

келесі қадамдарды қамтиды: циклодекстрин конформациясының өзгеруі; бастапқыда циклодекстрин қуысында орналасқан су молекулаларының бөлінуі; қонақ-кожайын бойынша қуысына тікелей енуі және валентті емес өзара әрекеттесу арқылы кешендердің пайда болуы (вандерваальс, гидрофобты, электростатикалық және стэкингтік өзара әрекеттесу, сутегімен байланысу, зарядты тасымалдау, стерикалық әсерлер).

Жалпы алғанда, *in silico* әдісі 1:1 циклодекстрин әсерінен изохинолин қаңқасының енуінің әртүрлі дәрежелерімен сипатталатын күрделі құрылымдардың екі түрін түзуді көрсетті. β -циклодекстрин полюстерінің қайталама гидроксилдерінің жанында "қонақ" молекулаларының сақинасы толықтырылған қосу кешенінің бағыты энергия бойынша тиімді. Мұндай түзілу кешенінде бір молекулааралық су байланысы құрылады. 1 типті сальсолин - β -циклодекстрин жүйесінің кешені үшін вакуумда да, суда да тиімді өзара әрекеттесуді атап өтуге болады, ал γ -циклодекстрині бар 1 типті кешен үшін тиімді өзара әрекеттесу тек вакуумда байқалады.

Пайдаланылған әдебиеттер тізімі

Naggar M. H. et al. The old world salsola as a source of valuable secondary metabolites endowed with diverse pharmacological activities: a review // *Journal of Enzyme Inhibition and Medicinal Chemistry*. – 2022. – Т. 37. – №. 1. – С. 2036-2062.

Кушербаева С. Ш. Қазақстанның оңтүстік өңірінде жерсіндірілген қараматау үлгілерінің биологиялық ерекшеліктері мен азықтық өнімділігі / С. Ш. Кушербаева, Е. А. Алжанов // *Qazaqtaný*. – 2021. – No. 1(9). – P. 112-115.

Narayanan G. et al. Cyclodextrin-based nanostructures // *Progress in Materials Science*. – 2022. – Т. 124. – С. 100869.

Poulson B. G. et al. Cyclodextrins: Structural, chemical, and physical properties, and applications // *Polysaccharides*. – 2021. – Т.3. – №.1. – С.1-31.

Nurkenov O. A., Seilkhanov T. M., Fazylov S. D., Issayeva A. Z., Seilkhanov O. T., & Zhaksybayeva G. S. Obtaining and research of the supramolecular complexes of alkaloid salsoline with cyclodextrins by NMR spectroscopy // *News of the Academy of sciences of the Republic of Kazakhstan. Series chemistry and technology*. - 2019. – 1. - P. 64-69. <https://doi.org/10.32014/2019.2518-1491.9>

Frisch M.J., Trucks G.W., Schlegel H. B. et al. Gaussian 16, Revision B.01. – Wallingford: Gaussian Inc., 2016. <http://gaussian.com>

Dennington R., Keith T., & Millam J. GaussView, Version 6. - Semichem Inc., Shawnee Mission, KS, 2016. <http://gaussian.com>

ӘОК 535.37

ЖОҒАРЫ ТОҚТЫ ЭЛЕКТРОНДЫҚ ШОҒЫРЫМЕН ҚОЗДЫРЫЛҒАН ВОЛЬФРАМАТТАРДЫҢ КАТОЛЮМИНЕСЦЕНЦИЯСЫНЫҢ СПЕКТРАЛДЫҚ- КИНЕТИКАЛЫҚ СИПАТТАМАЛАРЫН ЗЕРТТЕУ

Бакиева Ж.Қ., академик Е.А. Бөкетов атындағы Қарағанды университеті, Қарағанды, Қазақстан
Лисицын В.М., Томск политехникалық Ұлттық зерттеу университеті, Томск қ., Ресей Федерациясы
Алпысова Г.К., академик Е.А. Бөкетов атындағы Қарағанды университеті, Қарағанды, Қазақстан
Афанасьев Д.А., академик Е.А. Бөкетов атындағы Қарағанды университеті, Қарағанды, Қазақстан
Тилегенова К.М., академик Е.А. Бөкетов атындағы Қарағанды университеті, Қарағанды, Қазақстан

MeWO_4 жалпы формуласы бар өтпелі металл вольфраматтары, мұндағы Me – сілтілі жер (Ca, Mg) және Zn, Pb, Cd, Co, Ni сияқты өтпелі металдар [1], соңғы онжылдықтарда бірегей физика-химиялық қасиеттеріне және практикалық қолдану аясының кең ауқымына байланысты зерттеушілердің айрықша назарын аударуда. Аталған қосылыстарға деген ерекше қызығушылық олардың иондаушы сәулеленуді тіркеу үшін қолданылатын скинтилляциялық материалдар ретінде болашағы зор болуымен түсіндіріледі [2].

