

Bulk and interfacial defects in structures based on ZnO and ZnO semiconducting alloys

Materiały o znacząco polepszonych właściwościach są kluczowe dla konstrukcji nowatorskich układów elektronicznych o wysokiej wydajności. Wśród obecnie badanych nowych materiałów półprzewodnikowych ZnO oraz jego stopy ZnMgO i ZnSnO są bardzo obiecujące dla zastosowań fotowoltaicznych. Ostatnio zaproponowano nowe struktury fotowoltaiczne bazujące na tych materiałach bardzo atrakcyjne pod względem wydajności oraz kosztów otrzymania. W urządzeniach tych warstwa ZnO pełni rolę nie tylko przezroczystej przedniej elektrody, jak to jest w przypadku dostępnych już w sprzedaży ogniw słonecznych, ale jest także partnerem n-typu dla absorbera typu p. Tego rodzaju rozwiązanie znacznie upraszcza proces wytwarzania ogniw, utrzymując jednocześnie teoretycznie przewidzianą wysoką wydajność powyżej 20%, np. przy połączeniu p-Si oraz Cu₂O. Rozwiązanie takie ma szansę zrewolucjonizować obecny rynek ogniw słonecznych.

Z powodu szerokiej przerwy ZnO (~3.4 eV) inny materiał półprzewodnikowy powinien być używany jako absorber p-typu w strukturach fotowoltaicznych. Oznacza to, że końcowe urządzenie zostanie skonstruowane na bazie dwóch różnych materiałów (heterozłącza), w którym aktywne elektrycznie defekty międzypowierzchniowe w znacznym stopniu przyczyniają się do zmniejszenia teoretycznie określonej maksymalnej wydajności. Ważną rolę odgrywa także obecność i wpływ defektów objętościowych. Jednakże do tej pory w literaturze naukowej istnieje bardzo niewiele informacji dotyczących objętościowych i międzypowierzchniowych defektów w strukturach bazujących na ZnO, a ich natura fizyczna jest przedmiotem debaty naukowej. Ponadto, większość istniejących badań dotyczy kryształów objętościowych hodowanych metodą hydrotermalną, podczas gdy do zastosowań konieczne są warstwy polikrystaliczne o elektrycznie dobranych właściwościach, osadzone na określonych podłożach. Dlatego obecny stan wiedzy nie jest wystarczający, aby przypisać elektrycznie aktywne defekty występujące w warstwach ZnO do domieszek chemicznych, luk sieci, przemieszczonych atomów czy też defektów o większym wymiarze wprowadzonych podczas procesu wzrostu. Tego rodzaju podstawowa wiedza konieczna jest do wykorzystania potencjału wymienionych powyżej materiałów, ponieważ toruje ona drogę do zredukowania lub pasywacji wpływu szkodliwych elektrycznie defektów. Co więcej, jak pokazano w obliczeniach teoretycznych dla struktur p-Si/n-ZnO, dopasowanie pasm przyczyniające się do zmniejszenia znaczenia rekombinacji międzypowierzchniowej poprzez zwiększenie różnicy energii pomiędzy swobodnymi nośnikami a defektami jest rozwiązaniem alternatywnym w stosunku do inżynierii defektów. W przypadku ZnO efekt taki może być osiągnięty poprzez wprowadzanie Mg/Sn, chociaż warunki wzrostu i sposób przygotowania powierzchni podłoża także odgrywają rolę.

Niniejszy projekt ma na celu głębsze zrozumienie fizycznej i chemicznej natury aktywnych elektrycznie defektów obecnych w strukturach bazujących na ZnO, ZnMgO oraz ZnSnO oraz zbadanie zależności nieciągłości pasm od zawartości Mg/Sn, warunków wzrostu oraz przygotowania powierzchni. Dla osiągnięcia tego celu, warstwy ZnO badane będą za pomocą zaawansowanych i unikatowych elektrycznych technik pomiarowych. Wyniki tych badań będą porównane z wynikami analizy chemicznej domieszek oraz z wynikami analizy strukturalnej w celu określenia natury defektów. Ponadto, za pomocą podstawowej charakteryzacji optoelektronicznej badany będzie wpływ niedopasowania pasm i defektów na makroskopowe działanie wybranych struktur. Pomiarów te będą prowadzone równoległe z symulacjami numerycznymi tak, aby oszacować wagę poszczególnych czynników tzn. defektów objętościowych i międzypowierzchniowych oraz niedopasowania pasm na makroskopowe właściwości struktur.

Wynikiem projektu będzie weryfikacja możliwości otrzymania wysokiej jakości warstw n-ZnO, n-ZnMgO oraz n-ZnSnO dla wydobycia potencjału tych materiałów w zastosowaniach fotowoltaicznych. Poza tym stworzone zostanie światowej klasy laboratorium umożliwiające prowadzenie unikatowych pomiarów elektrycznych nowych materiałów za pomocą zaawansowanych metod pomiarowych. Powstanie także zespół badawczy będący w stanie prowadzić zarówno skomplikowane badania elektryczne jak też symulacje numeryczne heterostruktur, który będzie w stanie konkurować z zespołami międzynarodowym światowej klasy.