Electrozi-de-spate nanostructurați pentru celule solare cu eficiență ridicată

Cod: PN-III-P1-1.1-TE-2019-0868; Contract: TE 115 / 2020

1. Noțiuni Introductive și Plan de Realizare

Scopul principal al proiectului **NANODELL** este de a realiza o celulă solară de tip *„substrat”* cu eficiență ridicată, prin nanostructurarea controlată a electrodului colector de goluri (folosind matrici de nanofire de Cu perpendiculare pe suprafața electrodului), și prin utilizarea de materiale active prietenoase cu mediul înconjurător (compuși calcogeni A^{II}-B^{VI}, pe bază de Zn). Structura elementului fotovoltaic vizat, precum și elementele constituente ale acestuia sunt prezentate în **Figura 1**.

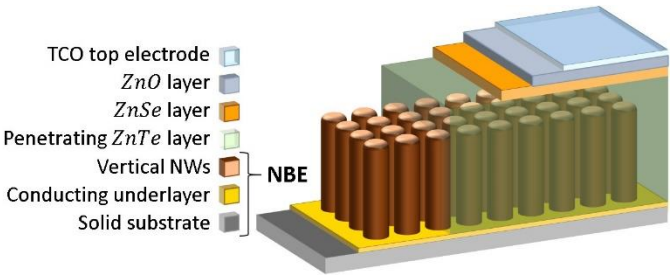


Fig. 1 Elementele dispozitivului fotovoltaic nanostructurat, având o configurație de tip *„substrat”*.

Îndeplinirea acestui obiectiv principal, implică execuția mai multor activități specifice, conform planului de realizare al proiectului **NANODELL**. Acest raport include o prezentare tehnico-științifică succintă a principalelor rezultate obținute în perioada **15 Septembrie – 31 Decembrie, 2020**, corespunzând **Etapei 1** a proiectului, așa cum este detaliată în **Tabelul 1**.

Tabel 1 Principalele activități propuse și rezultate estimate pentru **Etapa 1** a proiectului **NANODELL**

Nr.	Etapă / Activități	Rezultate estimate
1	**Etapa 1:** - Studiul literaturii de specialitate; - WP1: Dezvoltarea electrozilor-de-spate cu nanofire (NBEs); - WP4: Diseminarea rezultatelor și acțiuni de comunicare publică.	Inițierea paginii web a proiectului; Livrabil A/2: Producerea electrozilor-de-spate fără nanofire (BSs); Raportul intermediar științific, tehnic și financiar al primei etape.
2	**Act. 1.1:** - T.1.1: Fabricarea electrozilor-de-spate fără nanofire (BSs) optimizați.	Documentare pe internet vizând starea actuală a domeniului de cercetare; Studii ale literaturii de specialitate în vederea elaborării unor rutine experimentale; Prepararea unor filme subțiri metalice și anorganice prin evaporare termică în vid, pulverizare catodică în plasmă asistată de magnetron, și/sau prin depunere electrochimică.
3	**Act. 1.2:** - T.1.2: Evaluarea mecanică și morfo-structurală a electrozilor-de-spate fără nanofire (BSs).	Studii de caracterizare morfologică, compozițională și structurală a filmelor subțiri metalice și anorganice produse prin evaporare termică în vid, pulverizare catodică în plasmă asistată de magnetron, și/sau prin depunere electrochimică; Alegerea unei configurații optime pentru electrozii-de-spate fără nanofire (BSs).
4	**Act. 1.3:** - T.4.3 și T.4.4: Activități de diseminare și de management al proiectului.	Întâlniri științifice periodice între membrii echipei de cercetare; Evaluarea progresului științific; Inițierea paginii Web a proiectului și popularizarea acesteia pe canale de socializare online; Raportarea științifică, tehnică și financiară a primei etape.

Acțiunile de management al proiectului, precum și cele de diseminare științifică și de popularizare către publicul larg a rezultatelor experimentale obținute în această perioadă sunt enumerate în finalul acestui raport.