Вольфрамат кристалдары бірқатар артықшылықтарға ие: олардың тығыздығы жоғары, спектрдің көрінетін аймағында (~400–500 нм) люминесценцияның кең жолағына [3] және ылғал тартпайтын қасиетке ие, бұл олардың пайдалану тұрақтылығын айтарлықтай арттырады. Жарық шығару тиімділігі бойынша олар сілтілік галлоидты кристалдарға жол берсе де, радиациялық төзімділік тұрғысынан едәуір басым, сондықтан мұндай материалдар қарқынды радиациялық әсер жағдайында қолдануға сұранысқа ие. Сонымен қатар, кең аймақтық жартылай өткізгіштік қасиеттерінің арқасында бұлар ылғалдылық датчиктерін [4], фотокатализаторларды [5] және басқа да функционалды құрылғыларды жасауға перспективті материалдар ретінде қарастырылады.

Осы себептерге байланысты, ауыспалы металдардың вольфраматтарын зерттеу қазіргі заманғы материалтану ғылымының өзекті бағытын құрайды, себебі олардың құрылымдық, оптикалық және электрондық сипаттамаларының үйлесімі жоғары төзімділікке және ұзақ қызмет етуге ие жаңа буынды скинтилляциялық және функционалды материалдарды әзірлеуге мүмкіндік ашады.

Осы жұмыста [6] отқа төзімді вольфраматтарына ZnWO_4 , MgWO_4 және CaWO_4 негізделген керамика синтезделді. Ол металл оксидтері ұнтақтарының стехиометриялық қоспасынан, энергиясы 1,4 МэВ болатын жоғары энергиялы электрондардың қуатты ағынының әсері арқылы алынды.

Электрондық сәулелену әсерінен керамикалық үлгілердің қалыптасуы барысында жарық шығару орталықтары түзіледі деп болжанады. Олардың құрылымдық негізін W^{6+} , O^{2-} иондары, сондай-ақ заряд тасымалдау және рекомбинация үдерістерінде маңызды рөл атқаратын оттегі бос орындары болуы мүмкін.

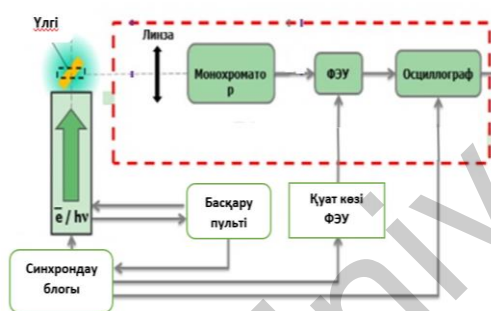
Алдын ала жүргізілген зерттеулер, жеделдетілген электрондар ағынымен қоздырылғанда вольфрамат негізіндегі синтезделген керамика үлгілерінде люминесценция құбылысы байқалатынын көрсетті. Сонымен қатар алынған материалдың сапасын айқындайтын заңдылықтарды анықтау үшін бастапқы шикізаттың құрамы мен синтез шарттарына байланысты оның люминесценттік қасиеттерін жан-жақты зерттеу қажет.

Люминесцентті материалдардың сапасын сипаттайтын негізгі параметрлерге спектралдық және кинетикалық сипаттамалар жатады. Олар жарық шығару орталықтарының табиғатын анықтауға, қозған күйлердің релаксация механизмдерін айқындауға, сондай-ақ люминесценция үдерістерінің тиімділігін бағалауға мүмкіндік береді.

Осы зерттеудің мақсаты $ZnWO_4$, $MgWO_4$ және $CaWO_4$ негізінде синтезделген керамикалық үлгілердің люминесценттік қасиеттеріне спектрлік-кинетикалық талдау жүргізу, сондай-ақ материалдардың құрылымдық ерекшеліктері мен олардың жарық шығаратын сипаттамалары арасындағы байланысты орнату болып табылады.

Зерттелген үлгілердің катодтылюминесценция (КЛ) спектрлері электронды үдеткіште қоздыру арқылы анықталды. Үдеткіш төмендегі параметрлері бар жекелеген импульстерді генерациялады: электрондардың энергиясы – 0,25 МэВ, импульстің жарты биіктіктегі ұзақтығы – 10 нс, токтың ең жоғарғы тығыздығы – 100 А/см²-ге дейін, ал қоздыру энергиясының тығыздығы 1–50 мДж/см² аралығында өзгерді.

