

НАНОРАЗМЕРНЫЕ И НАНОСТРУКТУРИРОВАННЫЕ  
МАТЕРИАЛЫ И ПОКРЫТИЯ

УДК 541.65/654:547.551

ОПТИМИЗАЦИЯ ТОЛЩИНЫ ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ СЛОЕВ  
ПОЛИМЕРНЫХ СОЛНЕЧНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ:  
МОДЕЛИРОВАНИЕ И ЭКСПЕРИМЕНТ

© 2021 г. О. Д. Якобсон<sup>1</sup>, О. Л. Грибкова<sup>1</sup>, А. Р. Тамеев<sup>1</sup>, \*

<sup>1</sup>Институт физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина РАН,  
Ленинский просп., 31, корп. 4, Москва, 119071 Россия

\*e-mail: [tameev@elchem.ac.ru](mailto:tameev@elchem.ac.ru)

Поступила в редакцию 27.01.2020 г.

После доработки 14.03.2021 г.

Принята к публикации 19.03.2021 г.

Исследованы фотоэлектрические и оптические характеристики органического солнечного элемента (ОСЭ) с дырочно-транспортным слоем на основе комплекса полианилина и фотоактивным слоем с объемным гетеропереходом на основе производного политиофена РЗНТ и фуллерена  $PC_{71}BM$ . Результаты моделирования оптических свойств функциональных слоев и экспериментальных измерений характеристик ОСЭ позволили установить оптимальные значения толщины функциональных слоев для достижения максимального КПД устройства. Определено, что дырочно-транспортный слой толщиной 30–60 нм, при этом имеющий пропускание более 80%, эффективно переносит дырки на фотоанод из фотоактивного слоя, в котором темп генерации экситонов составляет  $5.6–5.9 \times 10^{16} \text{ см}^{-2} \text{ с}^{-1}$ . Эти значения темпа генерации экситонов при максимальном общем поглощении света в устройстве обеспечивает фотоактивный слой толщиной 90–100 нм.

DOI: 10.31857/S0044185621040240

## ВВЕДЕНИЕ

Солнечная энергетика является актуальным направлением развития мировой энергетике в связи с остротой проблем экологии и безопасности традиционных источников электроэнергии. Современные исследования направлены на разработку эффективных солнечных элементов на основе органических и полимерных материалов, которые, хотя и уступают по эффективности фотопреобразования традиционным солнечным кремниевым элементам, привлекают интерес исследователей возможностью получения легких, недорогих и гибких пленочных устройств большой площади, не требующих специальных, трудоемких технологий для их обработки [1].

Органический солнечный элемент (ОСЭ) стандартной структуры содержит фотоактивный слой (ФС), в котором протекает фотогенерация заряда, и зарядо-транспортные слои для сбора электронов и дырок на электродах [2]. В органическом (полимерном) ФС поглощенный молекулой фотон переводит ее в возбужденное состояние (генерирует экситон), из которого электрон либо релаксирует в основное состояние, либо переходит на другую молекулу, образуя свободные носители заряда — электрон и дырку. Диссоциации экситона на свободные носители заряда происхо-

дит с наибольшей вероятностью между электронодонорной и электроноакцепторной молекулами или на границе раздела фаз электронодонорных и электроноакцепторных молекул. Следовательно, для повышения эффективности органического/полимерного солнечного элемента за счет повышения концентрации носителей заряда необходимо увеличить площадь границы раздела этих фаз. В этой связи плодотворным подходом является формирование ОГП, который состоит из взаимопроникающих непрерывных фаз электроноакцепторного и электронодонорного соединений [2]. Типичные донорные фотопроводники — производные полифениленвинилена, полиалкилтиофены и т.п. Типичным акцептором материалом для ОГП служат фуллерен и его производные. Поскольку в органических полупроводниках длина диффузии экситонов не превышает ~10 нм, то при создании ОСЭ крайне важная задача — оптимизация структуры и толщины ОГП. Оптимизация толщин этих слоев рассматривается как один из эффективных способов повышения КПД фотопреобразования ОСЭ, поскольку позволяет установить условия, при которых интенсивность света внутри активного слоя будет максимальной, обеспечивая высокую плотность сгенерированных экситонов [3]. При этом очевидно, что рост степени поглощения будет пропорционален

толщине активного слоя, однако, максимальная толщина будет ограничена возрастающей долей рекомбинационных потерь [4–6].

