



ГОСУДАРСТВЕННОЕ ПАТЕНТНОЕ
ВЕДОМСТВО

(12) **Описание изобретения** К МАЛОМУ ПАТЕНТУ

1

(21) 2401927
(22) 06.02.2024
(46) Бюл. 213, 2024
(71) Физико-технический институт им. С.У. Умарова
Национальной академии наук Таджикистана
(72) Бурхонзода Амондуллои Саидали (TJ), Нематов
Дилшод Давлатшоевич (TJ), Шокир Фарход (TJ),
Ботуров Кадир (TJ)
(73) Бурхонзода Амондуллои Саидали (TJ), Нематов
Дилшод Давлатшоевич (TJ), Шокир Фарход (TJ),
Ботуров Кадир (TJ)
(54) **НАНОКОМПОЗИТНЫЙ МАТЕРИАЛ НА
ОСНОВЕ ТИТАНАТА КАЛЬЦИЯ**
(56)

1. Dahlke S., Sterling J., Meehan C. Policy and market drivers for advancing clean energy // *Advances in Clean Energy Technologies*. – 2021. – P. 451–485. DOI: 10.31219/osf.io/hsbry.

2. Electronic resource. Date of access: 09/10/2022. url: <https://www.nrel.gov/pv/cell-efficiency.html>.

3. Assadi M. K. et al. Recent progress in perovskite solar cells // *Renewable and Sustainable Energy Reviews*. – 2018. – V. 81. – P. 2812–2822. DOI: 10.1016/j.rser.2017.06.088.

4. Zhang H. et al. Polystyrene stabilized perovskite component, grain and microstructure for improved efficiency and stability of planar solar cells // *Nano Energy*. – 2018. – V. 43. – P. 383–392. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.nanoen.2017.11.024>.

5. Kojima A. et al. Organometal halide perovskites as visible-light sensitizers for photovoltaic cells // *Journal of the american chemical society*. – 2009. – V. 131. – №. 17. – P. 6050–6051. DOI: <https://doi.org/10.1021/ja809598r>.

6. Chen J., Wang Y. Personalized dynamic transport of magnetic nanorobots inside the brain vasculature // *Nanotechnology*. – 2020. – V. 31. – №. 49. – P. 495706. DOI: <https://doi.org/10.1021/ja809598r>.

7. Yang S. et al. Recent advances in perovskite solar cells: efficiency, stability and lead-free perovskite // *Journal of Materials Chemistry A*. – 2017. – V. 5. – №. 23. – P. 11462–11482. DOI: <https://doi.org/10.1039/C7TA00366H>.

2

8. Sasaki S. et al. Orthorhombic perovskite CaTiO_3 and CdTiO_3 : structure and space group // *Acta Crystallographica Section C: Crystal Structure Communications*. – 1987. – Т. 43. – №. 9. – С. 1668–1674.

9. Ali R., Yashima M. Space group and crystal structure of the perovskite CaTiO_3 from 296 to 1720 K // *Journal of Solid-State Chemistry*. – 2005. – Т. 178. – №. 9. – С. 2867–2872.

10. D.D. Nematov, A.S. Burhonzoda, F.Shokir. Analysis of the structural characteristics and optoelectronic properties of CaTiO_3 as a non-toxic raw material for solar cells: A DFT study // *E-Print of Cornell University*: <https://arxiv.org/abs/2210.14835> [Materials Science]. – 2022 – 12 pages. DOI: <https://doi.org/10.48550/arXiv.2210.14835>.

Изобретение относится к области физики, в частности нанокompозитных материалов на основе титаната кальция (CaTiO_3) и предназначено для применения в области возобновляемых источников энергии в качестве основы для изготовления элементов солнечных панелей нового поколения.

Полученные образцы нанокompозитных материалов на основе титаната кальция (CaTiO_3), относятся к наукоёмкой отрасли разработки структурных элементов солнечных панелей нового поколения, где в качестве фотоэлементов используются перовскитные материалы. Полученные образцы нанокompозитных материалов на основе титаната кальция (CaTiO_3), который также известен под названием перовскит, является одним из основных элементов для разработки нанокристаллических плёнок солнечных панелей третьего поколения.