Аталған үдеткіш «Импульс 1» қондырғысының құрамдас бөлігі болып табылады, оның блок-схемасы 1-суретте көрсетілген.



1-сурет. «Импульс-1» қондырғысының блок-схемасы.

Үлгі вакуумдық камераға орналастырылды, ал люминесценцияның сөну кинетикасы ФЭУ-97 фотокобейткіштің көмегімен тіркелді. Өлшеулер МДР-23 монохроматоры (спектралдық сезімталдық диапазоны 200–2000 нм, сызықтық дисперсиясы 1,3 нм/мм) және Tektronix DPO3034 (300 МГц) цифрлық осциллографы арқылы жүзеге асырылды. Импульстік катодтылюминесценцияның (ИКЛ) интегралдық сәуле шығару спектрлерін тіркеу үшін талшықты-оптикалық AvaSpec-2048 (200–1100 нм) спектрофотометр құрылғысы қолданылды. Люминесценция спектрлері өлшеу жүйесінің оптикалық трактінің спектралдық сезімталдығын ескере отырып түзетілді. Электрондар пайдаланатын энергияларды қоздыру кезінде ағынның жалпы сіңірілген энергиясының кемінде 99%-ы матрицада электронды тесік қозуларын жасауға жұмсалады, пайда болған электронды тесік қозулары энергияны люминесценция орталықтарына береді. Электрондар ағынының әсерінен қоздыру электрондардың өту тереңдігінің бүкіл көлемінде жүзеге асады.

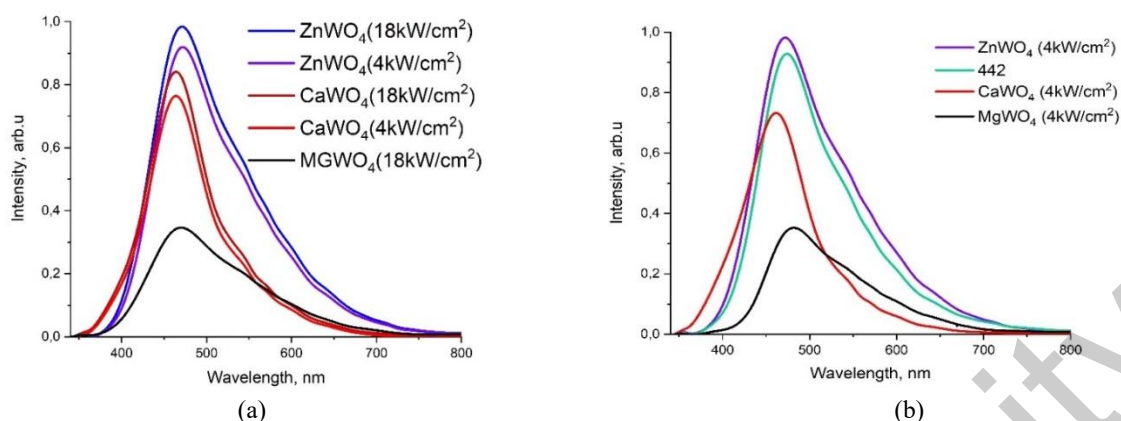
Магний, мырыш және кальций вольфраматтарына негізделген керамикалық үлгілерді энергиясы 250 кэВ жеделдетілген электрондар ағынымен қоздыру кезінде қарқынды катодтылюминесценция байқалады. Зерттелген үлгілердің құрамы мен нөмірлері 1-кестеде келтірілген.

1 кесте – Зерттелген үлгілер туралы негізгі ақпарат

Үлгі №	Үлгінің құрамы	P, кВт/см ²	Катодтылюминесценцияның спектралдық сипаттамалары	
			λ_{max} , нм	Жолақтың жартылай ені, нм
509	$ZnWO_4$ (ZnO-26%, WO_3 -74%)	4	471	110
510	$ZnWO_4$ (ZnO-26%, WO_3 -74%)	18	471	110
511	$MgWO_4$ (MgO-14,8%, WO_3 -85,2%)	4	472	130
512	$MgWO_4$ (MgO-14,8%, WO_3 -85,2%)	18	472	130
513	$CaWO_4$ (CaO-19,5%, WO_3 -80,5%)	4	463	70
514	$CaWO_4$ (CaO-19,5%, WO_3 -80,5%)	18	463	70
509*	$ZnWO_4$ (ZnO-26%, WO_3 -74%)	4	471	110
511*	$MgWO_4$ (MgO-14,8%, WO_3 -85,2%)	4	473	130
513*	$CaWO_4$ (CaO-19,5%, WO_3 -80,5%)	4	462	70
442*	$ZnWO_4$ (ZnO-26%, WO_3 -74%)	4	472	130

