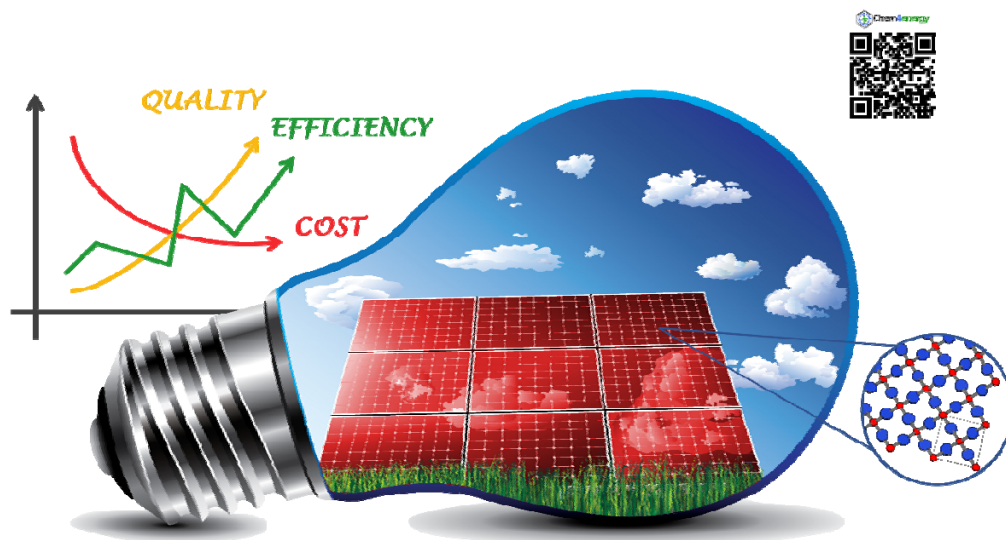


Podružnica Hrvatskog fizikalnog društva u Osijeku i Odjel za fiziku Sveučilišta u Osijeku u utorak 9. siječnja u 12:00 sati u učionici 60 na Odjelu za fiziku organiziraju predavanje

Bakrovi oksidi kao fotovoltaiaci – predikcija materijala pomoću računalnih simulacija?

Aleksandar Živković, Alberto Roldan, Nora H. de Leeuw

Cardiff University, School of Chemistry, Main Building Park Pl, Cardiff CF10 3AT, Wales, UK



Rastuće tržište solarne tehnologije potaknulo je istraživanje poluvodiča p-tipa kao što su bakrov (I) i bakrov (II) oksid (Cu_2O i CuO). Posljedično, javlja se potreba za stjecanjem informacija o elektronskim i optičkim svojstvima takvih materijala [1]. Računale simulacije pritom pružaju jedinstvenu mogućnost ispitivanja velikog broja materijala bez potrebe za prethodnim sintetiziranjem. Cu_2O i CuO obećavajući su materijali zbog svojeg povoljnog razmaka između elektronskih vrpci, učestalosti i niske cijene rudarenja [2]. Naš projekt koristi teoriju funkcionala gustoće kako bismo ispitali utjecaj dopiranja na elektronska i optička svojstva bakrovih oksida.

[1] M. Heinemann, B. Eifert, and C. Heiliger, “Band structure and phase stability of the copper oxides Cu_2O , CuO , and Cu_4O_3 ,” *Phys. Rev. B - Condens. Matter Mater. Phys.*, vol. 87, no. 11, pp. 3–7, 2013.

[2] Y. Peng, Z. Zhang, T. Viet Pham, Y. Zhao, P. Wu, and J. Wang, “Density functional theory analysis of dopants in cupric oxide,” *J. Appl. Phys.*, vol. 111, no. 10, pp. 1–6, 2012.