

**KEEMIA- JA MATERJALITEHNOOGIA TEADUSKONNA MATERJALITEADUSE
INSTITUUDI
TEADUS- JA ARENDUSTEGEVUSE AASTAARUANNE 2010**

Materjaliteaduse instituut (MTeadI) loodi 2002. aastal (Rektori kk. Nr. 69, 21.05.2002) materjalitehnika instituudi pooljuhtmaterjalide tehnoloogia õppetooli, alus- ja rakenduskeemia instituudi füüsikalise keemia õppetooli ja TTÜ Keemia Instituudi termodünaamika uurimisgrupi baasil. MTeadI akadeemilisse struktuuri kuulub 2 õppetooli (ÕT):

1. Instituudi struktuur

Materjaliteaduse instituut, Department of Materials Science, Enn Mellikov

- Füüsikalise keemia õppetool, Chair of Physical Chemistry, Andres Öpik
- Pooljuhtmaterjalide tehnoloogia õppetool, Chair of Semiconductor Materials Technology, Enn Mellikov

2. Instituudi T&A iseloomustus

2.1 Õppetoolide või muude alamstruktuuriüksuste T&A kirjeldus ja tähtsamad tulemused

Füüsikalise keemia õppetool

1. Zhang, X.; Sun, G.; Hovestadt, M.; Syritski, V.; Esser, N.; Volkmer, R.; Janietz, S.; Rappich, J.; Hinrichs, K. (2010). A new strategy for the preparation of maleimide-functionalised gold surfaces. *Electrochemistry Communications*, 12(10), 1403 - 1406.
2. Lott, K.; Shinkarenko, S.; Türn, L.; Nirk, T.; Öpik, A.; Kallavus, U.; Gorokhova, E.; Grebennik, A.; Vishnjakov, A (2010). High temperature defect equilibrium in ZnS:Cu single crystals. *Physica Status Solidi B-Basic Solid State Physics*, 247(7), 1662 – 1665
3. Lautner, G.; Kaev, J.; Reut, J.; Öpik, A.; Rappich, J.; Syritski, V.; Gyures?nyi, R. E. (2010). Selective Artificial Receptors Based on Micropatterned Surface-Imprinted Polymers for Label-Free Detection of Proteins by SPR Imaging. *Advanced Functional Materials*, xx - xx.
4. Tverjanovich, A.; Bereznev, S.; Gertsin, A.; Muradova, G.; Shoka, A.; Kim, D.; Kois, J.; Öpik, A.; Tveryanovich, Yu. (2010). Synthesis of CuInSe₂ Nanopowder in Polyethylene Glycol. *Material Science and Applied Chemistry // Materiālzinātne un lietišķā ēīmija*, 21(1), 79 - 83.
5. Laes, K.; Bereznev, S.; Land, R.; Tverjanovich, A.; Volobujeva, O.; Traksmaa, R.; Raadik, T.; Öpik, A. (2010). The impedance spectroscopy of CuIn₃Se₅ photoabsorber films prepared by high vacuum evaporation technique. *Energy Procedia*, 2(1), 119 - 131

Pooljuhtmaterjalide tehnoloogia õppetool

1. Tomson, T. (2010). Bi-positional solar collectors, performing in a row. *Renewable Energy*, 35(3), 721 - 726.
2. Katerski, A.; Danilson, M.; Mere, A.; Krunks, M. (2010). Effect of the growth temperature on chemical composition of spray-deposited CuInS₂ thin films. *Energy Procedia*, 2(1), 103 - 107.

3. Krunks, M.; Kärber, E.; Katerski, A.; Otto, K.; Oja Acik, I.; Dedova, T.; Mere, A. (2010). Extremely thin absorber layer solar cells on Zinc Oxide nanorods by chemical spray. *Solar Energy Materials and Solar Cells*, 94(7), 1191 - 1195 .
4. Timmo, K; Altosaar, M; Raudoja, J; Muska, K; Kauk, M; Pilvet, M; Varema, T; Danilson, M; Volobujeva, O; Mellikov, E (2010). Sulfur-containing Cu₂ZnSnSe₄ monograins powders for solar cells. *Solar Energy Materials and Solar Cells*, 94(11), 1889 - 1892.
5. Krustok, J.; Josepson, R.; Danilson, M.; Meissner, D. (2010). Temperature dependence of Cu₂ZnSn(SexS_{1-x})₄ monograins solar cells. *Solar Energy*, 84(3), 379 - 383.
6. Volobujeva, O.; Mellikov, E.; Bereznev, S.; Raudoja, J.; Öpik, A; Raadik, T. (2010). Cu₂ZnSnSe₄ thin films produced by selenization of Cu-Zn-Sn containing precursor films. *Materials challenges in Alternative and Renewable Energy*, Wiley, 2010, 257-262