*- нәтижелердің қайталануын тексеру мақсатында жаңа партиядағы үлгілердің құрамы ескі партия негізінде дайындалды

Алынған люминесценция спектрлері спектрдің көрінетін аймағында орналасқан және негізінен монотонды сәуле шығару жолағымен сипатталады. Синтезделген керамикалық үлгілердің КЛ интегралдық люминесценция спектрлерін өлшеу нәтижелері 2-суретте келтірілген.



2-сурет. Үлгілердің катодтылюминесценция спектрлері (a) 1 партия и (b) 2 партия.

Спектралдық сипаттамаларды талдау нәтижесінде барлық зерттелген $ZnWO_4$, $MgWO_4$ және $CaWO_4$ үлгілері қуат тығыздығының 4 және 18 кВт/см^2 деңгейінде синтезделгенін көрсетті. Сонымен қатар, қуат тығыздығы 4 кВт/см^2 кезіндегі алынған барлық үлгілердің сынғыштығы жоғары екендігі байқалды, ал қуат тығыздығы 18 кВт/см^2 кезіндегі синтезделген үлгілер мұндай ақауларды көрсеткен жоқ.

Барлық үлгілер бірдей бастапқы материалдардан дайындалған шихтадан синтезделді. Шихта синтездің алдында тікелей дайындалды. Люминесценция жолақтарының пішіні барлық жағдайда күрделі сипатқа ие. Зерттелген үлгілердің барлығында люминесценция жолақтарының максимумдары айқын байқалады және қысқа толқынды шетке ығысқан. Ал ұзынтолқынды шетінде сәуле шығару бұрмаланған, бұл, шамасы, басқа жолақтардың қабаттасуынан туындаған.

Сәулелену өрісінде синтезделген керамикалық үлгілердің өлшенген катодтылюминесценция спектрлерінің сипаттамалары $ZnWO_4$, $MgWO_4$ және $CaWO_4$ кристалдарының белгілі фотолюминесценция спектрлеріне [7] жақсы сәйкес келеді.

Керамиканың барлық түрлеріндегі люминесценция жолақтарының максимумдарының орналасуы бір-біріне жақын және $462\text{--}473 \text{ нм}$ диапазонында болады. Бұл барлық үлгілер үшін люминесценция орталықтарының құрылымы ұқсас екенін көрсетуі мүмкін. Мұндай орталықтар оттегі -вакансиялық комплекстер болуы ықтимал. $ZnWO_4$ және $MgWO_4$ керамикасының катодтылюминесценция жолақтары $CaWO_4$ жолағынан ұзын толқынды аймақта құрылымдық жағынан күрделі жиектің болуымен ерекшеленетінін атап өткен жөн. Алдын ала алынған деректерге сүйене отырып, $ZnWO_4$ үлгілері люминесценцияның ең тұрақты және қайталанатын сипаттамаларын көрсетеді деп қорытынды жасауға болады [8].

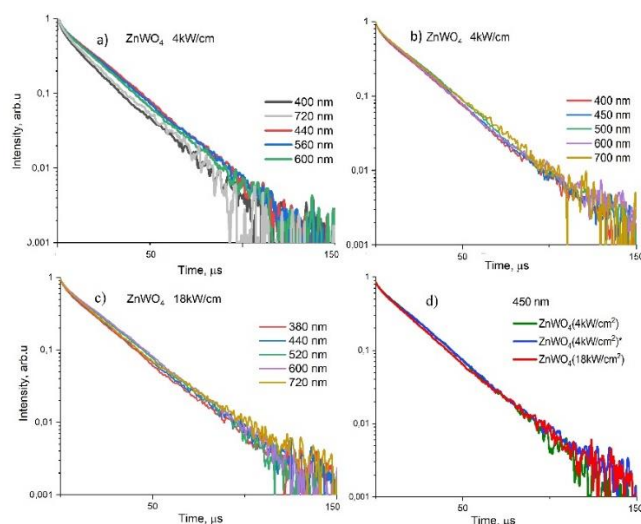
Керамикалық үлгілердің люминесценциясының релаксация кинетикасы электрондық ағынның жартылай биіктіктегі ұзақтығы 10 нс импульсімен қоздырғаннан кейін зерттелді. Қолданылған стандартты уақыттық рұқсаттылығы 10 нс құрайды. Катодтылюминесценцияның сөнуінің сипаттамалық уақыттары микросекундтық уақыт диапазонында жатады және екі компонентті экспоненциалдық функциямен сипатталады, мұндағы $\tau_1 \approx 25 \text{ нс}$, $\tau_2 \approx 2 \text{ мкс}$, $\tau_3 \approx 20 \text{ мкс}$.

