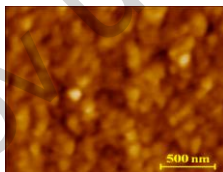


Рисунок 2. Морфология поверхности дырочно-транспортного слоя PEDOT:PSS

Для создания нанокомпозитной пленки PEDOT:PSS:NP WS<sub>2</sub> в раствор PEDOT:PSS были добавлены наночастицы в различных концентрациях; от 2% до 10%. Расчет концентрации наночастиц WS<sub>2</sub> в растворе производился исходя из плотности вещества WS<sub>2</sub> согласно формуле (1):

$$C_{NP} = \frac{C_{WS_2}}{m_{NP} \cdot N_A} = \frac{C_{WS_2}}{\rho_{WS_2} \cdot V_{NP} \cdot N_A} = \frac{m_{WS_2}}{V_{sol} M_{WS_2}} \left( \frac{mol}{L} \right) \quad (1)$$

где  $C_{NP}$  – концентрация наночастиц в растворе;

$C_{WS_2}$  – концентрация вещества в растворе до лазерной абляции вещества WS<sub>2</sub>;

$m_{NP}$  – вес средней наночастицы;  
 $N_A$  – число Авогадро;  
 $\rho_{WS_2}$  – плотность вещества  $WS_2$ ;  
 $V_{NP}$  – объем средней наночастицы;  
 $m_{WS_2}$  – вес мишени вещества  $WS_2$ ;  
 $V_{sol}$  – объем растворителя, используемого при лазерной абляции;  
 $M_{WS_2}$  – молярная масса вещества  $WS_2$ ;  
 $r$  – радиус средней наночастицы.

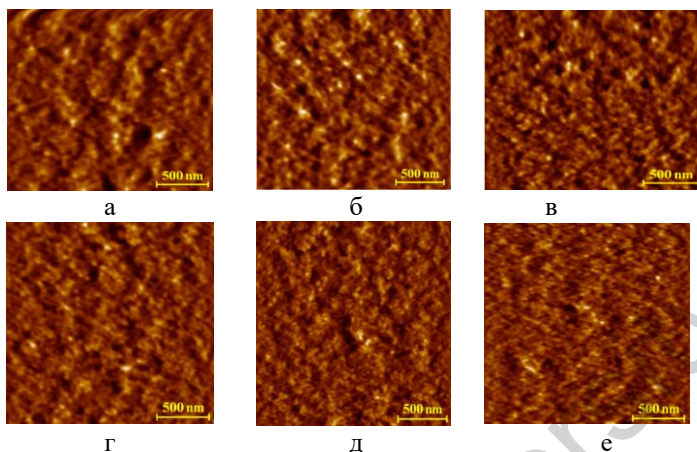
Нанокompозитные пленки PEDOT:PSS:NP  $WS_2$  получали на поверхности подложки FTO методом центрифугирования при скорости вращения 5000 об/мин. После пленки отжигали при температуре 120°C в течение 10 минут для полного испарения растворителя.

Морфология поверхности образцов исследовалась при помощи атомно-силового микроскопа JSPM-5400 производства JEOL Ltd. Для сканирования использовали зонды фирмы-производителя NT-MDT. Сканирование производилось в полуконтактном режиме при параметрах резонансной частоты 140-390 кГц, жесткости кантилевера 3,1-37,6 Н/м и радиуса скругления зонда 10 нм. Область сканирования образцов варьировалась от 100x100 нм до 20x20 мкм, скорость сканирования составляла 10 мкм/с. Расчет параметров морфологии поверхности осуществлялся с использованием пакета прикладных программ WinspmII Data Processing производства JEOL Ltd.

Для создания нанокompозитной пленки наночастицы  $WS_2$  добавляли в раствор PEDOT:PSS. Расчет концентрации наночастиц  $WS_2$  в растворе производился исходя из плотности вещества  $WS_2$  согласно формуле, описанной в методике эксперимента. Снимки морфологии поверхности нанокompозитных пленок PEDOT:PSS представлены на рисунке 3.

Из рисунка 4 видно, что пленка PEDOT:PSS без добавления наночастиц имеет мелкозернистую структуру, шероховатость поверхности ( $R_a$ ) составляет 0,54 нм. После добавления наночастиц  $WS_2$  в полимер PEDOT:PSS параметр  $R_a$  изменяется (таблица 1).

Увеличение концентрации от 0 до 6% приводит к медленному росту  $R_a$  от 0,54 до 0,58 нм соответственно (таблица 14). Дальнейшее увеличение концентрации до 10% приводит к резкому росту  $R_a$ , достигающему значения 0,75 нм. В таблице 14 и на рисунке 4 показана зависимость шероховатости поверхности от концентрации наночастиц  $WS_2$ .



