Облікова картка НДДКР

Державний обліковий номер: 0222U001063

Державний реєстраційний номер: 0120U101362

Відкрита

Дата реєстрації: 23-01-2022

1. Етапи виконання

Номер етапу: 1

Назва етапу: Дослідження особливостей катіонного заміщення у нанокристалах четверних халькогенідів металів - матеріалах нового покоління тонкоплівкової фотовольтаїки

Початок етапу: 02-2020

Закінчення етапу: 12-2021

Вид звітного документа: Остаточний звіт

2. Виконавець

Назва організації: Інститут фізики напівпровідників імені В. Є. Лашкарьова Національної академії наук України

Код ЄДРПОУ/ІПН: 05416952

Підпорядкованість: Національна академія наук України

Адреса: пр. Науки, буд. 41, м. Київ, Київська обл., 03028, Україна

Телефон: 380445254020

WWW: http://isp.kiev.ua

3. Власник результатів НДДКР (продукції)

Назва організації: Національна академія наук України

Код ЄДРПОУ/ІПН: 00019270

Адреса: вул. Володимирська, буд. 54, м. Київ, 01061, Україна

Підпорядкованість:

Телефон: 380442343243

E-mail: prez@nas.gov.ua

WWW: http://nas.gov.ua

4. Джерела та напрями фінансування

Підстава для проведення робіт: 34 - договір (замовлення) з центральним органом виконавчої влади, академією наук (головними розпорядниками бюджетних коштів на проведення НДДКР)

КПКВК: 6541230

Напрям фінансування: 2.5 - програми і проекти у сфері міжнародного науково-технічного співробітництва

Джерела фінансування

Джерело фінансування: 7713 - кошти держбюджету

Фактичний обсяг фінансування за звітний етап: 237.000 тис. грн.

5. Науково-технічна робота

Назва роботи (укр)

Дослідження особливостей катіонного заміщення у нанокристалах четверних халькогенідів металів - матеріалах нового покоління тонкоплівкової фотовольтаїки

Назва роботи (англ)

Investigation of the features of cationic substitution in nanocrystals of quaternary metal chalcogenides - materials of the new generation of thin-film photovoltaics

Реферат (укр)

Для покращення структурних та оптичних властивостей тонких плівок на основі четверних халькогенідів типу Cu2ZnSnS4, що призначені для використання в ролі активних шарів фотовольтаїчних елементів, проводилося катіонне (Cu на Ag) та аніонне (S на Se) заміщення. Методом хімічного синтезу були отримані нанокристали сполук (AgxCu1-x)2ZnSnS4 (ACZTS), з наступним формуванням тонких (1 мкм) плівок. Для формування Cu2ZnSn(SxSe1-x)4 (CZTSSe) плівок використано магнетронне напилення відповідних металів з наступним відпалом. Встановлено, що НК (Cu,Ag)-Zn-Sn-S, отримані за допомогою колоїдного синтезу є комбінацією основної четверної (ACZTS) та вторинної Ag-Zn-S фаз. Наявність останньої пояснює немонотонну залежність ширини забороненої зони НК ACZTS від співвідношення Ag/Cu. Встановлена кореляція між зміною елементного складу, морфологією та Eg плівок Cu2ZnSn(SxSe1-x)4 при варіюванні x = S/(S + Se).

Реферат (англ)

Cationic (Cu to Ag) and anionic (S to Se) substitutions were performed to improve the structural and optical properties of Cu2ZnSnS4 quaternary chalcogenides, which are intended for use as active layers of photovoltaic cells. Nanocrystals of (AgxCu1-x)2ZnSnS4 (ACZTS) compounds were obtained by chemical synthesis, followed by the formation of thin (1 μm) films. Magnetron sputtering of the corresponding metals with subsequent annealing was used to form Cu2ZnSn(SxSe1-x)4 (CZTSSe) films. It was found that NC (Cu, Ag)-Zn-Sn-S obtained by colloidal synthesis is a combination of primary (ACZTS) and secondary Ag-Zn-S phases. The presence of the latter explains the non-monotonic dependence of the bandgap of the ACZTS NC on the Ag / Cu ratio. The correlation between the change of elemental composition, morphology, and Eg of Cu2ZnSn(SxSe1-x)4 films with variation x = S / (S + Se) is established.

Індекс УДК: 539.216;539.22;538.91-405;548;620.18, 535.343.2, 535.33/.34

Коди тематичних рубрик НТІ: 29.19.04, 29.31.21, 29.31.26

6. Науково-технічна продукція (НТП)

НТП 1

Назва продукції (укр): Заключний звіт

Назва продукції (англ): Final report

Очікувані результати: Методи, теорії

Галузь застосування: Виробництво фотовольтаїчних)сонячних) елементів.