3-суретте $ZnWO_4$ үлгісінің катодтылюминесценциясының сөнуінің тәжірибелік қисықтары әртүрлі тіркеу толқын ұзындықтары мен қоздыру шарттары үшін келтірілген. Көріп отырғанымыздай, уақыттық тәуелділіктер мультиэкспоненциалды сипатқа ие және ұсынылған модельмен жақсы сипатталады. Қисықтардың пішіні мен релаксация уақыттары тіркеу толқын ұзындығына және қоздыру қуатының тығыздығына әлсіз тәуелді, бұл зерттелген үлгілердегі сәуле шығару орталықтарының табиғаты бірдей екенін көрсетеді.

Тәжірибелік түрде $MgWO_4$ үлгілерінің катодтылюминесценциясының сапасына синтездің қуат тығыздығы айтарлықтай әсер ететіні анықталды. $MgWO_4$ үлгісі (4 кВт/см^2) катодтылюминесценцияны өлшеу кезінде соншалықты әлсіз сигнал береді, тіпті барынша қолайлы жағдайларда тек $450\text{--}500 \text{ нм}$ спектралдық максимумында ғана дұрыс кинетикалық қисықтарды алуға мүмкіндік туады (4, а-сурет). Синтез энергиясы тығыздығының артуы сцинтиллятор сапасын жақсартуға ықпал етеді. Бұл $MgWO_4$ үлгісінің (16 кВт/см^2) катодтылюминесценциясы қоздыру мен тіркеудің бірдей жағдайларында неғұрлым қарқынды болуымен расталады (4, b-сурет). Алайда, қуат тығыздығының $4\text{--}18 \text{ кВт/см}^2$ диапазонында өзгеруі люминесценцияның кинетикалық қисықтарының пішінін өзгертпейді (4, c-сурет).

$MgWO_4$ люминесценциясының сөнуінің сипаттамалық уақыттары екі компонентті экспоненциалдық функциямен сипатталуы мүмкін, мұнда $\tau_1 \approx 16 \text{ нс}$, $\tau_2 \approx 6 \text{ мкс}$; $\tau_3 \approx 19 \text{ мкс}$.

Кинетикалық қисықтар микросекундтық диапазонда бірнеше релаксация уақыттарымен экспоненциалды сөну сипатына ие. Талдау көрсеткендей, әртүрлі тіркеу толқын ұзындықтарында алынған қисықтардың пішіні (5, a, b, c -суреттер) іс жүзінде бірдей, бұл сәуле шығару орталықтарының табиғатының бірыңғай екенін дәлелдейді. Әртүрлі синтез режимдерінде алынған үлгілерді салыстыру (5, c-сурет) синтездің қуат тығыздығын 4-тен 18 кВт/см^2 -ге дейін өзгерту катодтылюминесценцияның релаксация уақыттарына айтарлықтай әсер етпейтінін көрсетті.

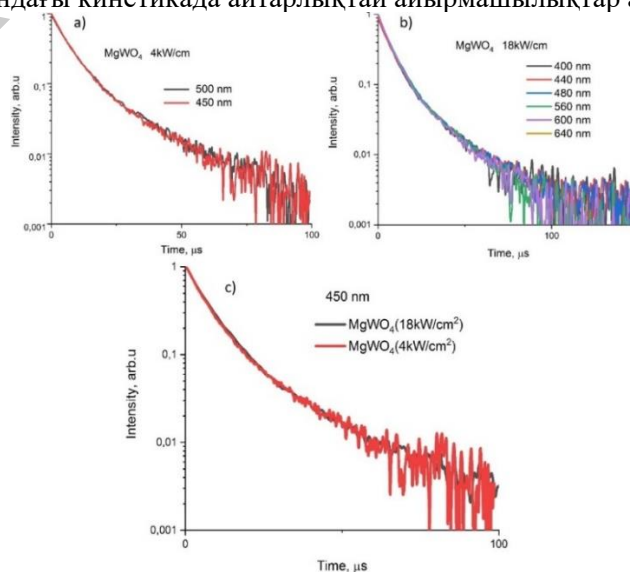


3-сурет. $ZnWO_4$ катодтылюминесценциясының кинетикалық қисықтары: (а, б) қуат тығыздығы 4 кВт/см^2 жағдайда синтезделген үлгілер; (с) қуат тығыздығы 18 кВт/см^2 жағдайда синтезделген үлгілер; (д) $\lambda = 450 \text{ нм}$ кезінде әртүрлі синтез жағдайларында алынған үлгілердің сөну қисықтарын салыстыру.