Для нахождения оптимума толщин слоев привлекаются как эмпирически полученные результаты [7–10], так и результаты математического моделирования [3–5, 7, 9–11]. Очевидно, что найденные значения будут справедливы для каждой конкретной системы в зависимости от строения ОСЭ и материалов, используемых для формирования слоев. Подавляющее число работ посвящено структурам со стандартным ФС на основе смеси поли-3-гексилтиофена и производного фуллерена (РЗНТ-РСВМ) и дырочным транспортным слоем (ДТС) на основе комплекса производного политиофена с полистиролсульфонатом (ПЭДОТ-ПСС) [4–8, 10–12]. Следует, однако, отметить, что зачастую авторами исследован ряд толщин ФС и ДТС с достаточно широким шагом (от 50 нм и выше) [8, 9]. В настоящей работе материалом для ДТС служил комплекс проводящего полимера – полианилина с поли-2-акриламидо-2-метил-1-пропансульфоновой кислотой (ПАНИ-ПАМПСК) [13]. В отличие от комплекса ПЭДОТ-ПСС, который характеризуется образованием твердой фазы в дисперсии при хранении, относительно высокой кислотностью, гигроскопичностью слоя [2], ПАНИ-ПАМПСК лишен указанных недостатков, обладает достаточным уровнем проводимости [14, 15], стабильностью электрических и оптических свойств в течение более 2-х лет [16] и может быть успешно применен в качестве дырочно-транспортных слоев ОСЭ с объемным гетеропереходом [17]. Исследований, посвященных оптимизации толщин слоев устройства структуры ДТС (ПАНИ-ПАМПСК)/ФС (РЗНТ-РСВМ) до настоящего времени проведено не было.

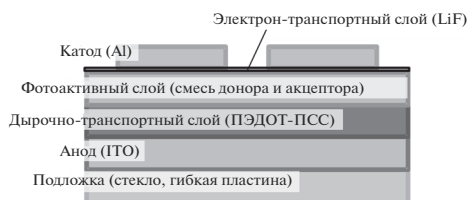
Актуальной остается задача теоретического предсказания диапазона оптимальных толщин слоев ОСЭ, обеспечивающих максимальную производительность устройства. Предварительная оценка диапазонов толщины функциональных слоев ОСЭ, комбинация которых с высокой долей вероятности будут соответствовать устройству с максимальной эффективностью, позволит сократить затраты материалов и времени на подготовку серии экспериментальных образцов, и материалов в особенности, в случае поиска новых материалов для ОСЭ. Среди методов моделирования широкое распространение получил метод матриц переноса [4–6, 11, 13], примененный в работе [18] к расчету поглощенной оптической энергии в многослойной структуре. Однако ограниченное число работ посвящено прямому сравнению результатов, полученных экспериментально и с помощью моделирования, что оставляет открытым вопрос справедливости

используемой модели и выводов в каждом рассматриваемом случае.

Целью настоящей работы является оптимизация структуры органического фотовольтаического устройства с дырочно-транспортным слоем на основе комплекса ПАНИ-ПАМПСК и стандартным фотоактивным слоем с объемным гетеропереходом путем экспериментального поиска толщин и условий нанесения ФС и ДТС, обеспечивающих максимальную эффективность работы ОСЭ на их основе, а также с привлечением численного моделирования методом матриц переноса. Сопоставление экспериментальных результатов с результатами моделирования позволит оценить адекватность используемой модели, а также определить оптические параметры системы, дающие максимальный КПД экспериментальных образцов.

## ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ ЧАСТЬ

В настоящей работе были исследованы ОСЭ со структурой, представленной на схеме 1. Для приготовления образцов ОСЭ использовали очищенную стеклянную подложку, покрытую проводящим слоем оксида индия-олова – ИТО (удельное поверхностное сопротивление 15 Ом/□, Kintec), который выступал в роли фотоанода.



**Схема 1.** Структура органического солнечного элемента: прозрачная подложка (1,1 мм) / фотоанод ИТО (100 нм) / дырочно-транспортный слой ПАНИ-ПАМПСК (~30-90 нм) / фотоактивный слой РЗНТ:РС71ВМ (~30-100 нм) / электрон-транспортный слой LiF (0,9 нм) / фотокатод Al (80 нм).