Instituudi erinevate teaduslaborite vahelise eduka koostöö tulemusena saavutas instituut aruandeaastal suurt edu teadus- ja arendustöös :

1. Jätkus edukas teadustöö Instituudi teaduslaborite baasil moodustatud TTÜ **Päikeseeenergeetika Materjalide ja Seadiste Teaduse Tippkeskuses**
2. Jätkus edukas teadustöö erinevates Euroopa Liidu koostöövõrgu teadusprojektides ja põhjamaade päikeseeenergeetika tippkeskuses, kus instituut on üheks koostöö partneriks.
3. Instituut oli edukas EV-i energiatehnoloogia programmi konkursil
4. Instituut esitas taotluse Euroopa regionaalse materjalide aluse tippkeskuse moodustamiseks instituudi teaduslaborite baasil
5. Instituudi teadlased olid edukad ETF grantikonkursidel. Uue grantifinantseerimise järgmiseks 4-ks aastaks said M. Altosaar, Julia Kois, Sergei Bereznev
6. Jätkus PV materjalide keemia-, füüsika- ja tehnoloogiaalaste uuringute materiaalse baasi väljaarendamine instituudis.
7. Mitmed instituudi teadlased said erinevat tüüpi toetusi täiendõppeks ja teadustööks erinevatest Euroopa teadusasutustest, osavõttudeks teaduskonverentsidest ja suvekoolidest.
8. Alustati koostööd mitmete firmadega EV-s päikeseeenergeetika praktilise kasutamise valdkonnas
9. Jätkus koostöö instituudis välja töötatud intellektuaalse omandi juurutamiseks loodud TTÜ spin-off firmaga Crystalsol OÜ
10. Koostöös Uppsala Ülikooliga korraldati esimene maailma antud valdkonna teadlaste nõupidamine CZTS ühendite temaatikas Uppsalas

Parim fundamentaalne uuring

CZTS tüüpi materjalide fotoluminestentsi alased uuringud

Parim rakendusuuring

In₂S₃ kilede moodustumise kemismi väljaselgitamine pihustuspürolüüsi protsessis, indiumikompleksi- ühendi termilise lagunemise reaktsioonid.

Parim arendustöö

Uut tüüpi päikesepatareide väljatöötamisega seotud arenduslikud uuringud

Parim artikkel

Selective Artificial Receptors Based on Micropatterned Surface-Imprinted Polymers for Label-Free Detection of Proteins by SPR Imaging, *Advanced Functional Materials* **2010**, DOI: 10.1002

Artiklis on välja pakutud uus metoodika sünteetiliste retseptorite valmistamiseks, mis võimaldab märgistamiseta (label-free) sihtmolekulide detekteerimist kõrge tundlikkusega ja selektiivsusega. /adfm.201001753

<u>Instituudi teadus- ja arendustegevuse teemade ja projektide arvandmed</u>		
Haridus- ja Teadusministeerium:		
sihtfinantseeritavad teemad		3
baasfinantseerimise toetusfondist rahastatud projektid (sh TTÜ tippkeskused)		3
riiklikud programmid		
teiste ministeeriumide poolt rahastatavad riiklikud programmid		
uurija-professori rahastamine		
SA Eesti Teadusfond:		
grandid		11
ühisgrandid välisriigiga		
järeldoktorite grandid (SA ETF ja Mobilitas)		1
tippteadlase grandid (Mobilitas)		
Ettevõtluse Arendamise Sihtasutus:		
eeluuringud		
arendustoetused		1
SA Archimedeseaga sõlmitud lepingud:		
Infrastruktuur (nn „mini-infra“, „asutuse infra“)		4
Eesti tippkeskused		
muud T&A lepingud		
SA Keskkonnainvesteeringute Keskusega sõlmitud lepingud		
siseriiklikud lepingud		
EL Raamprogrammi projektid		1
välisriiklikud lepingud		1