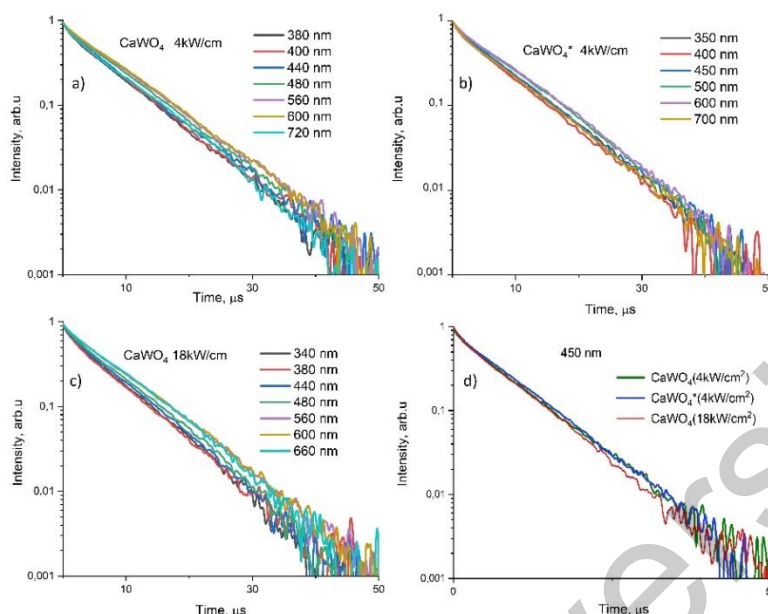
Осылайша, $CaWO_4$ үшін, $MgWO_4$ және $ZnWO_4$ сияқты, сөнудің сипаттамалық уақыттары негізінен матрицаның ақаулы күйлерінің ерекшеліктерімен айқындалады және синтез жағдайларына елеулі түрде тәуелді емес. Мырыш, магний және кальций вольфраматтарына негізделген керамикалық үлгілердің катодтылюминесценциясының спектралдық және уақыттық сипаттамаларын зерттеу олардың ортақ заңдылықтары мен күйлерінің ерекшеліктерін айқындауға мүмкіндік береді.

Барлық жағдайда катодтылюминесценция спектрлері көрінетін аймақта ($350\text{--}750 \text{ нм}$) орналасқан және негізінен $430\text{--}520 \text{ нм}$ диапазонында максимумымен сипатталатын кең біржолақты құрылымға ие. Бұл вольфрамат кристалдары үшін белгілі деректермен сәйкес келеді, мұнда жарқырау $[WO_6]$ -комплексстеріндегі электрон–тесік қозулардың радиациялық рекомбинациясымен түсіндіріледі. Өлшеу жүйесінің спектралдық сипаттамасына енгізілген түзету әртүрлі партиялар спектрлерінің формасы бірдей екенін және оның матрицаның табиғатымен айқындалатынын көрсетті, ал синтездің қуат тығыздығы ($4\text{--}18 \text{ кВт/см}^2$) спектралдық жолақтардың орны мен формасына елеулі әсер етпейді.

Катодтылюминесценция релаксация кинетикасын талдау (3–5 суреттер) барлық үш материал үшін релаксация уақыттары микросекундтық диапазонда жатқан экспоненциалдық әлсіреу заңдылықтарымен сипатталатынын көрсетті. Ең жақсы эксперименттік деректер бірнеше өмір сүру уақыты бар модельмен жуықталады ($\tau_1 \approx 25 \text{ нс}$, $\tau_2 \approx 2 \text{ мкс}$, $\tau_3 \approx 20 \text{ мкс}$), бұл жылдам және баяу рекомбинация арналарының бәсекелестігін көрсетеді. Әр түрлі режимдерде (4 және 18 кВт/см^2) синтезделген үлгілер арасындағы кинетикада айтарлықтай айырмашылықтар анықталған жоқ.



