

Abstrakt: Dopované vrstvy krystalického křemíku jsou v současnosti hlavním hnacím motorem konvenčních fotovoltaických zařízení. Přímé zavádění atomů skupiny III a V do křemíkové matrice je stále hlavním proudem hromadné výroby dopovaného křemíku. V této práci se zabýváme neinvazivními způsoby dopování křemíkových destiček prostřednictvím adsorpce molekul s velkým vnitřním dipólovým momentem na povrchu polovodiče. Tyto molekuly, konkrétně karborandithioly, vytvářejí samouspořádanou monovrstvu doprovázenou tvorbou povrchového dipólu. Za účelem stabilizace dipólové vrstvy může mezi adsorbátem a substrátem dojít k přenosu náboje na rozhraní, který pozměňuje hustotu akumulovaných nosičů náboje těsně pod povrchem křemíku. To jsou základní rysy povrchového transferového dopování křemíkového substrátu, kde využíváme molekuly karborandithiolu jako zprostředkovatele adsorbující dipólové vrstvy. Pokud jde o strukturu práce, nejprve testujeme molekuly karborandithiolu na zlatě a poté přejdeme k problematice spojení křemíku s molekulou. Pomocí atomistických simulací založených na teorii funkcionálu hustoty charakterizujeme geometrii a elektronické vlastnosti molekul karborandithiolu na obou těchto substrátech.