2. Rezumatul Tehnico-Științific al Rezultatelor Obținute

Conform planului de realizare al **Etapei 1** (vezi **Tabelul 1**), s-a debutat printr-un studiu minuțios al literaturii de specialitate [1-10], vizând starea actuală a domeniului de cercetare, precum și stabilirea unor rutine experimentale pentru depunerea unor filme subțiri, atât metalice (Au și Cu) prin evaporare termică în vid (TVE), cât și din compuși semiconductori anorganici (ZnS, $ZnSe$ și $ZnTe$) prin pulverizare în plasmă RF asistată de magnetron (MS) – **Act. 1.1** (vezi **Tabelul 1**). Aceste studii au vizat optimizarea condițiilor de depunere, pentru a obține atât electrozi-de-spate fără nanofire (BSs), cât și heterojoncțiuni semiconductoare din compuși calcogeni A^{II}-B^{VI} pe bază de Zn, de o calitate excepțională corespunzând cerințelor ulterioare de fabricare a dispozitivului fotovoltaic nanostructurat (mai multe detalii pot fi găsite în Anexa II – Secțiunea C a proiectului). Condițiile de depunere utilizate sunt detaliate în **Tabelul 2**.

Tabel 2 Condiții de depunere a filmelor subțiri metalice și anorganice utilizate în proiectul **NANODELL**

<table>
<tr><th colspan="4">Filme subțiri anorganice depuse prin pulverizare catodică în plasmă RF asistată de magnetron (MS)
Gaz: Argon (Ar); Presiune de lucru: $4.6 \cdot 10^{-3}\ mbar$; Putere: $80\ W$;
Temperatura substratului: $220°C$; Distanța țintă-substrat: $9\ cm$</th></tr>
<tr><th>Substrat</th><th>Film subțire</th><th>Timp de depunere (min)</th><th>Caracterizări efectuate
(parametrii obținuți)</th></tr>
<tr><td>Sticlă /
Siliciu (Si) dopat – p /</td><td rowspan="2">Sulfură de Zinc (ZnS)</td><td>60</td><td rowspan="6">Morfologice / Topografie (AFM)
(rugozitatea – RMS;
Skewness – Ssk; Kurtosis – Sk)

Morfologice / Secțiune (SEM)
(grosimea filmelor)

Optice (Transmisie și Absorbție)
(transmisie – grosimea filmelor;
absorbție – banda interzisă)</td></tr>
<tr><td>Sticlă /
Siliciu (Si) dopat – p /</td><td>90</td></tr>
<tr><td>Sticlă /
Siliciu (Si) dopat – p /</td><td rowspan="2">Selenură de Zinc ($ZnSe$)</td><td>60</td></tr>
<tr><td>Sticlă /
Siliciu (Si) dopat – p /</td><td>90</td></tr>
<tr><td>Sticlă /
Siliciu (Si) dopat – p /</td><td>Telurură de Zinc ($ZnTe$)</td><td>90</td></tr>
<tr><th colspan="4">Filme subțiri metalice depuse prin evaporare termică în vid (TVE), pentru realizarea electrozilor
Presiune de lucru: $5.2 \cdot 10^{5}\ Torr$; Temperatura substratului: $100°C$; Tratament termic ulterior: $30\ min$ la $100°C$</th></tr>
<tr><th>Substrat (Probă)</th><th>Film subțire</th><th>Timp de evaporare (min)</th><th>Caracterizări efectuate
(parametrii obținuți)</th></tr>
<tr><td>Sticlă / Al / ZnS /
Sticlă / Al / $ZnSe$ /
Sticlă / Al / $ZnTe$ /</td><td>Au</td><td>~5 (monitorizare QCM)</td><td rowspan="2">Electrice / Caracteristici $I-V$
(raportul de redresare)</td></tr>
<tr><td>Sticlă / Al / ZnS /
Sticlă / Al / $ZnSe$ /
Sticlă / Al / $ZnTe$ /</td><td>Au / Cu</td><td>~8 (monitorizare QCM)</td></tr>
</table>

Astfel, numeroase probe preparate în condițiile detaliate în **Tabelul 2** au fost expuse unor etape de caracterizare morfologică, topografică, optică și electrică, pentru a extrage principalii parametrii structurali și electrici ai filmelor obținute, cum ar fi: grosimea, rugozitatea sau banda interzisă – **Act. 1.2** (vezi **Tabelul 1**). Spre exemplificare, Figura 2 prezintă un astfel de set de caracterizări efectuate pe un film subțire de $ZnSe$ depus prin pulverizare catodică în plasmă RF asistată de magnetron, atât pe un substrat de Si (dopat p) cât și pe un substrat de sticlă optică.

