

**ПРОЕКТНА ПРОПОЗИЦІЯ НА УЧАСТЬ У КОНКУРСІ СПІЛЬНИХ  
УКРАЇНСЬКО- АВСТРИЙСЬКИХ НАУКОВО-ДОСЛІДНИХ ПРОЕКТІВ  
ДЛЯ РЕАЛІЗАЦІЇ У 2017 – 2018 рр.  
(Міністерство освіти і науки України)**

**APPLICATION FORM FOR THE CALL FOR PROPOSALS OF THE  
JOINT UKRAINE- AUSTRIA R&D PROJECTS  
FOR THE PERIOD OF 2017 – 2018  
(To be applied to the Ministry of Education and Science of Ukraine)**

**1. Загальна інформація/General information**

Проект / Project
<p><b>1. Назва:</b> Деформаційні ефекти у кремній-германієвих наноструктурах для ефективного термо- та фотоелектричного енергоперетворення</p> <p><b>Код державної класифікації. Рубрикатор науково-технічної інформації</b> <b>ДК 022:2008:</b> 53.41.43 Нанорозмірні напівпровідникові матеріали</p> <p><b>Title:</b> Strain effects in SiGe nanostructures for efficient thermo- and photoelectric energy conversion</p> <p><b>2. Мета і галузь дослідження:</b> <b>Aims and field of the project:</b></p> <p>Мета цієї пропозиції полягає у дослідженні фото- і термоелектричного перетворення енергії у новітніх наноструктурах із пружно деформованими германієвими квантовими точками (КТ), вбудованими в діелектричну матрицю (<math>\text{SiO}_2</math> та <math>\text{Si}_3\text{N}_4</math>), розміщену на кремнієвій підкладці. Першочерговим завданням є виявлення характеристик деформованого стану Ge КТ в діелектричних матрицях та шаруватих Ge/Si структурах та їх зв'язку із ефективністю фото- і термоелектричного перетворення. Крім того, буде вивчено вплив сонохімічної обробки поверхні на характер напруженого стану в приповерхневих шарах наноструктур. В результаті виконання проекту будуть створені передумови оптимізації параметрів напруженого стану германієвих наноструктур для покращення фото- і термоелектричного енергоперетворення.</p> <p>The objective of this proposal is to study photo- and thermoelectric energy conversion in novel strained Ge quantum dots (QDs)/dielectric matrix (<math>\text{SiO}_2</math> and <math>\text{Si}_3\text{N}_4</math>)-based nanostructures. It is the primary goal of this proposal to understand the fundamental strain behaviours of Ge QDs in the dielectric matrices, as well as Ge/Si layered structures and their potentials for improving photo- and thermoelectric energy conversion. Particular attention will be given to sonochemical setup, aiming to modify the elastic strains arisen in the subsurface region of the nanostructures. The success of this project will be capable of optimizing the strain characteristics of Ge-based nanomaterials for a better photo- and thermoelectric power conversion.</p>

Партнери Partners	Україна Ukraine	Республіка Австрія Republic of Austria
<b>1. Керівник (ПІБ) Project leader (first and last name)</b>	Коротченков Олег Олександрович Korotchenkov Oleg	Віктор Шлоссер Victor Schlosser
<b>2. Посада та звання Position</b>	проф., проф. prof., prof.	проф., PhD prof., PhD
<b>3. Установа Institution</b>	Київський національний університет імені Тараса Шевченка, фізичний факультет Taras Shevchenko National University of Kyiv, Faculty of Physics	Віденський університет, фізичний факультет  University of Vienna, Faculty of Physics
<b>4. Адреса Address</b>	Україна, 01601, місто Київ, вул. Володимирська, 64/13 64/13, Volodymyrska Street, City of Kyiv, Ukraine, 01601	Струдлхофгассе, 4 Відень, А-1090, Австрія  Strudlhofgasse 4 Wien, A-1090, Austria
<b>5. Тел., факс Phone number, fax</b>	(044)526-05-10	(+43 1) 4277 72611, (+43 1) 4277 51429
<b>6. Електронна пошта E-mail</b>	olegk@univ.kiev.ua	viktor.schlosser@univie.ac.at
<b>7. Інші виконавці (ПІБ, звання) Other team members (first and last names, position)</b>	Надточій А. Б., с.н.с. Подольян А. О., доцент Курилюк В. В., доцент (до <b>35 років</b> ) Закіров М. І., аспірант (до <b>35 років</b> )  Nadtochiy A., Research Sci. Podolian A., docent Kuryliuk V., docent Zakirov M., post-graduate student	Анкіт Міттал, аспірант доцент (до <b>35 років</b> ) Мануель Серіні, студент доцент (до <b>35 років</b> )  Ankit Mittal, PhD student Manuel Serini, MSc student

## 2. Список публікацій, які відносяться до теми проекту (5 максимум)/ Relevant publications (5 at most)

Україна Ukraine	Республіка Австрія Republic of Austria
1. V. Kuryliuk, A. Nadtochiy, O. Korotchenkov, C.-C. Wang, P.-W. Li, A model for predicting the thermal conductivity of SiO <sub>2</sub> -Ge nanoparticle composites, Phys. Chem. Chem. Phys. <b>17</b> , 13429 (2015). 2. O. Korotchenkov, A. Nadtochiy, V. Kuryliuk, C.-C. Wang, P.-W. Li, A.	1. A. M. Abd El-Hameed, M. Sabry, A. Ghitass, F.S. El-Tokhy, V. Schlosser, The performance of silicon solar cells exposed to a simulated low Earth orbit plasma environment: Laboratory ground tests J. Electron. Mater. <b>44</b> , 4740–4746 (2015). 2. A. Mittal, M. Rennhofer, A. Dangel, B. Duman, V. Schlosser, Power charge in