На данную подготовленную подложку нанесли ДТС, в качестве которого был выбран водорастворимый комплекс проводящего полимера полианилина – ПАНИ-ПАМПСК, зарекомендовавший себя в качестве перспективного материала для формирования тонких пленок с дырочной проводимостью [14]. Комплекс ПАНИ-ПАМПСК был получен по описанной ранее методике [13]. Формирование тонких пленок комплекса ПАНИ-ПАМПСК проводили методом послойного нанесения на установке Dipping Robot DR-0 (R&K GmbH). При однослойном нанесении подложку выдерживали в течение 60 с в водной дисперсии комплекса ПАНИ-ПАМПСК с концентрацией ~10–12 мг/мл, нагретой до 55°C, затем вытягивали со скоростью – 0,03 см/с. При двухслойном нанесении ДТС полученный после пер-

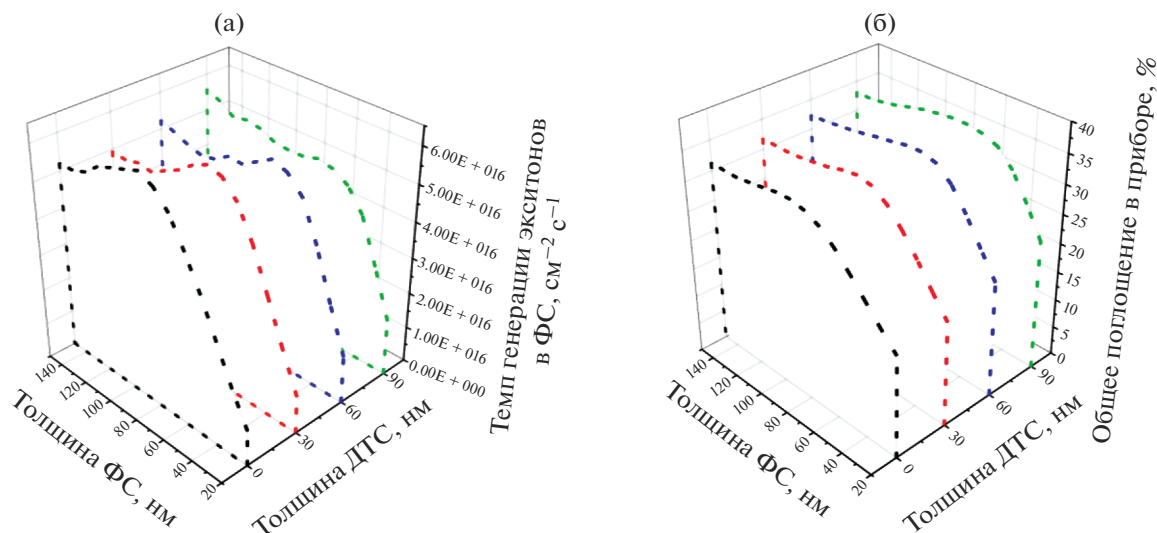


Рис. 1. Зависимость темпа генерации экситонов в активном слое (а) и общего поглощения в приборе (б) от толщины ФС для фиксированных значений толщин ДТС.

вого цикла слой сушили 200 с на воздухе и далее вытягивали образец со скоростью 0.2 см/с без выдерживания подложки в дисперсии. Третий слой получали аналогично второму.

Дальнейшие операции выполняли в перчаточном боксе с сухой атмосферой аргона [19]. Формирование ФС проводили из смеси растворов электронодонорного полимера поли-3-гексилтиофена (РЗНТ, Rieke Metals) и электроакцепторного производного фуллера (PC<sub>71</sub>BM, SES Research) в хлорбензоле с массовым соотношением компонентов РЗНТ : PC<sub>71</sub>BM = 1 : 0.8. Для оптимизации толщины ФС были использованы две комбинации растворов различных концентраций: РЗНТ – 10 мг/мл : PC<sub>71</sub>BM – 8 мг/мл и РЗНТ – 11 мг/мл : PC<sub>71</sub>BM – 8.8 мг/мл. Также толщину ФС изменяли путем варьирования скорости и времени центрифугирования. Толщину слоев, определяли с помощью профилометра KLA-Tencor D-100 Profiler. Сверху ФС наносили электрон-транспортный слой LiF толщиной 0.9 нм и фотокатод Al толщиной 80 нм методом вакуумного термического напыления со скоростью 1.2 Å/с при остаточном давлении 10–6 Торр в вакуумной установке Edwards Evaporator Auto500.

Измерения вольт-амперных характеристик ОСЭ выполняли с помощью источника-измерителя Keithley 2400 в герметичном боксе с сухой атмосферой аргона при освещении ксеноновой лампой имитатора солнечного излучения Newport (Oriel Instruments) при стандартной мощности светового потока 100 мВт/см<sup>2</sup> (AM1.5G).