2.2 Instituudi töötajate poolt avaldatud sihtfinantseeritava teadusteema taotlemisel arvestatavad eelretsenseeritavad teaduspülikatsioonid (ETIS klassifikaatori alusel 1.1, 1.2, 1.3, 2.1, 2.2, 3.1, 3.2, 3.3, 4.1 ja 5.1)

1.1

Zhang, X.; Sun, G.; Hovestadt, M.; Syritski, V.; Esser, N.; Volkmer, R.; Janietz, S.; Rappich, J.; Hinrichs, K. (2010). A new strategy for the preparation of maleimide-functionalised gold surfaces. *Electrochemistry Communications*, 12(10), 1403 - 1406.

Tomson, T. (2010). Bi-positional solar collectors, performing in a row. *Renewable Energy*, 35(3), 721 - 726.

Katerski, A.; Danilson, M.; Mere, A.; Krunks, M. (2010). Effect of the growth temperature on chemical composition of spray-deposited CuInS₂ thin films. *Energy Procedia*, 2(1), 103 - 107.

Krunks, M.; Kärber, E.; Katerski, A.; Otto, K.; Oja Acik, I.; Dedova, T.; Mere, A. (2010). Extremely thin absorber layer solar cells on Zinc Oxide nanorods by chemical spray. *Solar Energy Materials and Solar Cells*, 94(7), 1191 - 1195 .

Tomson, T. (2010). Fast dynamic processes of solar radiation . *Solar Energy*, 84(2), 318 - 323.

Lott, K.; Shinkarenko, S.; Tüür, L.; Nirik, T.; Öpik, A.; Kallavus, U.; Gorokhova, E.; Grebennik, A.; Vishnjakov, A (2010). High temperature defect equilibrium in ZnS:Cu single crystals. *Physica Status Solidi B-Basic Solid State Physics*, 247(7), 1662 - 1665.

Binkauskiene, E.; Lugauskas, A.; Krunks, M.; Oja Acik, I.; Jasulaitiene, V.; Saduikis, G. (2010). Interaction of Chrysosporium merdarium with titanium oxide surface . *Synthetic Metals*, 160(9-10), 906 - 910.

Kropman, D.; Mellikov, E.; Öpik, A.; Lott, K.; Kärner, T.; Heinmaa, I.; Laas, T.; Medvid, A.; Skroupa, W.; Prucnal, S.; Rebohle, L.; Zvyagin, S.; Cizmar, E.; Ozerov, M.; Woznitsa, J. (2010). Interaction of point defects with impurities in the Si-SiO₂ system and its influence on the properties of the interface. *Thin Solid Films*, 518, 2374 - 2376.

Klimova, I.; Kaljuvee, T.; Tüür, L.; Bender, V.; Trikkel, A.; Kuusik, R. (2010). Interactions of ammonium nitrate with different additives:thermodynamic analysis. *Molecular Simulation*, 1 - 8. [ilmumas]

Krustok, J.; Josepson, R.; Raadik, T.; Danilson, M. (2010). Potential fluctuations in Cu₂ZnSnSe₄ solar cells studied by temperature dependence of quantum efficiency curves. *Physica B: Condensed Matter*, 405(15), 3186 - 3189.

Lautner, G.; Kaev, J.; Reut, J.; Öpik, A.; Rappich, J.; Syritski, V.; Gyurcs?nyi, R. E. (2010). Selective Artificial Receptors Based on Micropatterned Surface-Imprinted Polymers for Label-Free Detection of Proteins by SPR Imaging. *Advanced Functional Materials*, xx - xx.

Otto, K.; Katerski, A.; Mere, A.; Volobujeva, O.; Krunks, M. (2010). Spray Pyrolysis Deposition of Indium Sulfide Thin Films. *Thin Solid Films*, xx - xx. [ilmumas]

Timmo, K; Altosaar, M; Raudoja, J; Muska, K; Kauk, M; Pilvet, M; Varema, T; Danilson, M; Volobujeva, O; Mellikov, E (2010). Sulfur-containing Cu₂ZnSnSe₄ monograin powders for solar cells. *Solar Energy Materials and Solar Cells*, 94(11), 1889 - 1892.