<p>Cantarero, <i>Thermoelectric energy conversion in layered structures with strained Ge quantum dots grown on Si surfaces</i>, Eur. Phys. J. B <b>87</b>, 64 (2014).</p> <p>3. V. V. Kuryliuk, O. A. Korotchenkov, <i>Features of the stress-strain state of Si/SiO<sub>2</sub>/Ge heterostructures with germanium nanoislands of a limited density</i>, Semiconductors <b>47</b>, 1031–1036 (2013).</p> <p>4. A. B. Nadtochii, O. A. Korotchenkov, V. V. Kuryliuk, <i>Subsurface localization of charge carriers in Si/SiO<sub>2</sub>/Si<sub>x</sub>Ge<sub>1-x</sub> nanostructures</i>, Technical Physics, <b>58</b>, 393–399 (2013).</p> <p>5. V. Kuryliuk, O. Korotchenkov, A. Cantarero, <i>Carrier confinement in Ge/Si quantum dots grown with an intermediate ultrathin oxide layer</i>, Phys. Rev. B <b>85</b>, 075406 (2012).</p>	<p><i>amorphous silicon technology by low temperature annealing</i>, EPJ Photovoltaics, <b>6</b>, 65304 (2015).</p> <p>3. S. Mitterhofer, J. D. Pühringer, V. Schlosser, <i>An acoustic set up for the vibration analysis of silicon wafers</i>, IECON Proceedings (Industrial Electronics Conference) 8068 - 8073 (2014).</p> <p>4. O. Korotchenkov, A. Nadtochiy, V. Schlosser, <i>Study of photovoltage decays in nanostructured Ge/Si</i>, Diffusion and Defect Data B: Solid State Phenomena <b>205-206</b>, 406–411 (2014).</p> <p>5. J. Schmid, M. Drapalik, E. Kancsar, V. Schlosser, G. Klinger, <i>A study of power quality loss in PV modules caused by wind induced vibration located in Vienna</i>, Solar Energy <b>85</b>, 1530–1536 (2011).</p>
---	--

### 3. Обґрунтування проекту (до 1 сторінки А4, мін. 12 шрифт) / Background of the project (up to A4 1 page, min font 12)

Однією із найважливіших величин, що визначають термоелектричні властивості речовини, є її термоелектрична ефективність. Ефективність термоелектричного перетворення визначається величиною  $ZT = S^2 \sigma T / \kappa$ , де  $S$ ,  $\sigma$ ,  $\kappa$  і  $T$  – відповідно коефіцієнт Зеєбека, електропровідність, теплопровідність і абсолютна температура. Встановлено, що низькорозмірні системи здатні забезпечити набагато більшу ефективність  $ZT$  у порівнянні із об'ємним матеріалом завдяки покращеній електропровідності і зниженій теплопровідності.<sup>1</sup>

Підвищену увагу приділяють вивченню теплових властивостей матеріалів із Ge квантовими точками, які дозволяють незалежно контролювати теплові та електронні властивості відповідних структур із широким спектром термоелектричних<sup>23</sup> і фотоелектричних<sup>45</sup> застосувань.

Теплопровідність наноструктурованих матеріалів сама по собі має велике технологічне значення для керування тепловими потоками у мікро- і наноелектроніці. У деяких пристроях, наприклад, комп'ютерних процесорах або напівпровідникових лазерах, необхідний ефективний тепловідвід. Ці пристрої потребують матеріалів з високою теплопровідністю. В інших системах, наприклад,

<sup>1</sup> L. D. Hicks, M. S. Dresselhaus, Phys. Rev. B **47**, 12727 (1993).

<sup>2</sup> A. Yadav, K. P. Pipe, W. Ye, R. S. Goldman, J. Appl. Phys. **105**, 093711 (2009).

<sup>3</sup> J. L. Liu, A. Khitun, K. L. Wang, W. L. Liu, G. Chen, Q. H. Xie, S. G. Thomas, Phys. Rev. B **67**, 165333 (2003).

<sup>4</sup> A. Algundo, N. Usami, T. Ujihara, K. Fujiwara, G. Sazaki, K. Nakajima, Y. Shiraki, Appl. Phys. Lett. **63**, 1258 (2003).

<sup>5</sup> H. Li, R.L. Stolk, C.H.M. van der Werf, R.H. Franken, J.K. Rath, R.E.I. Schropp, J. Non-Cryst. Solids **352**, 1941 (2006).