Моделирование оптических параметров ОСЭ проводили с использованием метода матриц переноса, подробно описанного в [18]. Метод за-

ключается в представлении ОСЭ в виде набора плоских слоев, каждый из которых характеризуется своей толщиной и комплексным показателем преломления, описываемым в рамках модели Максвелла–Гарнета [20]. Оптические константы (показатель преломления  $n'$  и коэффициент экстинкции  $k$ ) для пленки ПАНИ-ПАМПСК и слоя ИТО были определены экспериментально с помощью эллипсометра UVISEL2VUV (Horiba). Спектральная зависимость эллипсометрических углов  $\Psi$  и  $\Delta$  снималась с шагом 5 мЭВ при угле падения 70°. Обработка исходных данных проводилась с использованием программы DeltaPsi2. При интерпретации данных эллипсометрии ИТО дисперсию оптических постоянных описывали с помощью классической модели дисперсии Лоренца [21]. При обработке данных для полимера ПАНИ-ПАМПСК была использована модель “New Amorphous”, успешно применяемая к аморфным органическим полупроводникам и полимерам [22]. В рамках модели выражения показателя преломления и коэффициента экстинкции также имеют лоренцеву форму:

$$n(\omega) = n_{\infty} + \frac{B(\omega - \omega_j) + C}{(\omega - \omega_j)^2 + \Gamma_j^2}, B = \frac{F_j}{\Gamma_j} [\Gamma_j^2 - (\omega_j - \omega_g)^2],$$

$$C = 2f_j\Gamma_j(\omega_j - \omega_g)$$

$$k(\omega) = \begin{cases} \frac{f_j(\omega - \omega_g)^2}{(\omega - \omega_j)^2 + \Gamma_j^2}, & \omega > \omega_g \\ 0, & \omega \leq \omega_g \end{cases}$$

где  $n_{\infty}$  – показатель преломления при  $\omega \rightarrow \infty$ ;  $\omega$  – частота световой волны, эВ;  $\omega_g$  – ширина запрещенной зоны, эВ;  $\omega_j$  – энергия, при которой ко-

**Таблица 1.** Толщина ФС при максимальном темпе генерации экситонов в активном слое и максимальном поглощении в приборе для фиксированной толщины ДТС

Толщина ДТС, нм	0	30	60	90
Толщина ФС при максимальном темпе генерации экситонов и максимальном поглощении в приборе, нм	90	80	70	70
Максимальный темп генерации экситонов в активном слое, см <sup>-2</sup> с <sup>-1</sup>	$6.13 \times 10^{16}$	$5.87 \times 10^{16}$	$5.61 \times 10^{16}$	$5.05 \times 10^{16}$
Максимальное поглощение в приборе, %	32.6	33.8	35.0	35.9

**Таблица 2.** Рабочие характеристики ОСЭ структуры ИТО (100 нм)/ПАНИ-ПАМПСК (30–80 нм)/РЗНТ : РС<sub>71</sub>ВМ (40 нм)/LiF (1 нм)/Al (60 нм)

Толщина ДТС, нм	Характеристики ОСЭ*			
	$J_{КЗ}$ , мА/см <sup>2</sup>	$U_{ОЦ}$ , В	$FF$ , %	КПД, %
30	5.09	0.65	38.1	1.3
60	5.51	0.63	39.9	1.4
80	4.25	0.66	43.4	1.2

\* Здесь и далее  $J_{КЗ}$  – плотность тока короткого замыкания в точке нулевого смещения потенциала;  $U_{ОЦ}$  – напряжение открытой цепи в точке с нулевым значением тока;  $FF$  – фактор заполнения; КПД фотопреобразования, который определяется выражением:  $КПД = \frac{J_{КЗ} \times U_{ОЦ} \times FF \times 100\%}{P}$ , где  $P$  – мощность падающего света, равная 100 мВт/см<sup>2</sup> в стандартном условии АМ1.5.

