

Облікова картка ДіР



I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0222U001063

Державний реєстраційний номер: 0120U101362

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 23-01-2022

II. Етап виконання ДіР

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 звітнього документа: Остаточний звіт

III. Відомості про виконавця ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Інститут фізики напівпровідників імені В. Є. Лашкарьова Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 05416952

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

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380445254020

IV. Відомості про співвиконавців ДіР

V. Відомості про замовника ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Національна академія наук України

Код за ЄДРПОУ: 00019270

Місцезнаходження: вул. Володимирська, буд. 54, м. Київ, Київська обл., 01030, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Кабінет міністрів

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380442350981, 380442262341, (044) 239-66-72, 2343243, www.nas.gov.ua

VI. Джерела, напрями та обсяги фінансування ДіР

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

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

Джерела фінансування

7713 - кошти держбюджету

Код програмної класифікації видатків і кредитування (КПКВК): 6541230

Фактичний обсяг фінансування (тис. грн.): 237.000
--

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

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

Назва роботи англійською:

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

Реферат українською:

Для покращення структурних та оптичних властивостей тонких плівок на основі четверних халькогенідів типу $\text{Cu}_2\text{ZnSnS}_4$, 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 $(\text{Ag}_x\text{Cu}_{1-x})_2\text{ZnSnS}_4$ (ACZTS), з наступним формуванням тонких (1 мкм) плівок. Для формування $\text{Cu}_2\text{ZnSn}(\text{S}_x\text{Se}_{1-x})_4$ (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 E_g плівок $\text{Cu}_2\text{ZnSn}(\text{S}_x\text{Se}_{1-x})_4$ при варіюванні $x = \text{S}/(\text{S} + \text{Se})$.

Реферат англійською:

Cationic (Cu to Ag) and anionic (S to Se) substitutions were performed to improve the structural and optical properties of $\text{Cu}_2\text{ZnSnS}_4$ quaternary chalcogenides, which are intended for use as active layers of photovoltaic cells. Nanocrystals of $(\text{Ag}_x\text{Cu}_{1-x})_2\text{ZnSnS}_4$ (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 $\text{Cu}_2\text{ZnSn}(\text{S}_x\text{Se}_{1-x})_4$ (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 E_g of $\text{Cu}_2\text{ZnSn}(\text{S}_x\text{Se}_{1-x})_4$ films with variation $x = \text{S} / (\text{S} + \text{Se})$ is established.

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

Коди тематичних рубрик: 29.19.04, 29.31.21, 29.31.26

Керівники роботи

Власне Прізвище Ім'я По-батькові: Юхимчук Володимир Олександрович

Науковий ступінь: д. ф.-м. н.

Вчене звання: професор

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

VIII. Наукова (науково-технічна) продукція (НТП)

Назва НТП українською: Заключний звіт

Назва НТП англійською: Final report

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати: Методи, теорії

Галузь застосування: Виробництво фотовольтаїчних (сонячних) елементів.

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: В процесі виконання проекту розроблено методику синтезу колоїдних НЧ $(Ag_xCu_{1-x})_2ZnSnS_4$ та плівок $Cu_2ZnSn(S_xSe_{1-x})_4$. Розроблені напівпровідникові структури призначені для використання в тонкоплівкових сонячних елементах та проведена їх характеристика, зокрема встановлені їх оптичні, структурні та морфологічні параметри.

Соціально-економічна спрямованість НТП: Економія енергоресурсів

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Не впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу:

Закінчення етапу:

Споживачі продукції:

Перспективні ринки:

Характер співробітництва з інвестором

Потрібний обсяг інвестицій, тис. грн.:

Права, що надаються інвестору після завершення роботи:

Наявність бізнес-плану:

Техніко-економічне обґрунтування:

Потенціальний обсяг продажу, тис. грн.:

Очікуваний термін окупності (років):

Додаткова інформація:

IX. 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 характеристику 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 eV, що добре узгоджується з очікуваними значеннями для $\text{Cu}_2\text{ZnSnTe}_4$. Останнє свідчить про те, що CZTTe є доступною альтернативою для ІЧ-фотодетекторів та сонячних елементів. Проведено структурну характеристику 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 експериментальних

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 $\text{Cu}_2\text{ZnSn}(\text{SxSe}_{1-x})_4$ Bulk Crystals and Thin Films. ACS Omega 2021, 6, 43, 29137–29148.

Х. Заключні відомості

Керівник юридичної особи

Беляєв Олександр Євгенович
д. ф.-м. н., 01.04.10

Перелік осіб-виконавців

**Відповідальний за підготовку
облікових документів**

Юхимчук Володимир Олександрович

Телефон

+38 (093) 641-91-26

Реєстратор

**Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є
відповідальним за реєстрацію наукової
діяльності**