теплових бар'єрах або термоелектричних матеріалах, використовуваних для твердотілого охолодження, необхідна якомога менша теплопровідність. Наноструктурування здатне суттєво знизити  $\kappa$  монокристалічного матеріалу завдяки утворенню фононних бар'єрів, породжених численними інтерфейсами, на яких відбувається розсіювання фононів. Тим самим, багат шарові SiGe структури із набором нанорозмірних бар'єрів здатні істотно зменшити теплопровідність такого матеріалу що призводить до зниження  $\kappa$ .<sup>6</sup> Основні фононні механізми, що впливають на теплопровідність поблизу окремих шарів квантових точок, вирощених на плоскій підкладці, також були розглянуті.<sup>7</sup> Певну увагу було приділено ролі меж поділу і пов'язаним з ними пружними деформаціями у процесах розсіювання фононів в кристалічних напівпровідниках.<sup>8</sup>

Однак, незважаючи на наявні свідчення впливу механічних напруг на перенос тепла і носіїв заряду у наноструктурованих напівпровідниках, загальноприйнятної точки зору на це питання досі не вироблено. Це ще більш справедливо для виявлення внеску пружних деформації у генерації термо- і фотоелектричних сигналів у діелектричних матрицях із напівпровідниковими нановключеннями. Саме з'ясуванню особливостей протікання термо- і фотоелектричних процесів у системі германієвих квантових точок, вбудованих в діелектричну матрицю, присвячено запропоноване дослідження.

Даний проект сприятиме поглибленню співпраці між Київським національним університетом та Віденським університетом і формуванню міждисциплінарної робочої групи із синергетичним досвідом в галузі матеріалознавства, вимірювання фото- і теплофізичних властивостей, ефектів механічної напруги в наноструктурах GeSi.

Такий характер дослідницької програми сприятиме досягненню міждисциплінарного навчання студентів і аспірантів в обох університетах. Керівники проекту передбачають розширення досліджень студентів в рамках виконання даної роботи.

Дослідницька група Київського університету має великий досвід у проведенні фото- і теплофізичних досліджень, впливу сонохімічних ефектів на електричні та оптичні параметри напівпровідників, зокрема кремнію. Проводиться і теоретичний аналіз пружних полів у напівпровідникових наноструктурах методом FEM.

Дослідницька група Віденського університету має, зокрема, великий досвід в дослідженні кремнієвих сонячних елементів та створенні фотовольтаїчних пристроїв рвзного типу на базі кремнію. Проводяться дослідження перехідних електричних характеристик фотовольтаїчних елементів; вольт-амперні характеристики та виміри провідності; виміри часу життя неосновних носіїв заряду та локальної довжини дифузії, чутливих до електрично-активних дефектів; LBIC дослідження; виміри ємності на низьких та високих частотах, а також FTIR спектрів.

Дана проектна пропозиція має на меті поєднати досвід обох дослідницьких груп. Робота передбачає обмін зразками, виробленими у Відні та наявними у Києві, для їх дослідження різними методами у Відні та Києві. Цим обґрунтовується склад

<sup>6</sup> G. Pernot *et al.* Nature Mater. **9**, 491 (2010).

<sup>7</sup> P. E. Hopkins, J. C. Duda, C. W. Petz, J. A. Floro, Phys. Rev. B **84**, 035438 (2011).

<sup>8</sup> J. He, J. R. Sootsman, S. N. Girard, J.-C. Zheng, J. Wen, Y. Zhu, M. G. Kanatzidis, V. P. Dravid, J. Am. Chem. Soc. **132**, 8669 (2010).

дослідницьких груп для виконання даного проекту і можливість його реалізації даними групами.

The performance of thermoelectric energy conversion devices depends on the thermoelectric figure of merit ( $ZT$ ) of a material defined as  $ZT = S^2 \sigma T / \kappa$ , where  $S$ ,  $\sigma$ ,  $\kappa$  and  $T$  are the Seebeck coefficient, electrical conductivity, thermal conductivity and absolute temperature, respectively. It is now widely appreciated that low-dimensional systems can have  $ZT$  much larger than that of bulk material due to enhanced electron transport and reduced thermal conductivity.<sup>1</sup>

There has been increased interest in studying thermal properties of Ge QDs, which offer an intriguing ability to independently control thermal and electronic properties of the dots, stimulating a great deal of interests devoted mainly to possible thermoelectric<sup>2,3</sup> and photoelectric<sup>4,5</sup> applications.

The thermal conductivity of nanostructured materials itself is of great technological importance for micro- and nanoelectronics heat management, and for micro/nanoscale energy conversion on a chip. In some devices, such as computer processors or semiconductor lasers, the heat would escape away as efficiently as possible. These devices require materials with high thermal conductivity. In other systems, such as thermal barriers or thermoelectric materials used for solid-state refrigeration, the thermal conductivity would be as small as possible. Nanostructuring can significantly reduce  $\kappa$  of a single-crystalline material due to phonon barriers generated by multiply interfaces, where phonons are scattered. Thus, multi-layered SiGe structures with a set of individual phonon-scattering nanodot barriers can significantly alter the thermal conduction properties of a spatially defined nanosized regions, which results in decreased  $\kappa$ .<sup>6</sup> Певну увагу було приділено ролі меж поділу і пов'язаним з ними пружними деформаціями у процесах розсіювання фононів в кристалічних напівпровідниках.<sup>7</sup> Particular attention has been given to the role of interfaces and associated elastic strain in relation to its influence on phonon scattering in crystalline semiconductors.<sup>8</sup>

However, despite all of the supporting evidence for the involvement of strains, there is, nevertheless, still no general consensus about the origin of the reduction of the thermal conductivity in the system of Ge QDs buried into amorphous dielectric matrices. This conclusion is even more valid for the strain involvement into the generation of thermo- and photoelectric signals.