Krustok, J.; Josepson, R.; Danilson, M.; Meissner, D. (2010). Temperature dependence of Cu₂ZnSn(SexS1-x)4 monograin solar cells. *Solar Energy*, 84(3), 379 - 383.

Tuvikene, R.; Truuus, K.; Robal, M.; Volobujeva, O.; Mellikov, E.; Pehk, T.; Kollist, A.; Tiiu, K.; Vaher, M. (2010). The extraction, structure, and gelling properties of hybrid galactan from the red alga Furcellaria lumbricalis (Baltic Sea, Estonia). *Journal of Applied Phycology*, 22(1), 51 - 63.

Rudjak, I.; Kaljuvee, T.; Trikkel, A.; Mikli, V. (2010). Thermal behaviour of ammonium nitrate prills coated with limestone and dolomite powder. *Journal of Thermal Analysis and Calorimetry*, 99(3), 749 - 754.

1.2

Mellikov, E.; Altosaar, M.; Raudoja, J.; Timmo, K.; Volobujeva, O.; Kauk, M.; Krustok, J.; Varema, T; Grossberg, M.; Danilson, M.; Muska, K.; Ernits, K.; Lehner, F.; Meissner, D. Cu₂(ZnxSn_{2-x})_{(SySe1-y)4} Monograin Materials For Photovoltaics, Materials challenges in Alternative and Renewable Energy, Wiley, 2010, 137-142

Volobujeva, O.; Mellikov, E.; Bereznev, S.; Raudoja, J.; Öpik, A; Raadik, T. (2010). Cu₂ZnSnSe₄ Thin Films Produced By Selenization of Cu-Zn-Sn Containing Precursor Films. Materials challenges in Alternative and Renewable Energy, Wiley, 2010, 257-262

Tomson, T.; Hansen, M. (2010). Fast Changes of Solar Irradiance. *Estonian Journal of Engineering*, 16(2), 176 - 183.

Mellikov, E. ; Meissner, D. ; Altosaar, M. ; Kauk, M. ; Krustok, J. ; Öpik, A.; Volobujeva, O. ; Iljina, J. ; Timmo, K. ; Klavina, I.; Raudoja, J. ; Grossberg, M. ; Varema, T.; Muska, K.; Ganchev, M. ; Bereznev, S. ; Danilson, M. (2010). Solar Energy Materials Research at Tallinn University of Technology. *Advanced Materials Research*, xx - xx. [ilmumatas]

1.3

Potlog, T.; Spalatu, N.; Ciobanu, V.; Hiie, J.; Mere, A.; Mikli, V.; Valdma, V. (2010). Analysis of fill factor losses in thin film CdS/CdTe photovoltaic devices. *Moldovian Journal of the Physical Sciences*, 9(3 - 4), 363 - 367.

Maticiuc, N.; Potlog, T.; Hiie, J.; Mikli, V.; Poldme, N.; Raadik, T.; Valdma, V.; Mere, A.; Gavrilov, A.; Quinci, F.; Lugh, V.; Sergo, V. (2010). Structural changes in chemically deposited CdS: effect of thermal annealing. *Moldovian Journal of the Physical Sciences*, 9(3 - 4), 275 - 279.

3.1

Kropman, D.; Mellikov, E.; Lott, K.; Kärner, T.; Heinmaa, I.; Laas, T.; Medvid, A.; Skorupa, W.; Prucnal, S.; Zvyagin, S.; Cizmar, E.; Ozerov, M.; Woznitsa, J. (2010). Interaction of point defects with impurities in the Si-SiO₂ system and its influence on the properties of the interface. *Gettering*

and Defect Engineering in Semiconductor Technology XIII, 156-158, 145 - 148.