4-сурет. $MgWO_4$ катодтылюминесценциясының кинетикалық қисықтары: (а) қуат тығыздығы 4 кВт/см^2 жағдайда синтезделген үлгілер; (б) қуат тығыздығы 18 кВт/см^2 жағдайда синтезделген үлгілер; (с) $\lambda = 450 \text{ нм}$ кезінде әртүрлі синтез жағдайларында алынған үлгілердің сөну қисықтарын салыстыру.



5-сурет. $CaWO_4$ катодтылюминесценциясының кинетикалық қисықтары: (а, б) қуат тығыздығы 4 кВт/см^2 жағдайда синтезделген үлгілер; (с) қуат тығыздығы 18 кВт/см^2 жағдайда синтезделген үлгілер; (д) $\lambda = 450 \text{ нм}$ кезінде әртүрлі синтез жағдайларында алынған үлгілердің сөну қисықтарын салыстыру.

Салыстырмалы талдау нәтижелері көрсеткендей:

- $ZnWO_4$ ең жоғары жарық шығару қарқындылығына және айқын спектрлік максимумға ие, бұл оны сцинтилляциялық детекторларда қолдануға перспективті материал етеді.

- $CaWO_4$ ұқсас спектрлік сипатқа ие, бірақ оның қарқындылығы салыстырмалы түрде төмендеу, ал әлсіреу уақыттары көпкомпонентті экспоненциалдық тәуелділіктерге жақын.

- $MgWO_4$ люминесценция қарқындылығы ең төмен, спектрлерінің ақаулық күйлеріне тәуелділігі айқынырақ. Бұл, шамасы, керамиканың жоғары сынғыштылығымен және синтез барысында құрылымының қалыптасу ерекшеліктерімен байланысты.

Жүргізілген зерттеулер негізінде вольфраматтар $ZnWO_4$ және $CaWO_4$ керамикалық үлгілерінің спектралды-кинетикалық сипаттамалары $MgWO_4$ -ға қарағанда неғұрлым тұрақты және қайталанымды екені анықталды. Алынған нәтижелер көрсеткендей, зерттелген керамикалық материалдар монокристалдардың негізгі қасиеттерін сақтайды, алайда синтез технологиясы мен ақаулық құрылымына байланысты белгілі бір ерекшеліктерге ие. Бұл ерекшеліктер керамиканың люминесценттік қасиеттерін оңтайландыру мақсатында синтез шарттарын әрі қарай жетілдірудің қажеттілігін айқындайды.

Зерттеу жұмысы Қазақстан Республикасы Ғылым және жоғары білім министрлігінің Ғылым комитетінің қолдауымен орындалды (№ AP19579177 гранты).

Пайдаланылған әдебиеттер тізімі

1. Nagirnyi V., Feldbach E., Jönsson L., Kirm M., Kotlov A., Lushchik A., Nefedov V.A., Zadneprovski B.I. Energy transfer in $ZnWO_4$ and $CdWO_4$ scintillators. // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research. – 2002. – Vol. 486. - P. 395–398. [https://doi.org/10.1016/S0168-9002\(02\)00740-4](https://doi.org/10.1016/S0168-9002(02)00740-4).

2. Mikhailik V.B., Kraus H. Cryogenic scintillators in searches for extremely rare events / Journal of Physics D. - 2006. – Vol. 39. No. 6. P. 1181–1191. DOI 10.1088/0022-3727/39/6/026.

3. Derraji, K.; Lucena, L.; Favotto, C.; Valmalette, J.-C.; Villain, S.; Nolibe, G.; Lyoussi, A.; Guinneton, F.; Gavarrri, J.-R. Structural, vibrational and photoluminescence properties of samarium doped cobalt tungstates. J. Mol. Struct. 2022, 1254, 131983. <https://doi.org/10.1016/j.molstruc.2021.131983>

4. Ganiger, S.K.; Chalubaraju, B.; Ananda, S.R.; Murugendrappa, M. A Feasibility Study of Polypyrrole/Zinc Tungstate (Ceramics) Nano Composites for D. C. Conductivity and as a Humidity Sensor. *Mater. Today Proc.* 2018, 5, 2803–2810. <https://doi.org/10.1016/j.matpr.2018.01.068>

5. de Macedo, O.B.; de Oliveira, A.L.M.; dos Santos, I.M.G. Zinc tungstate: A review on its application as heterogeneous photocatalyst. *Cerâmica* 2022, 68, 294–315. <https://doi.org/10.1590/0366-69132022683873265>

