

**Rezumatul proiectului pentru Tineri Cercetători
pentru anii 2017 - 2018**

**”Studiul proprietăților fizice ale pulberilor de $\text{Cu}_2\text{ZnSn}(\text{S},\text{Se})_4$ cu abatere de
la stoichiometrie cu grad diferit al dezordinii structurale,,**

Directorul proiectului: dr. Maxim GUC

$\text{Cu}_2\text{ZnSn}(\text{S},\text{Se})_4$ (CZTSSe) aparține familiei semiconductorilor calcogenizi cuaternari I₂-II-IV-VI₄ și este un material promițător pentru utilizarea în fotovoltaică, pentru obținerea hidrogenului din apă sau alte dispozitive electronice de nouă generație. Recent însă, au fost obținute și studiate probe sub formă de pulbere presată de CZTSSe. În contrast cu straturile subțiri sau cristalele aceluiași material, care de obicei conțin faze secundare, probele-pulbere arată un grad de omogenitate compozițională ridicat. Din acest considerent, probele respective sunt atractive pentru studiul fundamental. De asemenea, prezintă interes științific și probele pulbere CZTSSe cu abatere de la stoichiometrie sau cu grad diferit al dezordinii structurale. Din aceste considerente, proiectul dat are ca scop obținerea probelor-pulbere de CZTSSe și stabilirea unei corelații între gradul de stoichiometrie, ordinea/dezordinea structurală și proprietățile electrice ale acestora.

În urma desfășurării proiectului au fost obținute următoarele rezultate:

- ✓ Au fost obținute pastile de pulbere presată de $\text{Cu}_2\text{ZnSnS}_4$ și $\text{Cu}_2\text{ZnSnSe}_4$ cu diferită abatere de la stoichiometrie și cu grad diferit al dezordinii structurale prin metoda reacției chimice din fază solidă.
- ✓ Prin analiza dispersiei și difracției razelor X (WDX, XRD) a fost determinată compoziția chimică a probelor obținute, structura și existența fazelor secundare;
- ✓ Au fost caracterizate proprietățile electrice ale probelor-pulbere prin măsurători ale rezistivității la diferite temperaturi;
- ✓ Pentru toate probele de $\text{Cu}_2\text{ZnSnSe}_4$ cu abatere de la stoichiometrie și cu grad diferit al dezordinii structurale a fost determinată corelația dintre parametrii electrice și gradul de ordine/dezordine structurală. În rezultat s-a obținut o scădere a gradului de dezordine structurală cu apropierea probelor de compoziția stoichiometrică și o scădere a lățimii principalului nivel acceptor cu scăderea dezordinii structurale.

Rezultatele fundamentale și aplicative obținute în cadrul proiectului respectiv prezintă interes pentru comunitatea științifică și completează informația lipsă referitoare la compușii de tip kesterit. Proprietățile obținute pot fi utilizate de către comunitatea științifică pentru proiectarea dispozitivelor fotovoltaice pe baza materialelor studiate, prin luarea în considerație a mecanismelor de transport și a parametrilor electrice, care pot influența substanțial eficiența finală a celulelor solare. Toate rezultatele obținute au fost prezentate la conferințe atât naționale cât și internaționale, precum și au fost publicate în reviste cu factor de impact.