The project will promote close collaborations among the University of Vienna and Kyiv National University to form a highly interdisciplinary team with synergetic expertise in materials science, photo- and thermophysical property measurement, and strain effects in Ge nanostructures. The truly interdisciplinary nature of this research program will help to achieve interdisciplinary training of undergraduate and graduate students. The Principal investigators will make the efforts of extending the research impact to students by demonstrating photo- and thermoelectric energy conversion and explaining the basic ideas of these types of energy conversion.

The proposed work will be using the unique facilities and expertise of the two partners, e.g. the photovoltaic-related experience at Vienna and the one in the thermo- and photoelectric field at Kyiv. This understanding and otherwise unavailable capabilities will enable a significant effect on the transfer of knowledge in both research and education. This way, the potential of the cooperating groups may become better realised.

#### **4. Детальний опис проекту (до 2 сторінок), в т. ч. вказати необхідні для виконання проекту матеріали та реагенти / Detailed description of the project (up to 2 pages)**

Напівпровідникові наноструктури привертають значну увагу дослідників завдяки широким можливостям перебудови їх електричних, оптичних та теплових властивостей зі зміною розмірів, форми і матеріалу матриці, в яку вони вбудовані, а також завдяки унікальним ефектам квантового конфайнменту електронів та фононів.

Зокрема, германієві квантові точки надають багато переваг у порівнянні з багатьма альтернативними системами завдяки їх сумісності з технологіями CMOS побудови логічних електронних схем на базі кремнію та сильнішому ефекту квантування за рахунок більшого радіусу екситона Бора. Як наслідок, електронна структура Ge КТ легше модифікується у порівнянні, наприклад, із Si квантовими точками.

Крім того, Ge квантові точки є привабливими об'єктами з точки зору ефективності термоелектричного перетворення, завдяки нижчій об'ємній теплопровідності і вищій електричній провідності Ge у порівнянні із Si. Важливим є також той факт, що Ge КТ демонструють високу температурну стабільність у порівнянні із широко вживаних для цих цілей матеріалів на основі Те. Термоелектрика забезпечує перетворення теплової енергії у електричну твердотільними модулями і є за своєю суттю екологічно безпечною технологією. Однак, на сьогодні термоелектричне перетворення енергії обмежене низькою ефективністю, яка становить лише до однієї третини від ефективності конкурентних технологій перетворення енергії. У цьому контексті квантові точки є одним з перспективних класів матеріалів, які здатні підвищити ефективність термоелектричного перетворення і фактично революціонізувати галузь відновлювальних джерел енергії.

Системи Ge КТ мають також важливе значення для фотоелектричного застосування, забезпечуючи пряме перетворення світла в електричний струм.

Встановлено, що Ge точки, вирощені в діелектричній матриці ( $\text{SiO}_2$  або  $\text{Si}_3\text{N}_4$ ) можуть мігрувати скрізь цей діелектричний шар і вбудовуватись у кремнієву підкладку, утворюючи таким чином область контакту між КТ Ge і кремнієвою підкладкою. Через невідповідність параметрів ґратки Ge і Si такі частково занурені КТ генерують пружні деформації поблизу границі поділу Ge/Si. Це, у свою чергу, обумовлює зростання розсіювання носіїв заряду на границі поділу, а також їх захоплення у КТ Ge. Ці ефекти здатні суттєво покращити термо- та фотоелектричні характеристики такої структури у порівнянні із кремнієвою пластиною-підкладкою. Ці питання вивчені недостатньо і ним буде приділено особливу увагу у запропонованому дослідженні. Ще однією темою підвищеної уваги буде дослідження термоелектричних властивостей ланцюгів КТ Ge, що вбудовані в діелектричну матрицю і не мають контакту із кремнієвою підкладкою. Виявляється, що вони також є напруженими, незважаючи на той факт, що оточуюча матриця (наприклад,  $\text{SiO}_2$ ) є аморфною. Такі структури суттєво зменшують теплопровідність і є перспективними для термоелектричних застосувань. Аспекти впливу деформацій КТ Ge, розміщених у діелектричній матриці ( $\text{SiO}_2$  або  $\text{Si}_3\text{N}_4$ ), на термо- та фотоелектричні характеристики структури також будуть проаналізовані в рамках даної роботи.

Нарешті, передбачається вивчення коефіцієнту Зеебека і кривих загасання фотое.р.с. в цих структурах на різних стадіях сонохімічної обробки поверхні. Попередніми дослідженнями було показано, що така обробка здатна ефективно вплинути на характеристики пружних деформацій в підповерхневій області структур Si/Ge різного типу. Тим самим можна очікувати, що сонохімічна обробка поверхні здатна покращити фото- і термоелектричні характеристики енергоперетворення в досліджуваних структурах.

Сукупні фотоелектричні і термоелектричні дослідження кремній-германієвих наноструктур, запропоновані в даному дослідженні, підпорядковані загальній науковій меті зменшення залежності країни від викопного палива за рахунок зниження вартості електроенергії і підвищення ефективності відновлювального перетворення енергії фото- і термоелектричними модулями та системами. Вони також матимуть велике значення для охорони навколишнього середовища та екології країни.

Тому загальною метою даної проектної пропозиції є отримання повного уявлення про вплив пружних деформацій на термо- та фотоелектричні властивості систем із квантовими точками Ge, вбудованими в різні матриці підкладки.

