

Halkopirītu cieto šķīdumu pētījums ar *Ab initio* metodēm

J. Grechenkov¹, A. Gopejenko¹, D. Bocharov¹, A.I. Popov¹, M. G. Brik², S. Piskunov¹

¹Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts

²Fizikas institūts, Tartu universitāte

Halkopirīti ir pusvadītāji ar trīskāršu struktūru (I-III-VI₂) kas ir ļoti daudzsoļi fotoelementu lietojumos. Viena no šīm īpašībām, kuru izmanto fotoelementu producēšanā, ir halkopirītu spēja veidot cietus šķīdumus (piemēram, Cu_xAg_{1-x}GaS₂). Aizliegtas zonas platums šajā gadījumā nepārtraukti mainās noteiktā diapazonā, palielinoties viena no elementu saturam, un tādējādi tiek paveikta aizliegtas zonas regulēšana lielākai saules bateriju efektivitātei.

Prezentētā darbā ir aplūkoti dažādu halkopirītu savienojumu (CuGaS₂, AgGaS₂, CuGaSe₂, CuInS₂) un to attiecīgo ciesto šķīdumu kvantu ķīmisko aprēķinu rezultāti. Šiem materiāliem ir optisko īpašību teorētiskās prognozes. Īpaša uzmanība tiek pievērsta dažādu jonu novietojumam ciesto šķīdumu kristālrežģī un to ietekmei uz iegūtajām īpašībām.

Aprēķini tika veikti, izmantojot CRYSTAL17 modelēšanas rīku un Latvijas superdatoru klasteri (LASC), izmantojot elektronu blīvuma funkcionāla teorijas (DFT) pieeju un LCAO-GTF bāzes komplektu.

Rezultāti tiek salīdzināti ar literatūrā atrodamajiem eksperimentālajiem datiem un veido metodoloģisko bāzi turpmākai halkopirīta materiālu izpētei.

Autori pateicas LZP projektam lzp-2021\1-0322 par finansiālu atbalstu pētniecībā

Ab initio study of chalcopyrite solid solutions

J. Grechenkov¹, A. Gopejenko¹, D. Bocharov¹, A.I. Popov¹, M. G. Brik², S. Piskunov¹

¹Institute of Solid State Physics, University of Latvia

²Institute of Physics, University of Tartu

Chalcopyrites are semiconductors with ternary structure (I-III-VI₂) that show great promise in photovoltaic applications. One of the properties that is readily exploited in solar cell manufacturing is the ability of chalcopyrites to form solid solutions (e.g. Cu_xAg_{1-x}GaS₂). The bandgap in this case changes continually in a specific range as the content of one of the elements increases, thus enabling bandgap tuning for greater solar cell efficiency.

In the presented work we discuss the results of quantum-chemical computations for various chalcopyritic compounds (CuGaS₂, AgGaS₂, CuGaSe₂, CuInS₂) and their respective solid solutions. For these materials theoretical predictions of optical properties are given. Special care is taken in considering the atomic positions inside the crystal lattice of solid solutions and their effect on the calculated electronic properties.

Calculations were performed using CRYSTAL17 code and Latvian Supercomputer Cluster (LASC), utilizing the DFT approach and LCAO-GTF basis sets.

Results are compared with experimental data found in literature and form a methodological basis for further study of chalcopyritic materials.

The financial support of project Nr. lzp-2021/1-0322 is greatly acknowledged.