Timmo, K.; Altosaar, M.; Raudoja, J.; Grossberg, M.; Danilson, M.; Volobujeva, O.; Mellikov, E. (2010). Chemical etching of Cu₂ZnSn(S,Se)4 monograins powder. 35th IEEE Photovoltaic Specialists Conference, Honolulu, HI, June 20-25, 2010 : Conference Proceedings (1982 - 1985).IEEE [ilmumas]

Kaevand, Toomas; Kalda, Jaan; Öpik, Andres; Lille, Ülo (2010). On the percolation behavior of the thin films of the PEDT/PSS complex: a mesoscale simulation study. Iskander, M., Kapila, V., Karim, M. A. (Toim.). Technological Developments in Education and Automation (103 - 108). Dordrecht: Springer

Kaevand, Toomas; Kalda, Jaan; Öpik, Andres; Lille, Ülo (2010). Anisotropic percolating pathways in the thin films of polymeric PEDT/PSS complex and their relation to the electrical conductivity as revealed by the mesoscale simulation. In: Technological Developments in Networking, Education and Automation: International Joint Conferences on Computer, Information, and Systems Sciences, and Engineering (CISSE 09), December 4 - 12, 2009. (Toim.) Elleithy, Khaled; Sobh, Tarek; Iskander, Magued et al.. Dordrecht: Springer, 2010, 263 - 268.

Volobujeva, O.; Mellikov, E.; Bereznev, S.; Raadik, T.; Raudoja, J. (2010). Microscopic and Spectroscopic Study of Formation of Cu₂ZnSnSe4 Thin Films from Binary Containing Precursors. International Microscopy Congress (IMC17) proceedings, september 19-24,2010, Rio, Brazil. Elsevier, 2010, xx - xx.

Tomson, T. (2010). Renewable Electricity Generation in Estonia. In: PQ2010: 7th International Conference 2010 Electric Power Quality and Supply Reliability, Conference Proceedings: 7th International Conference 2010 Electric Power Quality and Supply Reliability, Kuressaare, Estonia, June 16-18, 2010. (Toim.) Sakkos, Tiiu. Tallinn: IEEE, 2010, 87 - 92.

Hiiie, J.; Quinci, F.; Lugh, V.; Maticiuc, N.; Potlog, T.; Mere, A.; Valdna, V.; Gavrilov, A. (2010). Structural changes in CBD CdS: effect of rapid thermal annealing . "Thin film chalcogenide photovoltaic materials" (Symposium M, EMRS 2010 Spring Meeting), 7-11 June 2010. Strasbourg, France. , 2010. [ilmumas]

Kauk, M.; Muska, K.; Altosaar, M.; Danilson, M.; Volobujeva, O.; Varema, T. (2010). ZnO Grown by Chemical Solution Deposition. In: Proceedings of the 35th IEEE Photovoltaics Specialists: 35th Photovoltaic Specialist Conference, Hawaii Convention Center Honolulu, Hawaii, June 20-25, 2010. IEEE, 2010. [ilmumas]

3.2

Kärber, E.; Dedova, T.; Oja Acik, I.; Krunks, M.; Mere, A.; Mikli, V. (2010). Determination of charge carrier density in zinc oxide nanorods prepared by chemical spray pyrolysis. Proceedings of CYSENI 2010. The 7th Annual Conference of Young Scientists on Energy Issues, May 27-28, 2010, Kaunas, Lithuania (340 - 344). Kaunas, Lithuania: Lithuanian Energy Institute

Annert, K.; Vent, M.; Dedova, T.; Kärber, E.; Oja Acik, I.; Volobujeva, O.; Mere, A.; Krunks, M.; Mikli, V. (2010). Impacts of different solvents and substrates on properties of zinc oxide nanorod layers prepared by chemical spray pyrolysis. Proceedings of CYSENI 2010. The 7th Annual Conference of Young Scientists on Energy Issues, May 27-28, 2010, Kaunas, Lithuania (301 -

309).Lithuanian Energy Institute

Vent, M.; Annert, K.; Kärber, E.; Krunks , M. (2010). ZnO thin films as transparent conductive oxides by chemical spray pyrolysis. Proceedings of CYSENI 2010. The 7th Annual Conference of Young Scientists on Energy Issues, May 27-28, 2010, Kaunas, Lithuania (399 - 407).Lithuanian Energy Institute

2.3 Instituudis kaitstud doktoriväitekirjade loetelu

Maarja Grossberg, Materjaliteaduse instituut

Teema: *Optical Properties of Multinary Semiconductor Compounds for Photovoltaic Applications*
(Päikesepatareides kasutatavate mitmikpooljuhtühendite optilised omadused)