Таким образом, основным преимуществом полученных образцов нанокompозитных материалов на основе титаната кальция (CaTiO_3) является улучшение его абсорбционных свойств и повышение эффективности преобразования солнечной энергии в электричество.

Изобретение относится к области прикладной физики и современного материаловедения по созданию нанокompозитных материалов на основе титаната кальция (CaTiO_3) и предназначено для применения в области возобновляемых источников энергии в качестве основы для изготовления элементов солнечных панелей нового поколения.

Нанокристаллы перовскитов являются одними из наиболее изучаемых объектов современного материаловедения. Они обладают превосходными оптическими характеристиками (например, чистота и яркость излучаемого света), что делает их привлекательными для использования в современных лазерных системах. В частности, использование перовскитов позволяет создавать лазеры микронных размеров. Это является важным для визуализации процессов в сильно рассеивающих средах, таких как биологические ткани.

Однако перовскиты являются нестабильными на воздухе, при взаимодействии с водой, а также при интенсивной засветке. Поэтому одной из главных задач, которая стоит перед научным сообществом, является увеличение стабильности нанокристаллов перовскитов.

Чтобы увеличить стабильность перовскитов, можно покрывать нанокристаллы специальными органическими молекулами, а можно внедрять нанокристаллы в защитные матрицы.

Полученные нанокompозитные материалы относятся к семейству перовскитов, которые с 2010 года рассматриваются международным сообществом в качестве основы перспективных солнечных панелей.

Из уровня техники известны обычные фотоэлементы [1], разработанные на основе монокристаллов кремния или германия (с-Si, Ge – солнечные панели первого поколения), имеющие относительно высокую стоимость обработки, такие панели доступны далеко не всем. Коэффициент полезного действия (КПД) кремниевых панелей обычно составляет 17–22% (теоретический предел 29.4%).

Известны солнечные панели второго поколения [2] изготовленные на основе аморфного (a-Si), поликристаллического (multi-cSi) и микрокристаллического (μc-Si) кремния. В том числе, среди солнечных панелей второго поколения, изготовленных на основе кремния и композитных полупроводников – CSG, CdTe, CIS/CIGS, GaP, InP, GaAs, CZTS. Их производственный процесс относительно прост, и благодаря своей гибкости их можно использовать на разных уровнях.

Однако из-за не столь высокого КПД (фактически 12–17%), экологически вредного производственного процесса и отходов производства, дороговизны переработки и низкой стабильности

панели второго поколения не получили широкого распространения.

Известны панели на основе перовскитных элементов (третье поколение) [3–5] с общей формулой - $\text{Ca}_x\text{Ti}_y\text{O}_z$, а также различные их разновидности, такие как SrTiO_3 , CaRbF_3 , LaAlO_3 , SrTiO_3 , DyScO_3 , GdScO_3 обладающие относительно высокой эффективностью преобразования солнечной энергии в электричество (более 22%), отличающиеся низкой стоимостью и простотой производственного процесса.

Однако основным препятствием для их массового распространения является недостаточный срок использования, что является одной из важнейших научных проблем в области возобновляемых источников и ее подотрасли – солнечной энергетики.

Целью изобретения является создание нанокompозитного материала на основе перовскитов типа CaTiO_3 с улучшенной структурой гетероперехода, повышенным поглощающим свойством и эффективным процессом преобразования света в электроэнергию.

Титанат кальция (CaTiO_3), имеющий структуру перовскита (Фиг. 1), может быть использован для изготовления высокоэффективных солнечных панелей третьего поколения [6–7]. Для этого, прежде всего, необходимо найти его особую молекулярную структуру, которая сможет повысить его поглощательные свойства и эффективность процессов преобразования света в электроэнергию. На Фиг. 1 показаны релаксационные структуры фаз α (а), β (б) и γ (в) CaTiO_3 .

Сущность изобретения заключается в том, что нанокompозитный материал создано на основе перовскитом типа CaTiO_3 , состоящим из кальция, титана и кислорода при следующем соотношении компонентов, мас.в%: кальций - 29.46; титан - 35.27; кислород - 35.27.

Нанокompозиты обладают высокой общей проводимостью, большой подвижностью кислорода решетки и повышенной скоростью восстановления водородом или метаном, превышающей таковую для отдельных фаз.

