

Rezumat

„Creșterea cristalelor soluțiilor solide $Cu_2Zn_{1-x}Cd_xSnS_4$ și cercetarea proprietăților fizico-chimice și fizice ale acestora pentru proiectarea fotoconvertorilor solari”

19.80013.16.01F/BL

Conducătorul de proiect: acad. Ernest ARUȘANOV

1. Scopul general al proiectului conform formularului de aplicare

Scopul proiectului dat constă în determinarea caracterului interacțiunii chimice în sistemul soluțiilor solide Cu_2ZnSnS_4 - Cu_2CdSnS_4 prin diverse metode de analiză fizico-chimică, stabilirea regiunilor de solubilitate, determinarea regimurilor optime de temperatură pentru sinteza și creșterea cristalelor compușilor cuaternari Cu_2ZnSnS_4 , Cu_2CdSnS_4 și a soluțiilor solide de $Cu_2Zn_{1-x}Cd_xSnS_4$, precum și stabilirea principalelor legități în schimbarea proprietăților fizico-chimice, optice și electrice ale acestor materiale.

2. Obiectivele proiectului conform formularului de aplicare

1. Trasarea diagramei de stare a sistemului Cu_2ZnSnS_4 - Cu_2CdSnS_4 și determinarea regimurilor optime de sinteză și creștere ale cristalelor prin cristalizare orientată a topiturii (metoda Bridgman) și din fază gazoasă (metoda transportului chimic de vapori);
2. Determinarea compoziției și a structurii cristalelor de Cu_2ZnSnS_4 , Cu_2CdSnS_4 și ale soluțiilor solide $Cu_2Zn_{1-x}Cd_xSnS_4$ prin metoda analizei micro-Röntgeno-spectrală și Röntgen;
3. Stabilirea legităților de schimbare a parametrilor celulei elementare, a densității, a microdunității, a lățimii benzii interzise în dependența de parametrul x al soluțiilor solide;
4. Cercetarea spectrelor de fotoluminescență, a spectrelor de împrăștieire Raman și a proprietăților electrice în cristalele obținute.

3. Concluzii

RO

În urma realizării proiectului a fost optimizat procesul tehnologic de sinteză al monocristalelor soluțiilor solide din seria $\text{Cu}_2\text{Zn}_x\text{Cd}_{1-x}\text{SnS}_4$ cu omogenitate sporită. Diagrama de stare a sistemului $\text{Cu}_2\text{ZnSnS}_4\text{-Cu}_2\text{CdSnS}_4$ (CZTS-CCTS) a fost construită utilizând datele diferențialului termic, a metodelor de analiză a microstructurii și a fazelor cu ajutorul razelor X. A fost determinată compoziția, structura, au fost calculați parametrii celulei elementare a monocristalelor CZTS-CCTS precum și au fost determinate dependențele compoziționale ale densității X-ray și ale microdurității. A fost realizat studiul reflexiei în IR polarizațional-dependentă pe monocristale orientate, în intervalul $100\text{--}500\text{ cm}^{-1}$, în scopul cercetării modelor fononice caracteristice semiconductorilor CCTS de tip stannit. De asemenea, au fost obținute și analizate dependențele rezistivității și ale magnetorezistenței monocristalelor soluțiilor solide $\text{Cu}_2(\text{Zn,Cd})\text{SnS}_4$ într-un interval larg de temperaturi și de câmp magnetic. Analiza detaliată a acestora a permis determinarea principalelor mecanisme de transport și a unui set important de parametri electronici. A fost estimată concentrația diferitor defecte structurale, inclusiv a vacanțelor și a defectelor de delocațiune. Toate rezultatele obținute în cadrul proiectului sunt absolut noi, fiind publicate în jurnale internaționale cu factor de impact și prezentate în cadrul unui workshop. Acestea vor putea fi utilizate de către toți actorii științifici interesați în studiul detaliat și utilizarea acestor tipuri de materiale în aplicații de nouă generație.

EN

During the realization of the project, the technological process of synthesis of $\text{Cu}_2\text{Zn}_x\text{Cd}_{1-x}\text{SnS}_4$ single crystals with increased homogeneity was optimized. The phase diagram of the $\text{Cu}_2\text{ZnSnS}_4\text{-Cu}_2\text{CdSnS}_4$ (CZTS-CCTS) system was constructed using data on differential thermal, X-ray phase and microstructure analysis methods. The structure and unit cell parameters as well as compositional dependences of lattice parameters, pycnometric, X-ray densities and microhardness of CZTS-CCTS samples were determined. A polarization-dependent infrared reflectivity study on oriented single crystals in the range of $100\text{--}500\text{ cm}^{-1}$ was performed to investigate the optical phonon modes in the stannite $\text{Cu}_2\text{CdSnS}_4$ semiconductor. The resistivity and magnetoresistance of $\text{Cu}_2(\text{Zn,Cd})\text{SnS}_4$ solid solutions in pulsed magnetic fields within a broad temperature range were measured and analyzed. The joint analysis of these data allowed us to determine the main transport mechanisms and a set of important electronic parameters, as well as their behavior depending on the Zn concentration have been analyzed. The concentration of various lattice defects, including vacancies and antisites was estimated. All the results obtained within the project are absolutely new, being published in international journals with impact factor and presented at a workshop. These data can be used by all scientific actors interested in the detailed study and use of these types of materials in the next generation applications.