

ΠΕΡΙΛΗΨΗ

Το αντικείμενο της παρούσας Πτυχιακής Διατριβής είναι η διερεύνηση των δομικών ιδιοτήτων και της σταθερότητας νανοδομημένου πυριτίου. Για το σκοπό αυτό δημιουργήθηκαν δομές με τη μέθοδο προσομοίωσης Monte Carlo σε συνδυασμό με εμπειρικά δυναμικά για τον υπολογισμό της ενέργειας. Το σύστημα που μελετήθηκε κυρίως, ήταν η δομή νανοκρυστάλλων πυριτίου εμβυθισμένων σε άμορφη μήτρα υδρογονωμένου πυριτίου (*Si-nc/a-Si:H*).

Αποδείχθηκε ότι με την αύξηση της απόστασης μεταξύ των νανοκρυστάλλων παρατηρείται μείωση της ενέργειας σχηματισμού της ετεροεπιφάνειας, υποδεικνύοντας υψηλότερη σταθερότητα του συστήματος. Σημαντικό ήταν επίσης το αποτέλεσμα που επιβεβαίωσε ότι το σύστημα είναι σταθερό, ακόμα και σε πολύ μικρές αποστάσεις μεταξύ των νανοκρυστάλλων. Επομένως είναι εφικτή η χρήση τέτοιων δομών για εφαρμογές σε ηλιακά συστήματα, όπου οι μικρές αποστάσεις μεταξύ των νανοδομών είναι απαραίτητες για αποτελεσματικό διαχωρισμό και μεταφορά των φορέων που δημιουργούνται με την οπτική απορρόφηση.

ABSTRACT

The subject of the present final year project report is the investigation of structural properties and stability of nanostructured silicon. For this purpose, various structures have been developed and simulated with the statistical method of Monte Carlo in conjunction with empirical potentials for the calculation of energy. The system under study is a nanocomposite made of Si nanocrystals embedded in hydrogenated amorphous silicon (Si-nc/a-Si:H).

It is found that the formation energy of the nanocomposite reduces with increasing distance between the nanocrystals, indicating higher stability of the system. The striking finding of this study is that these nanocomposites are stable at even very close distances between the nanocrystals. Thus, it is possible to use such structures for solar cell applications, where it is desirable to have the nanostructures located at close distances for more efficient extraction, separation and transport of the photogenerated carriers.