а – PEDOT:PSS; б – PEDOT:PSS:WS<sub>2</sub> 10μl(2%); в – PEDOT:PSS:WS<sub>2</sub> 20μl(4%); г – PEDOT:PSS:WS<sub>2</sub> 30μl(6%); д – PEDOT:PSS:WS<sub>2</sub> 40μl(8%); е – PEDOT:PSS:WS<sub>2</sub> 50μl(10%)

Рисунок 3. АСМ изображения нанокompозитных пленок PEDOT:PSS:WS<sub>2</sub> с различной концентрацией наночастиц в растворе

Таблица 1. Зависимость шероховатости поверхности тонких пленок PEDOT:PSS, легированных WS<sub>2</sub>, от концентрации наночастиц

Образец	$R_a$ , нм	$C_{NP}$ , моль/л
PEDOT:PSS	0,54	0
PEDOT:PSS:WS <sub>2</sub> 10μl (2%)	0,56	$1,24 \cdot 10^{-12}$
PEDOT:PSS:WS <sub>2</sub> 20μl (4%)	0,57	$2,49 \cdot 10^{-12}$
PEDOT:PSS:WS <sub>2</sub> 30μl (6%)	0,58	$3,73 \cdot 10^{-12}$
PEDOT:PSS:WS <sub>2</sub> 40μl (8%)	0,74	$4,97 \cdot 10^{-12}$
PEDOT:PSS:WS <sub>2</sub> 50μl (10%)	0,75	$6,22 \cdot 10^{-12}$

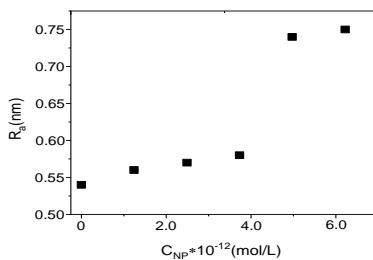


Рисунок 4. Диаграмма зависимости шероховатости поверхности пленки от концентрации наночастиц WS<sub>2</sub> в растворе полимера PEDOT:PSS

В ходе исследования разработана технология получения наночастиц  $WS_2$  методом лазерной абляции в изопропиловом спирте. Получены нанокompозитные пленки PEDOT:PSS, допированные наночастицами  $WS_2$ . Определена критическая концентрация наночастиц  $WS_2$  в составе нанокompозитной пленки PEDOT:PSS:NP  $WS_2$ , равная 6%, при превышении которой наблюдается возрастание шероховатости поверхности пленок PEDOT:PSS в 1,4 раза.

### Список литературы

1. Gusain A., Faria R.M. et al. Polymer Solar Cells – Interfacial Processes Related to Performance Issues // Front. Chem. – 2019. – Vol. 7. – P. 61-1-61-25.

2. Alemu D., Wei H.Y., Ho K.-C. et al. Highly conductive PEDOT:PSS electrode by simple film treatment with methanol for ITO-free polymer solar cells // Energy Environ. Sci. – 2012. – Vol. 5, №11. – P. 9662-9671.

3. Kaltentbrunner M., Adam G., Głowacki E.D. et al. Flexible high power-per-weight perovskite solar cells with chromium oxide–metal contacts for improved stability in air // Nat. Mater. – 2015. – Vol. 14, №10. – P. 1032-1039.

### ВЛИЯНИЕ ТЕМПЕРАТУРЫ ОТЖИГА НА ЭЛЕКТРОФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ПЛЕНОК $NiO_x$

**М.К. Бейсембеков, С.К. Тажибаев, А.А. Берик, А.А. Боканова,  
А.Ж. Тусипов, А.К. Зейниденов**

Карагандинский университет им. Букетова, Научный центр нанотехнологий и функциональных наноматериалов, г. Караганда, Казахстан, [baiboldy\\_han@mail.ru](mailto:baiboldy_han@mail.ru)

*В данной работе проведены исследования по влиянию температуры оксидирования пленок  $NiO_x$  на электрофизические свойства. Пленки  $NiO_x$  были получены методом spin-coating из раствора гексагидрат нитрата никеля в этиленгликоле с последующим термическим оксидированием в диапазоне 200-450°C. Повышение температуры оксидирования приводит к уменьшению толщины формируемых пленок  $NiO_x$ . Методом импеданс спектроскопии исследованы электротранспортные характеристики пленок  $NiO_x$ . Возрастание температуры оксидирования пленок  $NiO_x$  приводит к возрастанию значения суммарного сопро-*