Очікується також участь виконавців даного проекту у програмі ЄС з досліджень та інновацій «Горизонт 2020» в рамках конкурсу FET Open (консорціум наразі налічує 10 представників із 7 країн). Ця пропозиція присвячена створенню наноматеріалів із високою ефективністю термоелектричного перетворення і планується до участі в конкурсі в січні 2017 р. В рамках проектної заявки Горизонт 2020 планується участь трьох індустріальних фірм-партнерів, що засвідчує також можливість практичного використання результатів даного проекту.

Необхідні для виконання проекту матеріали та реагенти: дистильована вода, етанол, тетраетоксілан. Ці хімічні реагенти будуть використовуватись для очищення поверхонь зразків Si та SiGe (дистильована вода, етанол) і модифікації поверхні в процесі її обробки в ультразвукової ванні із вмістом тетраетоксілану.

Semiconductor nanostructures have attracted remarkable attention due to their extraordinarily tuneable electrical, optical and thermal properties by altering size, shape and embedded matrix, taking advantage of their unique quantum electron and phonon confinements as well as surface effects.

In particular, Ge QDs may offer many advantages over alternative material systems because of their compatibility with the current Si complementary metal–oxide–semiconductor (CMOS) integrated circuit technology and their stronger quantum confinement effects due to a larger exciton Bohr radius. As a consequence, the electronic structure of Ge QDs can be more easily modified than, for example, Si QDs.

Furthermore, Ge QDs are intriguing from the perspective of thermoelectric conversion. This is because of a lower bulk thermal conductivity and a higher electrical conductivity of Ge in comparison with Si. Of importance is also the fact that Ge QDs exhibit a high-temperature stability over the commonly employed Te-based materials. Thermoelectrics represents direct energy conversion between thermal and electrical energy, which is an all solid state, environmentally benign technology. Currently thermoelectric energy conversion suffers from low efficiency, which is only about one third of other widely used energy conversion technologies. Quantum dots are one promising class of materials that can enhance the thermoelectric energy conversion efficiency to be comparable to other energy conversion technologies, which can revolutionize the energy conversion industry.

Ge QD systems are also of importance for photovoltaic applications. This technology allows direct conversion of light into electricity.

It is well-established that Ge dots grown in a dielectric material ( $\text{SiO}_2$  or  $\text{Si}_3\text{N}_4$ ) can migrate through this layer and may become embedded into the Si substrate, thus producing a contact area between the Ge QDs and Si substrate. Because of the large lattice mismatch between Ge and Si, the buried QDs generate strains near the Ge/Si interface. This in turn leads to an increasing carrier scattering at the Si substrate/dielectric roughness and carrier capturing into Ge QDs, which consequently affect the thermoelectric and photovoltaic characteristics. This research field is not yet well understood and would be given particular attention in the proposed research. Another topic of interest is the dot chains embedded in a dielectric material and having no contact with the Si substrate. It has already been pointed out that they are strained despite the fact that the matrix material is amorphous (e.g.,  $\text{SiO}_2$ ). Such materials have been found to decrease the thermal conductivity, being very promising for thermoelectric applications. However, much work has yet to be done, and is planned to be performed in the proposed research.

Finally, we will be studying the Seebeck coefficient and photoelectric transients behaviours in the structures subjected to a sonochemical cleaning step. It was previously demonstrated that the technique is capable of effectively modifying the elastic strains in the subsurface region. Therefore, we anticipate the sonochemical treatment of the sample surface would affect the photo- and thermoelectric energy conversion performance of the nanostructures explored in this work.

Photovoltaic and thermoelectric research are referred to the field of study relating to this technology with a main focus on decreasing the nation's reliance on fossil-fuel generated electricity by lowering the cost of delivered electricity and improving the efficiency of reversible energy conversion modules and systems. These are also of the great importance for environmental protection and the nation's ecology.

Therefore, to pave new avenues for use of Ge-QD photovoltaics and thermoelectric devices, it is necessary to gain insights into the strain-dependent thermo- and photo-electric properties of Ge QDs embedded in various substrate matrices.

It is expected that the project participants will take part in the Horizon 2020 Program under the FET Open Call (the consortium currently includes 10 participants from 7 countries). This proposal aims at the development of high thermoelectric figure-of-merit nanomaterials and is scheduled for the Call with the deadline in January 2017. In the Horizon 2020 proposal, 3 participants are industrial partners, which is also indicative of applied relevance of the current proposal.

Reagents: distilled water, ethanol, tetraethoxysilane. These chemicals will be used for cleaning the surfaces of Si and SiGe samples (distilled water, ethanol) and standard surface modification during its exposing to tetraethoxysilane environment in the ultrasonic bath.



## **5. Очікувані результати (до 1 сторінки) / Results expected to be achieved (up to 1 page)**

Заплановані дослідження в рамках пропонованого проекту ґрунтуватимуться на набутому досвіді його учасників експериментального та теоретичного досліджень напівпровідникових наноструктур. В процесі виконання проекту очікуються такі наукові результати:

1. кінетичні та спектральні залежності фотое.р.с., а також поверхневі розподіли величини сигналу та релаксації фотое.р.с.;
2. результати вимірювання коефіцієнту Зеебека в діапазоні температур 15–300 K у досліджуваних наноструктурах на різних стадіях сонохімічної обробки поверхні;
3. результати теоретичного моделювання пружних деформацій методом FEM та коефіцієнту теплопровідності методом молекулярної динаміки;
4. практичні рекомендації із покращення робочих параметрів фото- та термовольтаїчних пристроїв із кремній-германієвими наноструктурами шляхом модифікації пружних деформацій у них.

