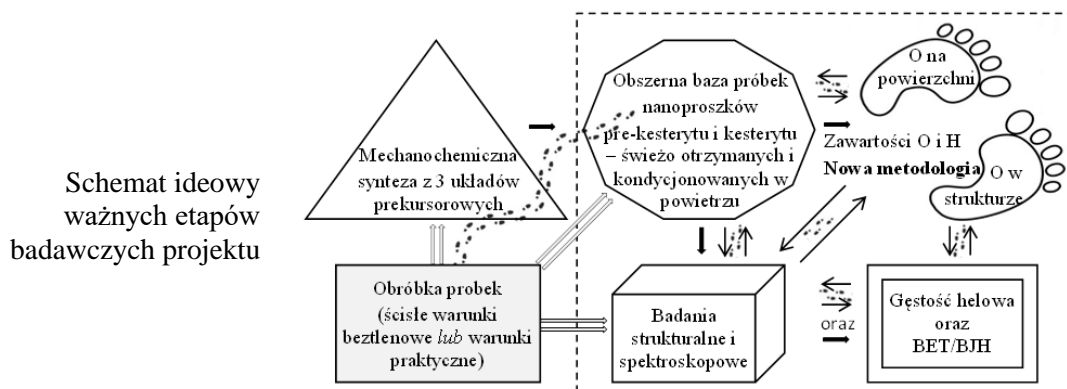


## BADANIA ŚLADU TLENOWEGO I JEGO ZNACZENIA W PÓLPRZEWODNIKOWYM KESTERYCIE $\text{Cu}_2\text{ZnSnS}_4$ DLA NOWEJ GENERACJI OGNIW FOTOWOLTAICZNYCH

*Dlaczego akurat badania śladu tlenowego w niezawierającym tlenu kesterycie?* – Złożony wielometaliczny siarczek  $\text{Cu}_2\text{ZnSnS}_4$  (kesteryt) jest materiałem półprzewodnikowym, rozważanym dla przyszłościowej generacji dostępnych i przyjaznych dla środowiska ogniw fotowoltaicznych (PV). Obecnie stosowane ogniwa oparte o wykorzystanie krzemu Si, tellurku kadmu CdTe, czy diselenku miedziowo indow galowego CIGS są względnie mało efektywne jak i kłopotliwe z punktu widzenia ich utylizacji. Właściwości półprzewodnikowe kesterytu, będącego materiałem nietlenkowym, zależą w istotny sposób od nieintencjonalnych podstawień tlenowych podczas syntezy (O za S), zaś długoterminowe stabilne działanie i funkcjonalność w urządzeniach PV zależą od jego skłonności do utleniania w atmosferze wilgotnego powietrza. To ostatnie jest istotne dla nanoproszków z rozwiniętą powierzchnią wewnętrzną i podatnością na chemisorpcję tlenu i pary wodnej. Problematyka tlenowa jest rzadko ujmowana w badaniach kesterytu.

Proponowane badania są pierwszym kompleksowym i ilościowym ujęciem problematyki obecności tlenu podczas syntezy i przechowania kesterytu na powietrzu. Szeroka gama nanoproszków kesterytu zostanie wytworzona przy użyciu dogodnej syntezy mechanochemicznej, stosowanej od lat w grupie kierownika projektu. Na etapie 1 syntezy, wysokoenergetyczne mielenie substratów powoduje ich przereagowanie do regularnego pre-kesterytu, niebędącego półprzewodnikiem, zaś na etapie 2 – jego wygrzewanie w temp. 500-600 °C skutkuje konwersją do półprzewodnikowego tetragonalnego kesterytu,  $E_g = 1.4-1.5$  eV.

*Unikalne bezpośrednie oznaczanie zawartości tlenu i wodoru* – Jeszcze do niedawna bezpośrednie oznaczanie zawartości tlenu w materiałach nieorganicznych było praktycznie niemożliwe. Zawartość tlenu oceniano jako różnicę 100 % i sumy zawartości pozostałych pierwiastków. Ostatnie postępy w rozwoju aparatury analitycznej dają taką możliwość m.in. dla kesterytu. Niniejsza propozycja stanowi pierwszą próbę wykorzystania nowoczesnego analizatora na zawartość O, N i H (Leco ONH836) do bezpośredniego oznaczania zawartości tlenu i wodoru w nanoproszkach kesterytu, z wykorzystaniem opracowanej przez nas i dedykowanej temu zadaniu metodyki pomiarowej. W celu uzyskania kompleksowej charakterystyki strukturalnej i spektroskopowej wykonano badania nanoproszków za pomocą szeregu metod analitycznych.



*Ślad tlenowy?* – Bezpośrednio oznaczone zawartości tlenu i wodoru, całkowite oraz związane z grupami powierzchniowymi i z wbudowanym strukturalnie tlenem, będą systematycznie śledzone dla produktów 3 syntez mechanochemicznych z różnych układów prekursorowych, od substratów poprzez pre-kesteryt do świeżo otrzymanego kesterytu i do produktów ich utleniania na powietrzu. Ilościowo opisane ślady tlenowe analizowane będą pod kątem głównych etapów utleniania i wpływu czasu na jego przebieg podczas kondycjonowania w atmosferze powietrza. Zróżnicowany zakres materiałowy i duża ilość uzyskanych nanoproszków oraz dwa sposoby ich obróbki (ściśle warunki beztlenowe i warunki praktyczne) stanowiąc będą szeroką bazę dla dogłębnej analizy danych analitycznych. W centrum uwagi będzie poszukiwanie korelacji zawartości różnych form tlenu w odniesieniu do właściwości strukturalnych, zanieczyszczeń, gęstości helowej/powierzchni właściwej, stabilności termicznej oraz wielu właściwości spektroskopowych, włączając w to kluczową przerwę energetyczną kesterytu.

Wyniki badań powinny wyjaśnić wiele szczegółów dot. mechanizmu tworzenia się kesterytu jak i dostarczyć ilościowego oszacowania zawartości tlenu w strukturze (O za S) i tlenu powierzchniowego.

Wyraża się nadzieję, że projekt jest jasno sprecyzowany i oryginalny oraz, że stanowić będzie przykład dla podobnych badań materiałowych w przyszłości. Jak i użyteczny okaże się w powiązanych badaniach podatności na utlenianie i celowego domieszkowania tlenem dla innych materiałów technologicznych.