

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Кобелевой Елены Сергеевны «Светоиндуцированные процессы в донорно-акцепторных композитах органических фотоэлементов: Влияние полисопряженных гетероциклических соединений и углеродных нанотрубок» на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.17 – Химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества.

Диссертационная работа Е.С. Кобелевой посвящена экспериментальным исследованиям методами импульсного ЭПР процессов разделения зарядов в органических фотовольтаических ячейках, что является безусловно актуальным для достаточно активно развивающейся области органических фотоэлементов, которые имеют ряд преимуществ, по сравнению с кремниевыми фотоэлементами и фотоэлементами на основе перовскитов, и в тоже время имеют ряд недостатков, в частности сравнительно низкую эффективность. В работе изучается эффективность фотовольтаических ячеек на основе нефуллереновых акцепторов электронов и введение нелетучих добавок - фторированных одностенных углеродных нанотрубок и фторированных многостенных углеродных нанотрубок для предотвращения морфологической деградации донорно-акцепторного композита.

В работе разработана методика получения нескольких типов фторированных одностенных и многостенных углеродных нанотрубок, как добавочного компонента для донорно-акцепторных композитов для создания фотоэлектрических устройств с более высокой эффективностью и стабильностью по сравнению с устройствами на основе чистых композитов. Также детально изучены общие закономерности влияния фторированных CNT нанотрубок на светоиндуцированные процессы в композитах.

Для композита PCDTBT/AT1 был впервые применен метод ЭСЭ вне фазы для установления причин низкой эффективности фотовольтаических ячеек на его основе. А именно, с помощью этого метода было определено начальное расстояние между носителями заряда в геминальной паре (состоянии с переносом заряда), что позволило заключить, что в композите PCDTBT/AT1 геминальная рекомбинация происходит эффективнее, чем в PCDTBT/PCBM. С помощью квантовохимических расчетов показано, что фундаментальной причиной как короткого начального расстояния между зарядами, так и низкой подвижности электронов в фазе акцептора в PCDTBT/AT1 по сравнению с PCDTBT/PCBM является меньшая область локализации электронной плотности в AT1 по сравнению с PCBM. Это заключение вносит ясность в поиск верных направлений в целенаправленном синтезе эффективных акцепторных молекул.

Наиболее важными и интересными являются следующие результаты:

1. Показано, что добавление фторированных одностенных и многостенных углеродных нанотрубок улучшает связность донорных и/или акцепторных доменов фотовольтаических ячеек.
2. Впервые применен метод ЭСЭ вне фазы для композита PCDTBT/AT1, что позволило определить начальное расстояние между носителями заряда в геминальной паре, значение которого объяснило причину того, что геминальная рекомбинация состояния с переносом заряда в фотовольтаической паре PCDTBT/AT1 происходит более эффективно, чем в паре PCDTBT/PCBM, что обуславливает более низкую эффективность фотовольтаических ячеек на основе PCDTBT/AT1.

3. Квантовохимическими расчетами, показано, что главной причиной короткого начального расстояния между зарядами в PCDTBT/AT1 по сравнению с PCDTBT/PCBM является меньшая область локализации электронной плотности в AT1 по сравнению с PCBM.
4. Впервые, с помощью метода ЭСЭ вне фазы было показано, что в композите донорного полимера РЗНТ и полупроводниковых одностенных нанотрубок механизм фотогенерации заряда происходит через образование состояния с переносом заряда, аналогично тому как это происходит в полимер/фуллереновых композитах.

Все основные результаты диссертации, включая выносимые на защиту положения, хорошо аргументированы и их достоверность не вызывает сомнений. Диссертационная работа Е.С. Кобелевой представляет собой завершенное научное исследование. Работа прошла апробацию на многих всероссийских и международных конференциях. Результаты диссертации опубликованы в семи ведущих международных журналах физико-химического профиля.

В целом, диссертационная работа Е.С. Кобелевой «Светоиндуцированные процессы в донорно-акцепторных композитах органических фотоэлементов: Влияние полисопряженных гетероциклических соединений и углеродных нанотрубок» полностью соответствует требованиям, предъявляемым к кандидатским диссертациям, в том числе отвечает критериям пп. 9 - 14 Положения о присуждении ученых степеней, утвержденного постановлением Правительства Российской Федерации № 842 от 24 сентября 2013 г. (в действующей редакции), а ее автор, Елена Сергеевна Кобелева, заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.17 – химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества.

Научный сотрудник
ФГБУН Институт «Международный томографический
центр» СО РАН, кандидат химических наук
по специальности 01.04.17 – Химическая физика,
горение и взрыв, физика экстремальных состояний
веществ

Фишман Наталья Николаевна

тел.: +7 953-796-44-23

e-mail: n_s@tomo.nsu.ru

адрес: 630090, г. Новосибирск,

ул. Институтская, д. 3а

Согласен на включение моих персональных данных в документы,
связанные с работой диссертационного совета, и их дальнейшую обработку.

Подпись Н. Н. Фишман заверяю
Ученый секретарь ФГБУН Институт
«Международный томографический
центр» СО РАН

17 июня 2025 г.



Л. В. Яньшолё