Опис продукції (укр): В процесі виконання проєкту розроблено методику синтезу колоїдних НЧ (AgxCu1-x)2ZnSnS4 та плівок Cu2ZnSn(SxSe1-x)4. Розроблені напівпровідникові структури призначені для використання в тонкоплівкових сонячних елементах та проведена їх характеризація, зокрема встановлені їх оптичні, структурні та морфологічні параметри.

Соціально-економічна спрямованість НТП: Економія енергоресурсів

Стадія завершеності НТП: Звіт по НДДКР

Впровадження НТП: Не впроваджено

Строки впровадження:

Виробник продукції: ІФН ім. В.Є. Лашкарьова НАН України

Споживачі продукції:

Перспективні ринки:

Права інтелектуальної власності: Отримано патент

Форми та умови передачі продукції: Спільні НДДКР

7. Бібліографічний опис

В роботі повідомляється про синтез (Cu,Ag)-Zn-Sn-S (CAZTS) і Ag-Zn-Sn-S (AZTS) нанокристалів (НК) у водному розчині та їх детальну характеризацію за допомогою раманівської спектроскопії. Завдяки систематичній зміні номінального складу та кількісного визначення складових елементів у CAZTS і AZTS НК за допомогою рентгенівської фотоемісійної спектроскопії ідентифіковано коливальні раманівські та ІЧ-спектри як прояв основної фази AZTS та вторинної фази Ag-Zn-S і Ag-Sn-S сполук.

1. V. Dzhagan, O. Selyshchev, Y. Havriliuk, N. Mazur, O. Raievska, O. Stroyuk, S. Kondratenko, A. Litvinchuk, M. Valakh, D.R.T. Zahn. Raman and X-ray Photoelectron Spectroscopic Study of Aqueous Thiol-Capped Ag-Zn-Sn-S Nanocrystals. Materials 14, 3593, 2021.

В роботі повідомляється про синтез нанокристалів CZTTe (НК) шляхом оригінального недорогого низькотемпературного колоїдного синтезу у воді з використанням низькомолекулярного стабілізатора - тіогліколевої кислоти. Край поглинання синтезованих НК на рівні 0,8–0,9 еВ, що добре узгоджується з очікуваним значенням для Cu2ZnSnTe4. Останнє свідчить про те, що CZTTe є доступною альтернативою для ІЧ-фотодетекторів та сонячних елементів. Проведено структурну характеризацію синтезованих НК методом раманів

2. V. Dzhagan, O. Kapush, N. Mazur, Y. Havryliuk, M.I. Danylenko, S. Budzulyak, V. Yukhymchuk, M. Valakh, A. Litvinchuk, and D.R.T. Zahn, Colloidal Cu-Zn-Sn-Te Nanocrystals: Aqueous Synthesis and Raman Spectroscopy Study, Nanomaterials 11, 2923 (2021).

В роботі представлено експериментальний та теоретичний аналіз об'ємних кристалів і тонких плівок CZTSSe. Як основний метод дослідження використано спектроскопію раманівського розсіювання, а як допоміжні оптичне поглинання та мікроскопічні дослідження. Вперше виявлено, що поверхня об'ємного кристала CZTSSe з x = 0,35 має пірамідоподібні структури. Запропонований теоретичний підхід дозволяє оцінити значення концентрації атомів (S або Se) для твердого розчину CZTSSe безпосередньо з експериментальни

3. I.S. Babichuk, Yu.A. Romaniuk, S. Golovynskyi, V.G. Hurtavy, A.V. Mudryi, V.D. Zhivulko, I.V. Babichuk, C. Xu, C. Lin, M. Cao, O.M. Hreshchuk, V.O. Yukhymchuk, M.Ya. Valakh, B. Li, J. Yang. Spectroscopy and Theoretical Modeling of Phonon Vibration Modes and Band Gap Energy of Cu2ZnSn(SxSe1−x)4 Bulk Crystals and Thin Films. ACS Omega 2021, 6, 43, 29137−29148.

8. Звітна документація

Кількість сторінок в звіті: 68

Мова звіту: Українська

Кількість файлів у звіті: 1

9. Заключні відомості

Керівник організації:

Бєляєв Олександр Євгенович (д. ф.-м. н., професор, академік НАНУ)

Керівники роботи:

Юхимчук Володимир Олександрович (д. ф.-м. н., професор)

Керівник відділу реєстрації наукової діяльності
УкрІНТЕІ Юрченко Т.А.