Перовскитный материал CaTiO_3 производится методом твердофазной реакции. В качестве исходных материалов использовались химически сверхчистые порошки CaCO_3 (3.003 г.) и TiO_2 (2.397 г.) при соотношении 1:0,8. Для удаления адсорбированной воды исходных материалов их предварительно нагревают при температуре 800 К в течение 30 минут, что позволяет точно измерить их нетто-массу. Затем эти порошки подвергают непрерывному перемешиванию в течение 30 минут. Далее внутри цилиндрических пластин диаметром 10 мм и толщиной стенок 2 мм их сжимали под давлением 30 ГПа и придали форму в виде “таблеток” с высокой плотностью. Затем для проведения реакции данный материал был выдержан при температуре 1190°C в

течение 8 часов. Фазовую чистоту и кристаллическую структуру синтезированного образца титаната кальция изучают с помощью рентгеновского аппарата. Химический состав синтезированного титаната кальция CaTiO_3 также анализируют с помощью сканирующего электронного микроскопа производства Японии (марки JSM-IT200).

Основным преимуществом разработанных нанокompозитных материалов титаната кальция является особенность их структурных, оптических и электронных свойств, полученных за счет ионизации, процесса обработки которых можно разделить на 2 этапа – теоретического и практического.

В теоретической части путем проведения квантово-механических расчетов в рамках методов теории функционала плотности была изучена и определена молекулярная структура нанокompозитного материала, обладающего наиболее высокой поглощающей способностью и структурной стабильностью [9].

В практической части были проведены высокоточные лабораторные эксперименты с использованием ультразвуковой ванны - для очистки состава сырья, лабораторной муфельной печи - для нагрева перовскитного сырья (CaCO_3 и TiO_2) и получения необходимого состава (CaTiO_3).

В связи с этим разработка солнечных панелей на основе CaTiO_3 , улучшение их светопоглощающих свойств, повышение их производительности и структурной стабильности в нормальных условиях за счет воздействия различных внешних факторов и легирования их структуры является актуальной задачей одно из решений которой предложено авторами.

Полученные образцы нанокompозитных материалов на основе титаната кальция (CaTiO_3), относятся к наукоёмкой отрасли разработки структурных элементов солнечных панелей нового поколения, где в качестве фотоэлементов используются перовскитные материалы. Полученные образцы нанокompозитных материалов на основе титаната кальция (CaTiO_3), который также известен под названием перовскит, является одним из основных элементов для разработки нанокристаллических плёнок солнечных панелей третьего поколения.

Процесс переработки нанокompозитных материалов перовскита семейства CaTiO_3 – титанат кальция, образцы которых были получены авторами, состоит из следующих этапов:

- теоретические квантово-химические и молекулярно-динамические исследования по оптимизации оптических и электронных свойств и соотношения составов легированных титанатов кальция для повышения эффективности солнечных панелей, изготовленных на их основе;

- рентгеноструктурное и спектральное исследование синтезированного в лабораторных условиях природного титаната кальция и определение его структурной фазы;

- теоретическое и экспериментальное исследование структурных, электронных,

оптических и спектрально-люминесцентных свойств чистого CaTiO_3 ;

- исследование структурных, электронных, оптических и спектрально-люминесцентных свойств CaTiO_3 , легированных различными металлами, с целью регулирования их тепловых и оптоэлектронных свойств, определения оптимальной легирующей добавки, а также увеличения коэффициента поглощения фотонов и расширения диапазона поглощения света CaTiO_3 ;

- экспериментальное исследование фазового перехода CaTiO_3 после сплавления с различными металлами и определение стабильных фаз в нормальных условиях с целью увеличения срока их службы.

Таким образом, авторами разработана технология оптимизации структурных, оптических и электрофизических свойств CaTiO_3 путем определения атомов оптимального катионного и анионного замещения (Фиг. 2) и синтезированы первые образцы нанокompозитных пленок данного материала. Рентгеноструктурный анализ показал, что структура полученного нанокompозитного материала CaTiO_3 стабильна. На Фиг. 2 показаны плотность состояний α , β , γ фаз CaTiO_3 для верхнего (Spin up) и нижнего спинов (Spin down).