эффицент экстинкции максимален (пик поглощения), эВ;  $f_j$  – амплитуда пика коэффициента экстинкции;  $\Gamma_j$  – параметр ширины, эВ;  $j = 5$ . При решении обратной задачи эллипсометрии устанавливали параметры конкретной модели путем сравнения экспериментальных и рассчитанных эллипсометрических спектров. Оптические параметры ФС и слоя Al были взяты из работ [20] и [21], соответственно, т.к. наши условия формирования данных слоев аналогичны условиям в этих работах. При расчетах слой LiF не учитывали из-за его пренебрежимо малой толщины. Вывод уравнений, использованных для расчета оптических параметров, приведен в статьях [25, 26]. Для расчета темпа генерации экситонов в активном слое использовали формулу:

$$G = \int_0^d G(z) dz = \int_0^d \left( \int_0^\infty S(\lambda) \gamma(\lambda) \frac{\lambda}{hc} Q_\lambda(z) d\lambda \right) dz,$$

где  $d$  – толщина активного слоя,  $G(z)$  – темп генерации экситонов в плоскости произвольной координаты  $z$ ,  $Q_\lambda(z)$  – удельная поглощенная мощность излучения длины волны  $\lambda$ , определяемая коэффициентом поглощения и интенсивностью света внутри ОСЭ,  $\gamma(\lambda)$  – эффективность конверсии фотон-экситон;  $S(\lambda)$  – спектральная плотность интенсивности солнечного излучения с нормировкой  $\int_0^\infty S(\lambda) d\lambda = 1$  (использован табули-

рованный спектр АМ1.5G). При этом  $\gamma(\lambda) = 1$ , как это показано для полимерных композитов с РСВМ [11], включая рассматриваемую донорно-акцепторную систему РЗНТ и РСВМ, поскольку в этих системах каждый поглощенный фотон генерирует экситон, который быстро (за время  $\leq 45$  фс) распадается на электрон и дырку с вероятностью, близкой к единице [27].

Удельную поглощенную мощность излучения рассчитывали согласно уравнению

$$Q\lambda(z) = 4\pi k(\lambda, z)P(\lambda, z)/\lambda,$$

где  $P(\lambda, z)$  – интенсивность света внутри ОСЭ.

Поглощение света в ФС,  $A_{act}(\lambda)$ , определяли согласно выражению:

$$A_{act}(\lambda) = \int_{\lambda_{down}}^{\lambda_{up}} A(\lambda)S(\lambda)d\lambda,$$

где  $A(\lambda)$  – коэффициент поглощения на длине волны  $\lambda$ . Расчет общего поглощения световой энергии в устройстве проводили по следующей формуле:

$$\begin{aligned} 100 \times \int_0^d A_{act}(\lambda)S(\lambda)d\lambda &= \\ &= 100 \times \int_0^d \left( \int_{act} Q_\lambda(z) dz / P_0 \right) S(\lambda) d\lambda, \end{aligned}$$

**Таблица 3.** Характеристики ОСЭ структуры ИТО (100 нм)/ПАНИ-ПАМПСК (30–60 нм)/РЗНТ : РС<sub>71</sub>ВМ (от 30 до 100 нм)/LiF (1 нм)/Al (60 нм)

Условия нанесения ФС				Характеристики ОСЭ			
соотношение РЗНТ : РС <sub>71</sub> ВМ (мг/мл : мг/мл)	частота вращения, об./мин	время вращения, с	толщина слоя ФС, нм	$J_{КЗ}$ , мА/см <sup>2</sup>	$U_{ОЦ}$ , В	$FF$ , %	КПД, %
10 : 8	1500	60	30–40	4.07	0.63	49.8	1.3
10 : 8	900	60	50–60	5.85	0.64	51.3	1.9
11 : 8.8	2000	45	50–60	5.85	0.64	51.3	1.9
11 : 8.8	600	60	90–100	8.05	0.63	48.3	2.4
11 : 8.8	900	60	90–100	8.82	0.64	53.4	3.0
11 : 8.8	2000	45	90–100	8.82	0.64	53.4	3.0

где  $A_{act}$  – поглощение в активном слое ОСЭ света длиной волны  $\lambda$ ,  $P_0$  – интенсивность света на входе в ОСЭ. Все расчеты были выполнены в спектральном диапазоне излучения от 360 до 800 нм.