6. Alpysova G., Lisitsyn V., Bakiyeva Zh., Chakin I., Kaneva E., Afanasyev D., Tussupbekova A., Vaganov V., Tulegenova A., Tuleuov S. Characterization of ZnWO₄, MgWO₄, and CaWO₄ Ceramics Synthesized in the Field of a Powerful Radiation Flux. // *MDPI Journal. Ceramics.* -2024. - Vol.7(3). pp. 1085-1099. <https://doi.org/10.3390/ceramics7030071>

7. Alpysova G.K., Bakiyeva Zh.K., Denisov I.P., Kaneva E.V., Domarov E.V., Tussupbekova A.K. Dependence of the Radiation Synthesis Efficiency of Ceramics Based on Tungstates on the Flow Power. *Bulletin of the Karaganda University. Physics series.* – 2024. – Volume. 29. – No.4(116). – P. 9-19. <https://doi.org/10.31489/2024PH4/9-19>

8. Alpysova G.K., Afanasyev D.A., Bakiyeva Zh.K., Lisitsyna L.A., Golkovski M.G., Tussupbekova A.K., Kissabekova A.A., Tuleuov S.D. Optical properties of ZnWO₄ ceramics obtained by radiation synthesis. *Bulletin of the Karaganda University. Physics series.* – 2024. – Volume. 29. – No.3(115). – P. 51-60. <https://doi.org/10.31489/2024PH3/51-60>

УДК

УЛУЧШЕНИЕ ЭФФЕКТИВНОСТИ И СТАБИЛЬНОСТИ ИНВЕРТИРОВАННЫХ PSCs С ПОМОЩЬЮ HTL НА ОСНОВЕ NiO_x/CoPc

Бейсембеков М.К., Карагандинский университет имени Е.А. Букетова, Караганда, Казахстан
Тажиббаев С.К., Карагандинский университет имени Е.А. Букетова, Караганда, Казахстан
Зият А.З., Карагандинский университет имени Е.А. Букетова, Караганда, Казахстан
Мендибаева А.Ж., Карагандинский университет имени Е.А. Букетова, Караганда, Казахстан
Зейниденов А.К., Карагандинский университет имени Е.А. Букетова, Караганда, Казахстан

Аннотация

В данной работе показано, что использование бислойных пленок на основе NiO_x фталоцианина кобальта (CoPc) является перспективным HTL для PSCs. Пленки NiO_x были получены методом spin-coating из золь-гель раствора. Получение пленок (CoPc_{evap}) и нанолент (CoPc_{nws}) на поверхности NiO_x осуществлялось методами термического напыления и физического градиентно-температурного осаждения из паровой фазы. Показано, что PSCs с слоем NiO_x имеют низкую эффективность преобразования мощности (PCE) 18,1%. Использование промежуточного слоя CoPc_{evap} между NiO_x и перовскитов повысило PCE до 19.1%. Максимальная эффективность PSCs до 20.7% достигнуто с бислойным HTL на основе NiO_x/CoPc_{nws}.

Ключевые слова: перовскитные солнечные элементы, оксид никеля, кобальт фталоцианин, слои переноса дырок, оптические свойства, электрические транспортные характеристики.

Введение

Оксид никеля (NiO_x) является одним из наиболее перспективных материалов для переноса дырок в инвертированных перовскитных солнечных элементах. Эффективность преобразования световой энергии в электрическую в инвертированных PSCs на основе NiO_x превысил 20%. Эти показатели были получены благодаря простоте синтеза, широкой полосе пропускания (>3,5 эВ), выгодному расположению максимума валентной зоны (VBM~5,4 эВ), хорошей химической стабильностью по сравнению с другими неорганическими материалами [1,2].

В данной работе нами получены высокоэффективные и стабильные перовскитные солнечные элементы на основе бислойных нанокompозитных дырочно-транспортных слоев оксида никеля и фталоцианин кобальта. Представлены результаты исследования влияния пленок и нанолент CoPc на эффективность генерации и транспорта зарядов в PSCs.

2. Материалы и методы

2.1. Подготовка образцов и процесс осаждения

Состав HTL. Получение пленок оксида никеля на поверхности твердой подложки осуществлялось из растворов [Ni(NO₃)₂·6H₂O] (m=145 мг) в этиленгликоле (V=1 мл). К полученному раствору добавляли 5 мкл моноэтаноламина. Раствор перемешивали при комнатной температуре в течение 16 часов, а затем выдерживали в течение 24 часов. Методом золь-гель получены пленки NiO_x при скорости вращения подложки 1500 об/мин на центрифуге SPIN150i (Semiconductor Production System). Полученные пленки предварительно отжигали при температуре 100°C в течение 15 минут. После пленки отжигались на атмосфере воздуха при температурах 300°C в течение 45 минут.