Среди преимуществ перовскитных солнечных панелей, в том числе семейства CaTiO_3 , создающих реальную основу для их реализации, можно отметить:

- эффективное пропускание света пленкой перовскита толщиной 1 мкм равно эффективности пленок на основе кремния толщиной 180 мкм;

- получение титаната кальция является недорогим процессом и его переработка относительно проста;

- за последние 16 лет (2009–2024 гг.) эффективность (КПД) солнечных панелей на основе перовскитов увеличилась с 4% (2009 г., первое изобретение) до 30% (2023 г., лабораторный образец), которые по данным показателям намного превосходят традиционные кремниевые панели (1954–2023 гг. - 69 лет, от 6% до 26–28%) [10];

Таким образом, применение данной технологии будет полезно для разработки солнечных панелей нового поколения, подходящих для условий и климата Таджикистана и коммерциализации материалов с легко регулируемыми свойствами на основе титаната кальция.

Основным преимуществом полученных образцов нанокompозитных материалов на основе титаната кальция (CaTiO_3) является улучшение его абсорбционных свойств и повышение эффективности преобразования солнечной энергии в электричество. Рассчитанные оптические свойства,

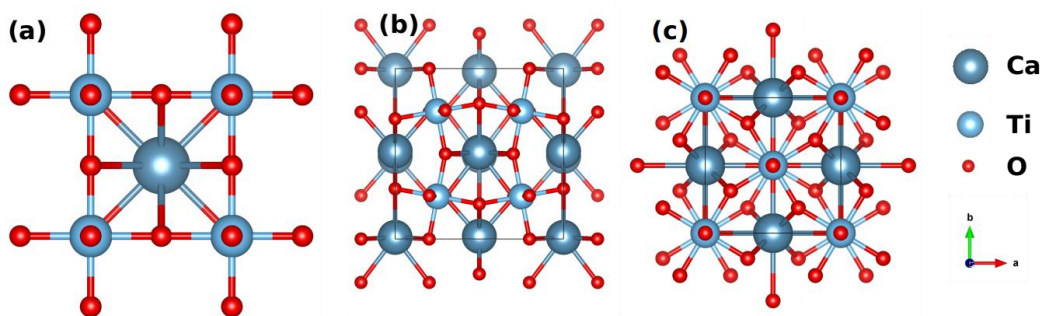
состоящие из светопоглощения и фотопроводимости, показали, что полученные нанокompозитные материалы обладают высокой поглощающей способностью, которая позволяет рекомендовать их для эффективного применения в разработке нанопленок солнечных элементах третьего поколения.

Формула изобретения

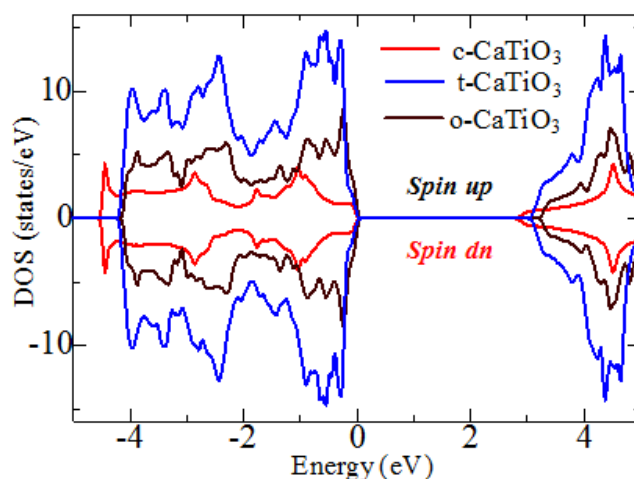
1. Нанокompозитный материал полученный на основе перовскита титаната кальция (CaTiO_3) в виде таблетки, обладающий высокой плотностью, светопоглощающей способностью и структурной стабильностью, из химически сверхчистые порошки исходного сырья CaCO_3 и TiO_2 при соотношении 1:0,8, путем проведения квантово-механического

расчета плотности материала и ультразвуковой очистки состава от абсорбированной воды и нагрева для разработки структурных элементов нанокристаллических пленок солнечных панелей.

НАНОКОМПОЗИТНЫЙ МАТЕРИАЛ НА ОСНОВЕ ТИТАНАТА КАЛЬЦИЯ



Фиг. 1



Фиг. 2

Компьютерный набор: Газиев М.Х.