

Rezumatul activității și a rezultatelor obținute în proiect perioada 2020-2023 (obligatoriu)***Materiale nanostructurate avansate pentru aplicații termoelectrice și senzori***
(denumirea proiectului)**Cifra proiectului:** 20.80009.5007.02

În cadrul proiectului 20.80009.5007.02 „*Materiale nanostructurate avansate pentru aplicații termoelectrice și senzori*”, au fost cercetate proprietățile electronice, fononice, termoelectrice, electrofizice și fotoelectrice ale materialelor nanostructurate în baza (1) oxizilor In_2O_3 dopați cu Sn, Ga, Zn, Pb și Tl, (2) peliculelor subțiri In-Ga-Sn-O, ZnO- In_2O_3 , SnS, SnS₂, SnSe, SnSe₂, Bi-Sn, $\text{Zn}_{1-x}\text{Mg}_x\text{O}$ și $\text{In}_{2x}\text{Ga}_{2(1-x)}\text{O}_3$ și (3) nanofirelor și nanotuburilor de siliciu.

A fost demonstrat teoretic, că (1) formarea defectelor monoatomare Zn_b și biatomare $\text{Sn}_b\text{-Ga}_i$ sau $\text{Pb}_b\text{-Tl}_i$ în rețeaua cristalină a In_2O_3 provoacă atât modificarea substanțială a spectrelor electronice și fononice, cât și micșorarea eficiență a conductibilității termice fononice (indicii b (nodul b) și i (internod) denotă poziția atomului-defect); (2) nanofirele cristalin-amorfe Si/SiO₂ și c-Si/a-Si, cât și nanotuburile de siliciu cu secțiunea transversală variabilă cu dimensiuni spațiale nanometrice reprezintă încă o clasă de nanomateriale de perspectivă pentru aplicațiile termoelectrice și termoizolante, deoarece ele posed valori ultra-joase ale conductibilității termice fononice: $\sim 0.2 \text{ W/mK} - 0.3 \text{ W/mK}$ la temperatura camerei.

De asemenea a fost stabilit că conductibilitatea termică a peliculelor In-Sn-O cu 30 % at. de Ga dopant este de 4 ori mai mică decât a peliculelor cu 5% at. de Ga dopant la temperatura $T = 300 \text{ K}$. Micșorarea conductibilității termice se explică prin micșorarea vitezei de grup medii a modelor de oscilație, cât și prin modificarea caracterului transportului de căldură de la cel fononic la cel de difuzie, legată de amorfizarea treptată a peliculelor la creșterea concentrației de Ga.

Au fost confecționați fotoreceptori de radiație ultravioletă în baza filmelor oxidice $\text{Zn}_x\text{Mg}_{1-x}\text{O}$ și a fost stabilit mecanismul de sensibilitate și timpul de reacție a acestor fotoreceptori. Au fost elaborate procedee tehnologice de formare a tranzistorilor cu efect de câmp în baza structurilor de SnS și au fost studiate caracteristicile de frecvență ale lor.

A fost demonstrat că straturile monocristaline și microfibrele policristaline în înveliș de sticlă în bază de SnSe dopat cu Ag posedă un factor de putere termoelectrică destul de înalt: de $15 - 18 \mu\text{W cm}^{-1} \text{ K}^{-2}$ la temperatura camerei.

Au fost confecționate mostre de laborator ale senzorului anizotrop planar de flux termic în baza filmelor de Bi, depuse pe suport de mică și recristalizate pentru obținerea peliculelor monocristaline cu orientarea predeterminată a axei cristalografice C_3 .

Rezultatele obținute posedă o valoare științifică fundamentală, cât și valoare aplicativă înaltă: ele vor contribui la o înțelegere mai profundă a proceselor electronice și fononice, care se petrec în materialele nanostructurate cercetate, iar implementarea lor în practică poate duce la o îmbunătățire substanțială a caracteristicilor de lucru ale convertorilor termoelectrice, senzorilor și a dispozitivelor în bază de semiconductori.

