

Rezumatul activității și a rezultatelor obținute în proiect în perioada 2020-2023

”Dispozitive fotovoltaice cu elemente active din noi materiale calcogenice obținute prin tehnologii economic accesibile”

Cifra proiectului **20.80009.5007.03**

Pe întreaga durată a proiectului au fost realizate lucrări de optimizare a procedurilor tehnologice de obținere a compușilor de tip kesterit și a altor materiale componente care se folosesc în structuri fotovoltaice, precum și a straturilor subțiri de azopolimeri pentru elemente optice de difracție cu proprietăți noi sau îmbunătățite. Lucrările au fost combinate cu procese de studiu avansat ale proprietăților fizico-chimice ale acestor materiale, în scopul identificării metodelor de control al caracteristicilor acestora la etapa de obținere, depunere sau/și prelucrare.

Pentru structurile fotovoltaice pe bază de straturi absorbante de tip kesterit, este foarte important procesul de depunere și tratare ulterioară a straturilor subțiri respective. S-a obținut că procesul de sulfurare și tratare termică a straturilor subțiri de kesterit la temperaturile potrivite duce la majorarea considerabilă a calității acestora prin creșterea dimensiunii cristalitelor, reducerea densității defectelor și a dezordinii structurale. Celulele solare pe bază de kesterit fabricate din straturi subțiri de CZTS, sulfurate la 420°C, au prezentat eficiență de până la 3,48%. Studiul avansat al proprietăților structurale, vibraționale, optice, de transport și magnetotransport ale mai multor serii de probe de $(\text{Ag,Cu})_2\text{Zn}(\text{Cd})\text{Sn}(\text{S,Se})_4$ cu diferită stare microscopică, obținute și tratate prin diferite metode – reprezintă o contribuție considerabilă la fondul de cunoștințe fundamentale ale acestor materiale. Datele noi obținute au permis determinarea dependenței acestor proprietăți de procesele tehnologice și compoziția materialelor. La ultima fază a proiectului s-au realizat lucrări de obținere a straturilor de calitate sporită de FTO (stratul transparent de contact) și c-Si, pentru integrarea cu straturile de kesterit obținute la etapele precedente. Pentru conectarea monolitică a componentelor au fost încercate mai multe configurații și optimizări. Chiar dacă în cadrul studiului nu s-a reușit obținerea unei structuri reale Si/kesterit, rezultatele privind îmbunătățirea timpului de viață al purtătorilor de sarcină a stratului de Si după depunerea stratului absorbant de tip kesterit de-asupra sunt promițătoare.

În paralel, au fost conduse lucrări de îmbunătățire a tehnologiei computerizate de depunere în vid a nanostructurilor multistrat realizate din sticle calcogenice, cu posibilitatea de control a condițiilor de depunere a materialului. A fost elaborată metoda nouă “rod-coating” pentru obținerea straturilor subțiri de azopolimeri cu grosimea mai mică de 1 μm. Au fost studiate parametrii optici ai structurilor și ai straturilor obținute. Au fost obținute straturi subțiri de azopolimer nou fotosensibil. Simularea pe calculator a caracteristicilor elementelor optice de difracție elaborate a arătat că distribuția intensității pe ordinele de difracție este determinată de valorile contrastului rețelelor în formă de furcă individuală. Această abordare face posibilă generarea unei game largi de fascicule optice vortex cu diferite sarcini topologice și intensitate controlabilă. A fost demonstrată posibilitatea fabricării rețelelor în formă de furcă (RFF) complexe pe nanomultistraturi de As_2S_3 -Se fabricate prin metodă holografică analogică polarizată. Aceste RFF permit generarea uni- și bidimensională a fasciculelor optice vortex cu sarcină topologică necesară. Rețelele de difracție înregistrate prin metoda holografică digitală polarizată fac posibilă formarea de fascicule cu fază vortex. Eficiența de difracție a acestor rețele nu depășește 3,5%, dar crește odată cu creșterea înălțimii profilului de relief.

Toate aceste materiale obținute și studiate pe durata desfășurării proiectului se caracterizează prin potențial înalt de utilizare în calitate de componente ale diferitor dispozitive fotovoltaice și fotonice. Calitatea înaltă a rezultatelor obținute pe parcursul anilor 2020 – 2023 este demonstrată prin publicarea acestora în reviste științifice recenzate cu factor de impact înalt și prin prezentarea lor în cadrul mai multor conferințe internaționale.

Abstract

Over the entire duration of the project, work was carried out to optimize the technological procedures for obtaining kesterite-type compounds and other component materials used in solar cells, as well as thin layers of azopolymers for optical diffraction elements with new or improved properties. This work was combined with the advanced study of the physico-chemical properties of these materials, in order to identify the methods of controlling their characteristics at the obtaining, depositing and/or processing phases.

For photovoltaic structures based on kesterite-type absorbing layers, the process of deposition and subsequent treatment of the respective thin layers is very important. It was found that the sulfurization and annealing processes of kesterite thin films at the right temperatures leads to a considerable increase in their quality by increasing the size of crystallites, reducing the density of defects and structural disorder. Kesterite-based solar cells fabricated from CZTS thin films, sulfurized at 420°C, showed efficiencies up to 3.48%. The advanced study of the structural, vibrational, optical, transport and magnetotransport properties of several series of $(\text{Ag,Cu})_2\text{Zn}(\text{Cd})\text{Sn}(\text{S,Se})_4$ samples with different macroscopic state, obtained and treated by different methods - represents a considerable contribution to the fundamental knowledge of these materials. The new data obtained made it possible to determine the dependence of these properties on the technological processes and the composition of the materials. At the last phase of the project, works were carried out to obtain FTO (transparent contact layer) and c-Si layers with increased quality, for integration with the kesterite layers obtained at the previous stages. Several configurations and optimizations have been tried for the monolithic connection of the components. Even though the study did not succeed in obtaining a real Si/kesterite structure, the results regarding the improvement of the charge carrier lifetime of the Si layer after the deposition of the kesterite absorber layer on top are promising.

In parallel, work was conducted to improve the computer technology of vacuum deposition of multilayer nanostructures made of chalcogenous glasses, with the possibility of controlling the material deposition conditions. A new "rod-coating" method was developed for obtaining thin layers of azopolymers less than 1 μm thick. The optical parameters of the obtained structures and layers were studied. Thin films of a novel photosensitive azopolymer were obtained. Computer simulation of the characteristics of the developed optical diffraction elements (ODE) showed that the intensity distribution over the diffraction orders is determined by the contrast values of the individual fork gratings. This approach makes possible to generate a wide range of vortex optical beams with different topological charges and controllable intensity. The possibility of fabricating complex fork-shaped arrays (RFFs) on As_2S_3 -Se nanomultilayers fabricated by polarized analog holographic method was demonstrated. These RFFs enable one- and two-dimensional generation of vortex optical beams with required topological charge. Diffraction gratings recorded by the polarized digital holographic method make it possible to form vortex phase beams. The diffraction efficiency of these gratings does not exceed 3.5%, but increases with the height of the relief profile. All these materials obtained and studied during the project are characterized by high potential for use as components of various photovoltaic and photonic devices. The high quality of the results obtained during the years 2020 – 2023 is demonstrated by their publication in peer-reviewed scientific journals with a high impact factor and by their presentation at several international conferences.