



Latvijas Zinātnes padome

Dopēto trīskomponentu halkopiritu lielmēroga datormodelēšana fotoelektriskajām vajadzībām

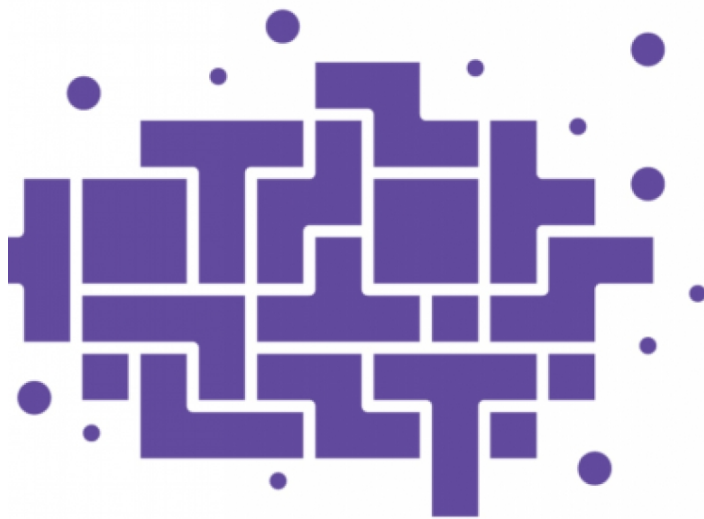
Statuss: Īstenošanā

Publicēts: 19.05.2023.

Dabaszinātnes

Fundamentālo un lietišķo pētījumu projekti

(FLPP)



FLPP

FUNDAMENTĀLO UN LIETIŠĀO PĒTĪJUMU PROJEKTI

Dopēto trīskomponentu halkopiritu lielmēroga datormodelēšana fotoelektriskajām vajadzībām

Sākums: 01/2022 Noslēgums: 12/2024

Projekta numurs

Izp-2021/1-0322

Finansējums

299 947 EUR

Projekta vadītājs

Sergejs Piskunovs, piskunov@lu.lv

Projektu īsteno

Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts

Zinātnes nozare

Fizika un astronomija; Materiālzinātne

Kopsavilkums

Ilgtspējīga enerģijas ražošana un fosilās enerģijas izmantošanas samazināšana ir atkārtots aicinājums rīkoties mūsdienu zinātnei. Viens no perspektīvākajiem veidiem, kā pārvarēt šo problēmu, ir izstrādāt efektīvākas metodes saules enerģijas izmantošanai. Tāpēc fotoelementu (FE) materiālu izpēte ir ārkārtīgi svarīga. Efektīvam FE materiālam jābūt ar piemērotu aizliegtās zonas platumu un spēcīgu saules starojuma absorbciju, to vēlāk pārveidojot elektroenerģijā. Starp dažādiem materiāliem, ko piedāvā izmantot saules enerģijas paneļos, visdaudzsološākie kandidāti ir pusvadītāju halkopiriti (chalcopyrites, CP). CP ķīmiskā sastāva elastīgums paver plašas iespējas samērā vienkāršai modifikācijai ar daļēju vai pilnīgu atomu aizvietošanu, kā rezultātā tiek precīzi noregulētas to optiskās un elektroniskās īpašības. Ierosinātā projekta ietvaros, izmantojot modernas kvantu-ķīmiskās skaitļošanas pieejas, mēs plānojam izpētīt struktūras īpašību saistību ar 3d pārejas metāla un retzemju jonu leģēto CP elektroniskajām un optiskajām īpašībām un tādējādi izveidot plašu datubāzi par fotoelektrisko CP savienojumu fizikālajām īpašībām. Kā galvenais rezultāts tiks iegūtas jaunas zināšanas par kristāla un piemaisījumu īpašību mijiedarbību fotoelektrisko CP materiālu bagātajā saimē, kam būtu gan lietišķā, gan fundamentālā nozīme materiālzinātnēs.

Projektu konkurss:

Fundamentālo un lietišķo pētījumu projektu 2021. gada atklātais konkurss

<https://www.lzp.gov.lv/lv/projekts/dopeto-triskomponentu-halkopiritu-lielmeroga-datormodelesana-fotoelektriskajam-vajadzibam>