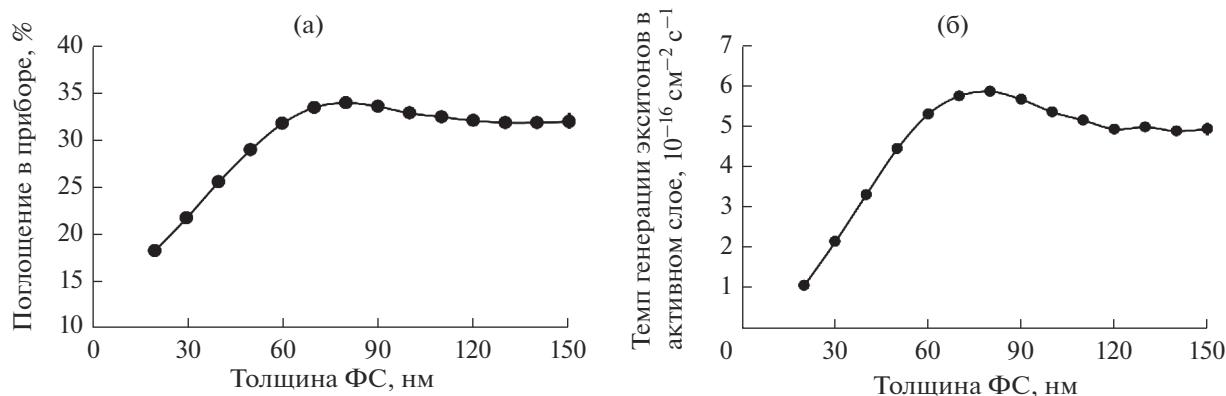
## РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Важную роль в структуре ОСЭ играет дырочно-транспортный слой, предназначенный для эффективного сбора дырок на фотоанде и блокирования электронов [2]. Толщина ДТС может влиять на значения рабочих характеристик ОСЭ [2], поэтому сначала был проведен численный расчет изменения оптических характеристик ОСЭ при изменении толщины ДТС в интервале 0–90 нм. При этом для нахождения оптимальной комбинации толщины ФС и ДТС расчеты вели для диапазона толщины ФС от 20 до 150 нм. На рис. 1 представлены зависимости темпа генерации экситонов в активном слое и общего поглощения световой энергии в устройстве от толщины ФС для значений толщин ДТС 0, 30, 60 и 90 нм.

В табл. 1 приведены значения толщин ФС для каждой исследованной толщины ДТС, соответствующие максимальному темпу генерации экситонов в активном слое и максимальному поглощению в приборе.

Как видно из рис. 1 и табл. 1, увеличение толщины ДТС ведет к смещению максимума зависимости темпа генерации экситонов в активном слое и поглощения в приборе от толщины ФС в сторону меньших толщин ФС. Кроме того, с ростом толщины ДТС наблюдается снижение максимального значения темпа генерации экситонов и повышение максимального значения поглощения. Противоположно направленное влияние толщины ДТС на эти два фактора, по-видимому, должно приводить к тому, что результирующие значения КПД устройства не будут сильно зависеть от толщины ДТС.

Действительно, как видно из табл. 2, в которой приведены численные характеристики образцов ОСЭ, изменение толщины ДТС не оказывают заметного влияния на значения КПД. Согласие между экспериментально полученными и расчетными

**Рис. 2.** Изменение темпа генерации экситонов в активном слое (а) и общего поглощения в приборе (б) в зависимости от толщины ФС.

данными подтверждает применимость выбранной расчетной модели.

При нанесении ДТС толщиной менее 30 нм возможно формирование не сплошного слоя. Приготовление ДТС толщиной более 60 нм нецелесообразно, т.к. нарушается равномерность толщины слоя по площади образца. Таким образом, целесообразно использовать ДТС толщиной в интервале 30–60 нм, что обеспечивает эффективный сбор дырок на фотоаноде и достаточный уровень темпа генерации экситонов в ФС при сохранении относительно высокого значения поглощения в приборе.

Важно отметить, что для приготовления экспериментальных образцов ОСЭ нанесение ДТС осуществляли методом послойного вытягивания из дисперсии комплекса ПАНИ-ПАМПСК. В отличие от широко применяемого метода центрифугирования, данный метод позволяет формировать слои из растворов/дисперсий соответствующих материалов при комнатной температуре на подложках большой площади с высокой воспроизводимостью толщины и качества слоев. Использование такой масштабируемой автоматизированной технологии нанесения слоев особенно актуально при переходе от лабораторных исследований к практическим разработкам фотоэлектрических устройств.

Оптимизации толщины ФС ОСЭ уделяется особое внимание как способу повышения эффективности работы устройства. Это связано с тем, что с ростом толщины активного слоя, с одной стороны, увеличивается степень поглощения света, с другой стороны, увеличивается время диффузии свободных носителей заряда в слое, поэтому снижается их концентрация из-за рекомбинационных потерь [4–6, 24]. При этом экспериментальные и теоретические исследования показывают, что оптимальная толщина полимерного фотоактивного слоя обычно не превышает 120–150 нм [3–5, 8, 11].