Conform planului de realizare al proiectului NANODELL, aceste studii sunt încă în desfășurare și vizează stabilirea unor condiții optime de preparare a filmelor subțiri metalice (Au și Cu) și anorganice (ZnS, $ZnSe$ și $ZnTe$), pentru prepararea ulterioară atât a electrozilor-de-spate fără nanofire (BSs) cât și a filmelor anorganice active, în vederea realizării unor celule solare convenționale (de referință) cât mai performante (vezi **Act. 2.4** și **Act. 2.5** din **Etapa 2** a proiectului).

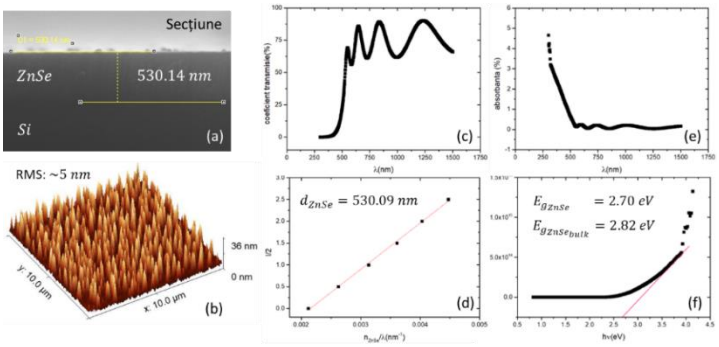


Fig. 2 Caracterizări morfologice și optice a unui film de ZnSe depus prin pulverizare catodică în plasmă RF cu magnetron. (a,b) SEM – vedere în secțiune și AFM – vedere 3D a suprafeței (substrat de Si); (c,d) Spectrul de transmisie folosit la evaluarea grosimii (substrat de sticlă); (e,f) Spectrul de absorbție folosit la evaluarea benzii interzise (substrat de Si).

3. Managementul Proiectului și Acțiuni de Diseminare

În această perioadă s-au desfășurat multiple acțiuni de diseminare și popularizare a rezultatelor (**Act. 1.3**, vezi **Tabelul 1**), în care s-a menționat suportul financiar adus de proiectul NANODELL implementat la Universitatea din București, cu sprijinul direct al UEFISCDI:

- Articole publicate în reviste cotate ISI (*Autor principal; ♣Membru în echipă):
  - A. I. Radu (Călugăr)*, **V. A. Antohe*♣**, S. Iftimie♣, A. Radu, M. Filipescu, L. Ion, M. Dinescu and Ş. Antohe*, "On the physical and photo-electrical properties of organic photovoltaic cells based on 1,10-Phenanthroline and 5,10,15,20-Tetra(4-pyridyl)-21H,23H-porphine non-fullerene thin films", *Appl. Surf. Sci.* **531**, 147332 (30 November 2020), **IF 7.392**, doi: 10.1016/j.apsusc.2020.147332.
  - C. Locovei*, N. Filipoiu*, A. Kuncser, A. E. Stanciu, Ş. Antohe, C. F. Florica, A. Costas, I. Enculescu, L. Piraux, V. Kuncser* and **V. A. Antohe*♣**, „Unidirectional Magnetic Anisotropy in Dense Vertically-Standing Arrays of Passivated Nickel Nanotubes", *Nanomaterials*, 10, 2444 (7 December 2020), **IF 5.719**, doi: 10.3390/nano10122444.
- Articole în curs de tehno-redactare (*Autor principal; ♣Membru în echipă):
  - A. M. Panaitescu*♣, … and **V.A. Antohe*♣**, „$CdTe$-embedded Cu nanowire arrays for improved absorber layer/holes collector interfaces in superstrate-type photovoltaic cells", in preparation.
- Conferințe naționale și internaționale (*Autor principal; ♣Membru în echipă):
  - I. Antohe*, A. Stochioiu, **V. A. Antohe♣** and G. Socol, "Picomolar detection of 4-nitrophenol using a polyaniline/platinum-coated fiber optic surface plasmon resonance sensor", *Nanoscience and Nanotechnology International Online Conference* (NanoPT 2020), September 23-24, 2020, Portugal (Online Presentation).
  - V. A. Antohe♣ and Ş. Antohe*, "Physical Properties pf RF-sputtered $ZnSe$ Thin Films for Photovoltaic Applications", *Conferința Științifică de Toamnă a Academiei Oamenilor de Știință din România* (AOSR), November 25-27, 2020, Romania (Online Presentation).
- Activități de popularizare tehnico-științifică către publicul larg:
  - Inițierea, primul update și popularizarea pe rețelele sociale a paginilor Web dedicate proiectului NANODELL (mdeo.eu/MDEO/Proiecte/TE115/ și ava.myasustor.com/nanodell), unde sunt prezentate mai multe informații despre proiect, rezultatele științifice obținute, precum și acțiunile de diseminare științifică și publică desfășurate până în prezent.
  - Implicarea în cadrul evenimentului: *„Școala de vară de știință și tehnologie de la Măgurele"* (MSciTech 23/08 – 05/09, 2020):
    - Prezentarea video-online a laboratoarelor MDEO, insistând pe temele de cercetare active, inclusiv NANODELL, https://www.youtube.com/watch?v=gzLZAmR9hG8&list=PLfDXH44OvfG1FzG0L1cGBOAyTmbPj4Ey2&index=11
  - Implicarea Directorului de Proiect în cadrul evenimentului online: *„Noaptea Cercetătorilor"* din 27 Noiembrie 2020:
    - Realizarea unui clip video de prezentare a Laboratorului de Nanotehnologii aparținând centrului MDEO unde se implementează proiectul NANODELL (Live Facebook: https://www.facebook.com/ifa.magurele/videos/2130553770407873).
    - Filmarea video a unui experiment de creștere și caracterizare a unei matrici de nanofire de Cu aliniate-vertical pe substrat (obiectiv NANODELL), Live YouTube: https://www.youtube.com/watch?v=CFzOWWTktJ4&t=21425s).
- Managementul proiectului:
  - S-au organizat întâlniri frecvente între membrii echipei pentru stabilirea priorităților, precum și a gradului de implicare al fiecăruia.
  - S-au achiziționat mici instrumente de laborator necesare implementării proiectului: un pH-metru cu agitator magnetic, o balanță analitică de precizie, un stativ de electrozi, precum și un set de electrozi de electrochimie cu accesoriile aferente.
  - S-a realizat prezentul raport tehnico-științific, precum și raportul financiar al **Etapei 1** a proiectului.

Bibliografie

[1] Electrochem **1**:286 (2020), doi: 10.3390/electrochem1030019; **[2]** Phys. Status Solidi B (2020), doi:10.1002/pssb.202000284; **[3]** Elsevier Progress in Materials Science **56**:175 (2011), doi: 10.1016/j.pmatsci.2010.10.001; **[4]** Journal of the Electrochemical Society **131** (1984); **[5]** Thin Solid Films **204**:397 (1991); **[6]** Journal of Applied Physics **90**:4265 (2001), doi: 10.1063/1.1397279; **[7]** Optical and Quantum Electronics **51**:278 (2019), doi: 10.1007/s11082-019-1994-6; **[8]** Journal de Physique III 6:1133 (1996); **[9]** Applied Physics Letters **49**:85 (1986), doi: 10.1063/1.97359; **[10]** Journal of Optoelectronics and Advanced Materials **11**:425 (2009).

Data: 08/12/2020 **Director de Proiect:** Conf. Univ. Dr. Ing. Vlad-Andrei ANTOHE