

Re: Posudek školitele dizertační práce Mgr. Martina Hladíka s názvem „Nanostructures for solar cells: controlling the surface electronic properties by monolayers of carborane molecules“

Mgr. Martin Hladík zahájil PhD studium v roce 2015 se zaměřením na teoretické studium dopování křemíku pomocí adsorbovaných molekul karboranů. Toto téma spojovalo několik významných směrů výzkumu v prostředí ČR, a to:

- 1) dlouholetou tradici bórové chemie rozvíjené v Řeži u Prahy,
- 2) výzkum vlivu karboranových monovrstev na kovových površích pomocí měření výstupní práce metodami hrotové mikroskopie
- 3) teoretická studia povrchů pomocí teorie funkcionálu hustoty (DFT) rozvíjená zejména v nynějším oddělení povrchů a molekulárních struktur.

Motivací pro výzkum karboranových monovrstev na povrchu křemíku byl i aplikační potenciál v oboru fotovoltaiky, kde v posledních letech dominují články založené na monokrystalickém křemíku s pasivovanými selektivními kontakty (tj. články, ve kterých již chybí klasický pn přechod a rozdělení fotogenerovaných nosičů je dosaženo úpravou povrchu křemíkové desky nanosením nanometry tenkých vrstev selektivně přijímajících díry nebo elektrony). Tyto články nyní reprezentují nejvyšší dosažené účinnosti a současně jsou považovány za cíl inovací ve fotovoltaickém průmyslu. Obdobnou roli selektivních kontaktů by mohly sehrát monovrstvy molekul s výrazným dipólovým momentem, které ovlivní potenciální energii elektronů na a pod povrchem křemíku.

Nicméně, současně bylo zřejmé, že téma je velmi náročné, protože pro karboranové monovrstvy na křemíku prakticky neexistují ani experimentální, ani teoretické práce (na rozdíl od karboranových monovrstev na kovech).

Martin Hladík byl ochoten přijmout výzvu otevřít teoretický výzkum v tomto směru. Jeho práce byla možná jen díky spolupráci s Dr. Héctorem Vázquezem jako druhým školitelem, který ho uvedl do DFT metod. Současně ve spolupráci s Ústavem anorganické chemie a s firmou Katchem byly testovány cesty, jak deponovat karboranové monovrstvy na povrchy křemíku, což se ukázalo jako velmi obtížné (z těchto studií a z analogie s kovovými povrchy také vzešla volba thiolových vazebních skupin).

Během studia M. Hladík osvědčil schopnost cíleného samostatného a systematického výzkumu, který je v práci jasně a logicky shrnut. Součástí práce jsou ověřovací výpočty elektronických stavů karboranových pokrytí na kovovém povrchu (zlata), které jsou ve shodě s již dříve publikovanými pracemi. Naopak výsledky pro karboranové monovrstvy na křemíku nemají v publikované literatuře obdoby a lze tak oprávněně konstatovat, že Mgr. Hladík otevřel nový směr výzkumu.

Martin Hladík publikoval celkem 2 práce v impaktovaných časopisech (u obou z nich jako první autor) a v přípravě je další publikace. Výsledky prezentoval i formou vystoupení na konferencích (celkem 7x, z toho 4x v zahraničí), lze tedy konstatovat, že odborná veřejnost je s tímto výzkumem již seznámena.

Význam výsledků obsažených v dizertaci by mohl být znám poté, co budou výsledky konfrontovány s experimenty či přímo s použitím při prototypování přímo ve fotovoltaických článcích. Zda se to stane s karborany není jisté, může se to ale stát i s jinými molekulami nesoucími dipólový moment. Pro případ karboranů práce nabízí vhledy do návrhu možných cest, jak monovrstvy karboranů na křemík nanášet, a jaké elektronické efekty lze očekávat. Nabízí se i pokračování práce, a to ve směru rozhraní s dalším vodivým materiálem (pro kontakty) nebo s polovodičem (pro tandemové články), to by však rozsahem mohla být další dizertace.

Závěrem konstatuji, že Mgr. Martin Hladík během svého doktorského studia osvědčil schopnost samostatného a nezávislého výzkumu. Osvědčil se jako vytrvalý a soustředěný badatel a jsem tak přesvědčen, že splnil požadavky kladené na dizertaci.

Doporučuji tedy předloženou dizertační práci Mgr. Martina Hladíka k obhajobě.

V Praze dne 2.8.2023



RNDr. Antonín Fejfar, CSc.