Результати спільної роботи сприятимуть розробці оптимальних умов для комерціалізації результатів наукових досліджень ефектів деформації в кремній-германієвих структурах. Отримані результати не тільки підвищать наше розуміння опосередкованих деформацією ефектів, але й дозволять розробити засоби для покращення ефективності термо- і фотоелектричних пристроїв. Тим самим передбачається, що використання результатів проекту матиме суттєвий вплив на технологічно важливі області, пов'язані із розробкою поновлюваних джерел енергії.

В рамках запланованих досліджень передбачається публікація не менше двох статей у міжнародних і вітчизняних фахових журналах на кожен рік виконання проекту. Планується зробити доповіді за результатами роботи на міжнародних і вітчизняних наукових конференціях.

Research work, which is planned in the proposed project, will be based on the experience acquired by the participants during their experimental and theoretical investigations of semiconductor nanostructures. In the course of the project the following scientific results are expected to be obtained:

1. decays and spectral dependences of the surface photovoltage (SPV), surface distribution of the magnitude of the SPV signal and SPV relaxation;
2. Seebeck coefficient measurements in the temperature range from 15 to 300 K in the investigated nanostructures at various stages of the sonochemical treatments of the sample surface;
3. results of the theoretical modelling of elastic strains by FEM and thermal conductivity coefficient by molecular dynamics simulations;
4. practical recommendations of improving the operating parameters of epy photo- and thermoelectric elements with silicon-germanium nanostructures by modifying their elastic strains.

The joint work aims at developing the optimum conditions for commercialisation of the strain-mediated effects in silicon-germanium structures and has a clear technological relevance. The transfer of knowledge of this type will not only enhance our understanding of accompanying

effects but also develop means to improve the performance of thermoelectric and photovoltaic devices. This way, the effective use of the project results may have a profound impact on areas of technological relevance, e.g. on the renewable energy field.

It is anticipated that the research results obtained in the project will be widely disseminated by publishing them in international journals (not less than two journal publications every year) and participation in conferences and seminars in thermo- and photo electricity.

## **6. Поетапний план робіт виконання проекту (до 4 сторінок) / Stage plan of works (up to 4 pages)**

### **01.01.2017-30.06.2017**

1. Термоелектричні дослідження германієвих квантових точок у матриці  $\text{Si}_3\text{N}_4$  (Київ). Теоретичне моделювання пружних деформацій методом FEM.
2. Приготування та первинний аналіз (шумові характеристики, провідність на змінному струмі) зразків із шарами Ge/Si (Відень).

### **01.07.2017-31.12.2017**

1. Виміри загасання фотое.р.с., ефектів сонохімічної обробки на фото- та термоелектричні властивості германієвих квантових точок у матриці  $\text{Si}_3\text{N}_4$ . (Київ).
2. Дослідження оптичного поглинання (FTIR), відбиття (видимий та УФ-діапазон), масс-спектральний аналіз зразків із шарами Ge/Si. Вплив сонохімічної обробки на FTIR та масс-спектроскопічні дані (Відень).

### **01.01.2018-30.06.2018**

1. Виміри загасання фотое.р.с., фото- та термоелектричних властивостей германієвих квантових точок у матриці  $\text{SiO}_2$  та зразках із шарами Ge/Si (Київ). Теоретичне моделювання коефіцієнту теплопровідності методом молекулярної динаміки.
2. Первинний аналіз (шумові характеристики, провідність на змінному струмі), виміри електричних характеристик, оптичного поглинання й відбиття зразків із германієвими квантовими точками у діелектричних матрицях (Відень).

### **01.07.2018-31.12.2018**

1. Дослідження ефектів сонохімічної обробки на фото- та термоелектричні властивості германієвих квантових точок у матриці  $\text{SiO}_2$  та зразках із шарами Ge/Si (Київ).
2. Розробка фізичних механізмів фото- та термоелектричної поведінки германієвих квантових точок у матрицях  $\text{SiO}_2$  і  $\text{Si}_3\text{N}_4$  та зразках із шарами Ge/Si. Вироблення рекомендацій щодо оптимізації параметрів структур із Ge КТ для досягнення максимального енергоперетворення (Київ, Відень).

### **01.01.2017-30.06.2017**

1. Thermoelectric measurements of Ge QDs in  $\text{Si}_3\text{N}_4$  matrices (Kyiv). Theoretical modelling of elastic strains by FEM simulations.
2. Initial characterization (photoelectric ac and noise signal analysis) of Ge QDs in  $\text{SiO}_2$  matrices and Ge/Si layered structures (Vienna).

**01.07.2017-31.12.2017**

1. Photovoltage decay measurements, effects of sonochemical cleaning on the photovoltaic and thermoelectric performance of Ge QDs in SiO<sub>2</sub> matrices (Kyiv).
2. Optical absorption (FTIR), reflection (visible and UV range) and mass-spectrometer measurements of the Ge QDs in SiO<sub>2</sub> matrices and Ge/Si layered structures (Vienna).

**01.01.2018-30.06.2018**

1. Thermoelectric and photovoltage decay measurements of Ge QDs in SiO<sub>2</sub> matrices and Ge/Si layered structures (Kyiv). Theoretical modelling of the thermal conductivity coefficient by molecular dynamics simulations.
2. Initial characterization (photoelectric ac and noise signal analysis), optical absorption (FTIR), reflection (visible and UV range) of Ge QDs in Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub> matrices (Vienna).

