

Celem prezentowanego projektu jest systematyczne badania teoretyczne z wykorzystaniem teorii funkcjonału gęstości (DFT) właściwości strukturalnych, elektronowych, optycznych, sprężystych i innych, a także zbadanie zależności struktura-własności dla I-III-VI<sub>2</sub> (I = Cu, Ag, III = In, Ga, Al, VI = S, Se, Te itp.) trójskładnikowych półprzewodników chalkopirytowych (CP) dla zastosowań w ogniwach słonecznych. Trójskładnikowy CP I-III-VI<sub>2</sub> to grupa kryształów posiadających właściwości, które czynią je interesującymi dla badań podstawowych i stosowanych. Materiały te pozwalają na efektywną modyfikację kompozycji przez częściowe podstawienia kationów i anionów. Takie podstawienie umożliwia zmianę składu chemicznego materiałów prowadzących do zmiany struktury krystalicznej i właściwości. Tytułowy materiał może być użyty jako elementy aktywne dla nieliniowych układów optycznych, takich jak filtry optyczne, aplikacje LED, wysoko wydajne kropki kwantowe do fotokatalizy (na przykład kryształ CuGaS<sub>2</sub>), czujniki i najbardziej perspektywiczne zastosowania ogniw słonecznych. Możliwość tworzenia cienkich warstw o wysokiej jakości sprawia, że materiały CP są bardzo atrakcyjne dla wytwarzania czujników cienkowarstwowych i ogniw słonecznych. Potencjalne praktyczne zastosowanie kryształów CP wymaga dokładnego zbadania właściwości związków. W ramach tego projektu przeprowadzimy teoretyczne badania struktury krystalicznej i różnych właściwości fizycznych kryształów CP w ramach formalizmu DFT.

Zbadamy elektronową strukturę pasmową i właściwości optyczne i fizyczne (np. elastyczne) czystych kryształów. Zostanie opracowana technika obliczeń z wykorzystaniem różnych typów funkcjonału wymiany i korelacji wraz z podejściem Hubbarda (DFT + U) oraz korektą dyspersji DFT (DFT-D) w celu uzyskania wyników dla CP bliskich do danych eksperymentalnych. Ponieważ kryształy CP stosunkowo łatwo tworzą stałe roztwory, z fundamentalnego punktu widzenia interesujące jest zbadanie wpływu zamiany anionów i kationów na strukturę elektronową tych materiałów. W proponowanym projekcie zbadane zostaną zależności parametrów strukturalnych i właściwości fizycznych od składu chemicznego roztworu stałego za pomocą symulacji z pierwszych zasad. Symulacja roztworu stałego będzie oparta na metodach wirtualnej aproksymacji kryształów (VCA) i supercell (SC). Znalezienie właściwości związków od składu chemicznego pozwoli nam określić właściwy skład chemiczny w celu uzyskania materiału o pożądanymi własnościami.

Domieszkowanie jonami metali alkalicznych i ziem rzadkich prowadzi do pojawienia się dodatkowych poziomów energetycznych w pasmie wzbronionym. Ogniwa słoneczne zostały stworzone na podstawie domieszkowania czystego półprzewodnika przez jony różnych typów. Pośrednie ogniwa słoneczne (IBSC) mogą być tworzone na bazie domieszkowanych półprzewodników CP. Korzystając z obliczeń z pierwszych zasad, zostaną przeprowadzone badania polegające na określeniu położenia poziomów energetycznych domieszek w przewie energetycznej dla różnych kryształów CP. Ponadto zostanie wpływ domieszkowania dla różnych atomów, a także wpływ ich koncentracji na zwiększenie absorpcji światła. Zakładamy, że wkonanie projektu wskaże na jak można zwiększyć efektywność tych materiałów w zastosowaniach fotowoltaicznych.

Z drugiej strony komputerowe symulacja powierzchni kryształów pozwalają wyznaczyć najkorzystniejszy i stabilny kierunek rozwoju cienkich warstw z CP. Zbadane zostaną również właściwości energetyczne absorbowanych na powierzchni atomów, a także ich liczba. Przeanalizujemy także wpływ defektów na strukturę pasm energetycznych i właściwości materiałów.

Na podstawie obliczeń teoretycznych zostanie przeprowadzona analiza korelacji zasadniczych własności CP z ich strukturą. Fundamentalna analiza relacji pomiędzy parametrami kratowymi trójskładnikowych związków CP, z jednej strony, a promieniami jonowymi, elektrojemnościami i innymi parametrami jonów, z drugiej strony, pozwoli na określenie prostego modelu empirycznego i znalezienie postaci funkcji, które powiążą te wielkości. Opracowane wyniki zostaną wykorzystane do prognozowania parametrów struktury i własności dla nowych materiałów izostrukturalnych. Rezultaty projektu zapewnią systematyczny przegląd właściwości strukturalnych CP i mogą służyć jako wskazówki dla syntezy nowych związków CP. Takie badania są ważne dla zrozumienia natury i właściwości fizycznych materiałów, procesów, które w nich zachodzą, a także dla przewidywania / konstruowania nowych materiałów funkcjonalnych o predefiniowanych właściwościach. Uzyskane wyniki mogą być przydatne do opracowania efektywnych elementów fotowoltaicznych, a także poprawy wydajności istniejących urządzeń półprzewodnikowych. Proponowany projekt poszerzy informacje o własnościach CP i będzie miał pozytywny wpływ na naukę i technologię, materiałoznawstwo, fizykę, a także na proces wytwarzania nowych materiałów.