Pe baza rezultatelor științifice obținute în cadrul proiectului au fost publicate **119** lucrări științifice, inclusiv **1** monografie internațională, **25** capitole în monografiile internaționale, **26** articole în reviste cu factor de impact ISI, **9** articole în culegeri științifice internaționale, **12** articole în presa națională și **46** teze la lucrările conferințelor științifice internaționale și naționale. Au fost obținute **8** brevete de invenție.

Summary of research activity and results in 2023

Advanced nanostructured materials for thermoelectric and sensor applications (denumirea proiectului)

Cifrul proiectului: 20.80009.5007.02

The electron, phonon, thermoelectric, electrophysical and photoelectric properties of nanostructured materials based (1) on In_2O_3 oxides doped by Sn, Ga, Zn, Pb and Tl, (2) on In-Ga-Sn-O, ZnO- In_2O_3 , SnS, SnS₂, SnSe, SnSe₂, Bi-Sn, $\text{Zn}_{1-x}\text{Mg}_x\text{O}$ and $\text{In}_{2x}\text{Ga}_{2(1-x)}\text{O}_3$ thin films and (3) on silicon nanowires and nanotubes were investigated in the project 20.80009.5007.02 “Advanced nanostructured materials for thermoelectric and sensor applications”.

It has been theoretically demonstrated that (1) the formation of monoatomic Zn_b and biatomic $\text{Sn}_b\text{-Ga}_i$ or $\text{Pb}_b\text{-Tl}_i$ defects in the crystal lattice of In_2O_3 leads to both substantial modification of its electronic and phonon energy spectra and effective decrease of the phonon thermal conductivity (indices b (b -node) and i (internode) denote the position of the defect atom); (2) Si/SiO₂ and c-Si/a-Si crystalline-amorphous nanowires as well as cross-section modulated silicon nanotubes with nanometer spatial dimensions are prospective candidates for thermoelectric and thermo-insulating applications since they possess ultra-low values of phonon thermal conductivity: ~ 0.2 W/mK - 0.3 W/mK at room temperature.

It has been also established that the thermal conductivity of In-Sn-O films with 30 % at. of Ga is ~ 4 times lower than that of films with 5 % at. of Ga at $T = 300$ K. The thermal conductivity decrease is explained by the decrease of the average group velocity of phonon modes as well as by the change in the character of the heat transport from phonon to diffusion, which is related to the gradual amorphization of the films with increasing Ga content.

Ultraviolet radiation photoreceptors based on $\text{Zn}_x\text{Mg}_{1-x}\text{O}$ oxide films were developed and the sensitivity mechanism and reaction time of these photoreceptors were determined. Technological protocols of SnS-based field-effect transistors (FETs) fabrication was described and frequency characteristics of SnS-based FETs were studied.

It has been revealed, that Ag-doped SnSe single crystal films and polycrystalline microwires in glass coatings demonstrate a rather high thermoelectric power factor: $15 - 18 \mu\text{W cm}^{-1} \text{K}^{-2}$ at room temperature.

Laboratory samples of the planar anisotropic heat flux sensor were fabricated based on Bi films, deposited on mica support and recrystallized to obtain monocrystalline films with predetermined orientation of the C_3 crystallographic axis.

The obtained results possess both fundamental and applicative significance: they will contribute to a deeper understanding of the electron and phonon processes in the investigated nanostructured materials, while their practical implementation may lead to a substantial improvement of the operation characteristics of thermoelectric converters, sensors and semiconductor-based devices.

The results of the project were published in **119** scientific works, including **1** monograph, **25** book chapters, **26** research articles in peer-reviewed international journals with ISI impact factor, **9** research articles in international proceedings, **12** research articles in national journals and **46** abstracts in conference proceedings/abstract books; **8** patents were obtained.