**01.07.2018-31.12.2018**

1. Effects of sonochemical cleaning on the photovoltaic and thermoelectric performance of the Ge QDs and Ge/Si layered structures (Kyiv).
2. Development of the fundamental understanding of the thermoelectric and photoelectric behaviours of Ge QDs in SiO<sub>2</sub> and Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub> matrices, as well as Ge/Si layered structures and their potentials for photo- and thermoelectric energy conversion. (Kyiv, Vienna).

**7. Обміни в рамках проекту / Visits under the project****Візит – перебування в Україні**

<b>ПІБ, посада</b>	<b>Мета візиту</b>	<b>Рік</b>	<b>Кількість днів</b>
Віктор Шлоссер, професор	Обговорення останніх результатів, отриманих у Відні, проведення спільних досліджень	2017	14
Мануель Серіні, студент	Обмін результатами проведених досліджень, отримання нових навичок проведення експериментальних досліджень за наявними в Києві методиками	2017	10
Анкіт Міттал, аспірант	Обговорення результатів, отриманих при виконанні проекту, проведення спільних досліджень в Києві	2018	10
Віктор Шлоссер, професор	Обговорення необхідних кроків на завершальній стадії виконання проекту, проведення спільних досліджень	2018	10

### Візит – перебування у Республіці Австрія

ПІБ, посада	Мета візиту	Рік	Кількість днів
Коротченков О.О., професор	Планування спільних експериментів, обговорення координаційних заходів та показників рівня виконання проекту	2017	14
Надточій А.Б., с.н.с.	Обговорення результатів, отриманих при виконанні проекту, проведення спільних експериментів за планом досліджень	2017	10
Курилюк В.В., доцент	Обговорення результатів та показників рівня виконання проекту, проведення спільних експериментів за індивідуальним планом досліджень	2017	10
Подольян А.О., доцент	Обговорення результатів та показників рівня виконання проекту, проведення запланованих спільних експериментів	2018	10
Закіров М. І., аспірант	Обговорення результатів, отриманих при виконанні проекту, проведення спільних досліджень у Відні	2018	7
Коротченков О.О., професор	Організація завершальної стадії виконання проекту, обговорення результатів та підготовка завершального звіту	2018	10

### Visits to Ukraine

First and last name, position	Purpose of visit	Year	Days amount
Viktor Schlosser, prof.	Discuss recent results made in Vienna, to do joint experiments	2017	14
Manuel Serini, MSc student	To exchange the most recent data records and to acquire experimental skills	2017	10
Ankit Mittal, PhD student	Discussion of the most recent results with respect to the ongoing progress of the project, to carry out experiments in Kiev	2018	10
Viktor Schlosser, prof.	To identify the most urgent steps in order to finalise the project successfully, to participate in joint experiments	2018	10






### Visits the Republic of Austria

First and last name, position	Purpose of visit	Year	Days amount
Oleg Korotchenkov, Professor	to plan cooperative experiments, to discuss coordinating tasks, to set quality indicators and to manage evaluation strategies	2017	14
Andriy Nadtochiy, Research scientist	to discuss recent results and performance indicators, to do joint experiments according to his role and responsibility	2017	10
Vasyl Kuryliuk, Docent	to discuss recent results and performance indicators, to do joint experiments according to his role and responsibility	2017	10
Artem Podolian, Docent	to discuss recent results and performance indicators, to do joint experiments according to his role and responsibility	2018	10
Zakirov M., post-graduate student	Discussion of the most recent results with respect to the ongoing progress of the project, to carry out experiments in Vienna	2018	7
Oleg Korotchenkov, Professor	to organize finalisation phase, to settle reporting procedures and preparing a final report	2018	10

### 8. Бюджет / Budget

Типи витрат Type of costs	1-й рік 1st year	2-й рік 2nd year
<b>Прямі витрати / Direct costs</b>	42,1 тис.грн.	42,1 тис.грн.
• Витрати на оплату праці, включаючи податки / <b>Personnel costs including taxes</b>	26,5 тис.грн.	26,5 тис.грн.
• Матеріали та реагенти/ <b>Materials and reagents</b>	2,0 тис.грн.	2,0 тис.грн.
• Поїздки / <b>Travels</b>	13,6 тис.грн.	13,6 тис.грн.
• Інші прямі кошти / <b>Other direct costs</b>	0,0 тис.грн.	0,0 тис.грн.
<b>Непрямі витрати (до 30% від витрат на оплату праці) / Indirect costs (up to 30% from personnel costs)</b>	7,9 тис.грн.	7,9 тис.грн.

## 9. Підписи / Signatures

Керівники проекту Project leaders	Україна Ukraine	Республіка Австрія Republic of Austria
<b>1. Ім'я, прізвище</b> First name and last name <b>2. Дата</b> Date <b>3. Підпис</b> Signature	О.О. Коротченков  05.04.2016 р.  	Victor Schlosser  ____ .04.2016 р.  
<b>Установа</b> Institution		
<b>1. Назва установи</b> Name of institution  <b>2. Директор установи</b> Head of institution <b>3. Дата</b> Date <b>4. Підпис</b> Signature	 Київський національний університет імені Тараса Шевченка Проректор з наукової роботи Мартинюк В.С. ____ .04.2016 р.  	Faculty of Physics, University of Vienna  Dean  <b>Robin Golser</b> ____ .04.2016 р.  