В этой связи было изучено влияние толщины и способа нанесения ФС на основе стандартной композиции с объемным гетеропереходом (РЗНТ : РС<sub>71</sub>ВМ) и дырочным транспортным слоем на основе комплекса ПАНИ-ПАМПСК на рабочие характеристики ОСЭ (табл. 3). Видно, что с увеличением толщины слоя ФС они повышаются. Очевидно, что могут изменяться только оптические свойства (например, степень пропускания) и характеристики поверхности слоя (наличие дефектов сплошности пленки, шероховатость).

Относительно высокие фотоэлектрические характеристики показали образцы ОСЭ с ФС, полученным из более концентрированного раствора, при следующем режиме нанесения: вращение подложки со скоростью 900 об./мин в течение

60 с и затем 2000 об./мин в течение 45 с. При скорости центрифугирования 600 об./мин получали неравномерный по толщине слой, что ухудшало кпд ОСЭ. Таким образом, однородность слоя по толщине играет значительную роль в эффективности работы устройства.

Для оценки влияния толщины ФС на характеристики устройства было проведено моделирование оптических параметров полимерного полупроводника методом матриц переноса. При этом эффективный показатель преломления был описан в рамках модели Максвелла–Гарнета. Структура расчетной ячейки соответствовала экспериментальному образцу ОСЭ. Толщину ФС варьировали в интервале от 20 до 150 нм.

На рис. 2 представлены графики зависимости темпа генерации экситонов в активном слое (а) и общего поглощения в приборе (б) от толщины ФС.

Как видно, с ростом толщины ФС наблюдается резкое повышение темпа генерации экситонов вплоть до толщины ФС ~80 нм, после чего наблюдается небольшое его снижение с выходом на плато. Такой же характер наблюдается для зависимости общего поглощения в устройстве от толщины ФС, максимум которой тоже приходится на значения 80–90 нм.

Полученные результаты согласуются с полученными экспериментальными данными, согласно которым кпд фотопреобразования при толщинах активного слоя 90–100 нм превышает таковой для толщины 50–60 нм. При этом из расчетов видно, что повышение толщины ФС более 100 нм не представляется целесообразным, т.к. ведет к снижению как общего поглощения в приборе, так и темпа генерации экситонов. Последнее согласуется с данными, полученными другими авторами, которые установили, что при толщине активного слоя до 100 нм сгенерированные носители заряда успевают достигнуть поверхность электрода до того, как происходит их рекомбинация [5].

Таким образом, расчетные данные, полученные в настоящей работе, показывают, что максимальный кпд экспериментально полученного ОСЭ, по-видимому, реализуется за счет сочетания наибольшего темпа генерации экситонов в активном слое и максимального общего поглощения света в устройстве.

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе исследовано влияние толщины функциональных слоев ОСЭ на фотоэлектрические характеристики устройства, в котором в качестве ДТС был использован комплекс ПАНИ-ПАМПСК, в качестве ФС – смесь полимера РЗНТ и фуллерена РС<sub>71</sub>ВМ, образующих объемный гетеропереход. Для формирования ОСЭ также был предложен способ нанесения ДТС заданной толщины мето-

дом послойного вытягивания (dip coating) образца из водной дисперсии комплекса ПАНИ-ПАМПСК. Он позволяет формировать тонкие пленки с высокой воспроизводимостью толщины и качества слоев на подложках большой площади.

Результаты моделирования оптических характеристик ОСЭ с помощью метода матриц переноса и представления эффективного показателя преломления в рамках модели Максвелла–Гарнета показали, что в диапазоне толщины ДТС 30–90 нм поглощение света и темп генерации экситонов в устройстве имеют наибольшие значения при толщине ФС 60–100 нм. Эти результаты хорошо согласуются с результатами экспериментов. Сопоставление однородности слоев по толщине и вольт-амперных характеристик ОСЭ показало, что диапазоны оптимальной толщины ДТС и ФС равны 30–60 и 90–100 нм, соответственно. Таким образом, использованные модельные представления применимы для оценки диапазона оптимальных параметров функциональных слоев ОСЭ, а для оценки эффективности работы устройства достаточно выполнить расчет темпа генерации экситонов в ФС и общего поглощения световой энергии.