Juhendaja: vanemteadur Jüri Krustok

Kaitses: 26.11.2010

Omistatud kraad: filosoofiadoktor (keemia- ja materjalitehnoloogia)

Kristjan Laes, Materjaliteaduse instituut

Teema: *The Impedance Spectroscopy of Hybrid Structures Based on CuIn3Se5 Photoabsorber*
(CuIn3Se5 fotoabsorberil põhinevate hübriidsete struktuuride uurimine impedantsispektroskoopia
meetodil)

Juhendaja: vanemteadur Sergei Bereznev

Kaasjuhendaja: prof Andres Öpik

Kaitses: 19.03.2010

Omistatud kraad: filosoofiadoktor (keemia- ja materjalitehnoloogia)

2.4 Instituudis järeldoktorina T&A-s osalenud isikute loetelu

JD98, ETF 2008, Ganchev Maxim, „Uued odavad materjalid ja tehnoloogiad päikeseenergeetikale”

2.6 Instituudis loodud tööstusomandi loetelu

Materjaliteaduse instituudi juhtivteaduri Malle Krunks'i uurimisgrupi poolt loodud leiutistele õiguskaitse taotlemiseks esitati neli patenditaotlust, sh üks USA, üks Hiina, üks India ja üks Euroopa patenditaotlus. Kahele leiutisele anti välja patent, üks Hiina ja üks [Eesti](#) patent.

Esitatud patenditaotlused:

1. US2010186805A1 (US12/668443)

Photovoltaic Cell based on ZnO nanorods

Taotlus esitatud: 11.01.2010

Omanik: TTÜ

Autorid: Malle Krunks, Atanas Katerski, Tatjana Dedova, Arvo Mere, Ilona Oja Acik

2. CN101861654A

Photovoltaic Cell based on ZnO nanorods

Taotlus esitatud: 22.02.2010

Omanik: TTÜ

Autorid: Malle Krunks, Atanas Katerski, Tatjana Dedova, Arvo Mere, Ilona Oja Acik

3. IN 500/KOLNP/2010

Photovoltaic Cell based on ZnO nanorods

Taotlus esitatud: 08.02.2010

Omanik: TTÜ

Autorid: Malle Krunks, Atanas Katerski, Tatjana Dedova, Arvo Mere, Ilona Oja Acik

4. EP2174352 (EP08773333.3)

Photovoltaic Cell based on ZnO nanorods

Taotlus esitatud: 01.02.2010

Omanik: TTÜ

Autorid: Malle Krunks, Atanas Katerski, Tatjana Dedova, Arvo Mere, Ilona Oja Acik

Väljaantud patendid:

1. CN101203948B (Hiina patent)

Method of preparing zinc oxide nanorods on a substrate by chemical pyrolysis

Patent välja antud: 16.06.2010

Omanik: TTÜ

Autorid: Malle Krunks, Ilona Oja Acik, Tatjana Dedova

2. EE05373B1 (Eesti patent)

CuInS₂ absorberkihiga päikeseelemendi valmistamise meetod

Patent välja antud: 15.12.2010

Omanik: TTÜ

Autorid: Malle Krunks, Arvo Mere, Olga Kijatkina

3. Instituudi infrastruktuuri uuendamise loetelu

Potentsioaat/ galvanostaat,	2 458,00 eur
Novascan UV/Osooni süsteem,	3 341,93 eur
Tõmbekapp HPL-1200,	2 661,92 eur
Heliostaat, 2	508,00 eur
Püranomeeter CMP 11,	62 259,21 eur
Takistuste täppisanalüsaator,	34 098,00 eur
Kompressor SLD 4,5 -	6 384,77 eur
Ge-detektor ,	2 587,56 eur
Krüostaadi kompressor,	3 130,00 eur
Optiline mikroskoop Axio Image	34 483,53 eur
Täppisspektromeeter impedantsi,	13 415,06 eur
Tsentrifuug MIKRO 220R,	3 017,91 eur
Optiline mikroskoop ViewMet,	6 202,63 eur
M6 Pump with controller	2 145,31 eur
Novascan 4"UV Osooni puhastaja,	3 163,09 eur
Osakeste suuruse analüsaator,	32 720,97 eur