## Резюме керівників проекту / The CVs of the project leaders

### **Коротченков Олег Олександрович**

Проф. Коротченков О. О. захистив кандидатську (1986 р.) та докторську (2000 р.) дисертації з фізики твердого тіла в Київському національному університеті імені Тараса Шевченка. З 2000 року на посаді професора кафедри загальної фізики фізичного факультету Київського національного університету імені Тараса Шевченка. Є керівником підрозділу із фізики напівпровідникових гетероструктур та наноматеріалів. Проходив наукові стажування на кафедрі фізики твердого тіла університету м. Лунд (Швеція), фізичному факультеті університету Тохоку (Сендай, Японія), фізичному факультеті Сеульського університету (Південна Корея), інституті матеріалознавства університету м. Валенсія (Іспанія).

#### Наукові інтереси:

- перенос тепла в наноструктурах (ефект Зеебека, теплопровідність).
- дослідження напівпровідників для фотовольтаїчних застосувань методами фотолюмінесценції, комбінаційного розсіювання світла, фотоструму та фотое.р.с. (кінетика загасання, спектри), просторового заряду.
- деформаційні ефекти в наноструктурах.
- наноструктури та гетероструктури: оптичні властивості, ефекти в електричних полях, перенос заряду.
- отримання напівпровідникових наночастинок сонохімічним методом.

### **Віктор Шлоссер**

Д-р Віктор Шлоссер отримав наукову ступінь PhD у 1981 р. в Інституті прикладної фізики Віденського університету під керівництвом проф. К. Зегера. У 1984 р. зарахований до професорсько-викладацького складу цього університету, де й працює зараз. Очолює лабораторію із науковим напрямком “Photovoltaische Solarzellen für terrestrische Energiegewinnung”. Входить до складу “Arbeitskreis Energie” der Österreichischen Physikalischen Gesellschaft.

Основні області наукових досліджень включають: (i) фізика напівпровідників, (ii) високотемпературна надпровідність, (iii) фотовольтаїка, (iv) фізика навколишнього середовища. Нам даний час виконуються такі проекти: “Investigation of the ac impedance of solar cells and modules operated under different conditions” (у співпраці із лабораторією сонячної фізики національного дослідницького інституту астрономії і геофізики, Helwan, Cairo, Egypt), “Mechanical and photo-electrical analysis of multicrystalline Si and SiGe structures” (проект WTZ), “Acoustic crack detection in crystalline silicon wafers” (PVT Austria, Neudorf), “A comparison between mechanical and electrical degradation of photovoltaic devices after forced ageing” (проект WTZ).

Член редакційної колегії International Journal of Energy Engineering, Член of the Advisory board for the Cyprus Research Promotion Foundation (RPF) Framework Programme for RTD, Член of the Advisory board for the Förderprogramm “Grundlagenforschung Energie 2020+” of the German Federal Ministry of Education and Research.

### **Oleg Korotchenkov**

Prof. Oleg Korotchenkov obtained his Candidate of Sc. (1986) and Doctor of Sc. (2000) Degrees in Solid State Physics (Taras Shevchenko National University of Kyiv, Ukraine). Since 2000, he is a Professor at the Department of Physics, Taras Shevchenko National University of Kyiv where he leads the laboratory of physics of Semiconductor Heterostructures and Nanomaterials. He held visiting positions at the Department of Solid State Physics, Lund University, Lund, Sweden, Department of Physics, Graduate School of Science, Tohoku University, Sendai, Japan, Department of Physics, Seoul National University, Seoul, South Korea, Materials Science Institute, Universitat de València, València, Spain.

#### Research interests:

- Heat transport in nanomaterials (Seebeck effect, thermal conductivity).
- Characterization of photovoltaic semiconductors by: photoluminescence, Raman, photocurrent and photovoltage (decays, spectra), space charge techniques.
- Strains in nanostructures.
- Nanostructures and heterostructures: optical properties, electric field effects, charge transport.
- Sonochemical fabrication of semiconductor nanoparticles.

### **Victor Schlosser**

Dr. Victor Schlosser obtained his PhD from the Institute for Applied Physics at the University of Vienna (Prof. K. Seeger) in 1981. In 1984 was promoted to the professorship at the University of Vienna. He is in charge for the laboratory “Photovoltaische Solarzellen für terrestrische Energiegewinnung”. Member of the “Arbeitskreis Energie” der Österreichischen Physikalischen Gesellschaft.

Major areas of scientific research work include: (i) semiconductor physics, (ii) high-temperature superconductivity, (iii) photovoltaics, (iv) environmental physics. Currently the following projects are in progress: “Investigation of the ac impedance of solar cells and modules operated under different conditions” (in cooperation with the Solar Physics Laboratory, National Research Institute of Astronomy and Geophysics, Helwan, Cairo, Egypt), “Mechanical and photo-electrical analysis of multicrystalline Si and SiGe structures” (WTZ project), “Acoustic crack detection in crystalline silicon wafers” (PVT Austria, Neudorf), “A comparison between mechanical and electrical degradation of photovoltaic devices after forced ageing” (WTZ project).

Member of the Editorial board of the International Journal of Energy Engineering, Member of the Advisory board for the Cyprus Research Promotion Foundation (RPF) Framework Programme for RTD, Member of the Advisory board for the Förderprogramm “Grundlagenforschung Energie 2020+” of the German Federal Ministry of Education and Research.