#### БЛАГОДАРНОСТИ

Авторы выражают благодарность к. т. н. В.С. Левицкому (НТЦ Тонкопленочные технологии в энергетике, ЦКП “Оптоэлектроника”) за проведение эллипсометрических измерений, к. ф.-м. н. Р.Ш. Ихсанову (НИУ ВШЭ) за ценные замечания по моделированию оптических параметров солнечных элементов.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ (грант № 18-29-23005).

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Koul S., Hakim N. // Trans. Electr. Electron. Mater. 2018. V. 19. № 5. P. 319.
2. Po R., Carbonera C., Bernardi A., Camaioni N. // Energy Environ. Sci. 2011. V. 4. № 2. P. 285.
3. Gondek E. // Opto-Electronics Review. 2014. V. 22. № 2. P. 77.
4. Liu L., Li G. // 11th IEEE International Conference on Nanotechnology. 2011. P. 332.
5. Farrokhifar M., Rostami A., Sadoogi N. // European Modelling Symposium. 2014. P. 507.
6. Malti I., Chiali A., Ne Chabane Sar. // Applied Solar Energy. 2016. V. 52. № 2. P. 122.
7. Ameri T. et al. // J. Applied Physics 2014. V.103. № 8. P. 084506.
8. Lee D., Kim J., Noh S., Lee C. // 10th IEEE International Conference on Nanotechnology. 2010. P. 1175.
9. Kim W. et al. // ChemSusChem. 2013. V. 6. № 6. P. 1070.
10. Moulé A.J., Bonekamp J.B., Meerholz K. // J. Appl. Phys. 2006. V. 100. № 9. P. 094503.
11. Movla H., Rafi A.M., Rafi N.M. // Optik. 2015. V. 126. № 15–16. P. 1429.
12. Rahmani R. et al. // Plasmonics. 2015. V. 10. № 3. P. 495.
13. Gribkova O.L. et al. // Polymer. 2011. V. 52. № 12. P. 2474.
14. Омельченко О.Д. и др. // Письма в ЖТФ. 2014. Т. 40. № 18. С. 66. [Omelchenko O.D. et al. // Technical Physics Letters. 2014. V. 40. № 9. P. 807.]
15. Jakobson O.D. et al. // Synth. Met. 2016. V. 211. P. 89.
16. Якобсон О.Д. и др. // Физикохимия Поверхности и Защита Материалов. 2016. Т. 52. № 6. С. 613. [Jakobson O.D. et al. // Protection of Metals and Physical Chemistry of Surfaces. 2016. V. 52, № 6. P. 1005.]
17. Jakobson O.D. et al. // J. Ind. Eng. Chem. 2018. V. 65. P. 309.
18. Pettersson L.A.A., Roman L.S., Inganäs O. // J. Appl. Phys. 1999. V. 86. № 1. P. 487.
19. Грибкова О.Л. и др. // Химия высоких энергий. 2016. V. 50. № 2. P. 139. [Gribkova O.L. et al. // High Energy Chemistry. 2016. V. 50. № 2. P. 134.]
20. Oraevsky A.N., Protsenko I.E. // Quantum Electron. 2001. V. 31. № 3. P. 252.
21. www.horiba.com/fileadmin/uploads/Scientific/Downloads/OpticalSchool\_CN/TN/ellipsometer/Classical\_Dispersion\_Model.pdf
22. www.horiba.com/fileadmin/uploads/Scientific/Downloads/OpticalSchool\_CN/TN/ellipsometer/New\_Amorphous\_Dispersion\_Formula.pdf
23. Stelling C. et al. // Sci. Rep. 2017. V. 7. № 1. P. 42530.
24. McPeak K.M. et al. // ACS Photonics. 2015. V. 2. № 3. P. 326.
25. Ихсанов Р.Ш., Проценко И.Е., Усков А.В. // Письма в ЖТФ. 2013. Т. 39. № 10. С. 1. [Ikhsanov R.S., Protsenko I.E., Uskov A.V. // Technical Physics Letters. 2013. V. 39. № 5. P. 450]
26. Sievers D. W., Shrotriya V., Yang Y. // J. Appl. Phys. 2006. V. 100. № 11. P. 114509.
27. Brabec C.J., Sariciftci N.S., Hummelen J.C. // Adv. Funct. Mater. 2001. V. 11. № 1. P. 15.
28. Majumder C., Rai A., Bose C. // Optik. 2018. V. 157. P. 924.