

НАСТАВНО-НАУЧНОМ ВЕЋУ

Предмет: Подобност теме и кандидата мр Али Калфа (Ali R. A. Khalf) за израду докторске дисертације

Одлуком Наставно-научног већа Електротехничког факултета бр. 5053/14-1 од 9.6.2020. године, именовани смо за чланове Комисије за оцену подобности теме и кандидата мр Али Калфа (Ali R.A. Khalf) за израду докторске дисертације и научне заснованости теме:

Утицај површинских процеса на струјно-напонску карактеристику органских соларних ћелија

(The impact of surface processes on the current-voltage characteristic of organic solar cells)

На основу материјала приложеног уз Захтев кандидата, Комисија подноси следећи

ИЗВЕШТАЈ

1. Подаци о кандидату

1.1. Биографски подаци

Али Калф (Ali Ramadan Ahmed Khalf) рођен је 26. марта 1966. године у Триполију, Либија. Основну и средњу школу завршио је у Триполију након чега је 1985. године уписао Природно-математички факултет на Универзитету у Триполију у Либији, где је 1990. године стекао титулу дипломираног физичара. Радио је у истраживачко-развојном центру у Триполију (R&D center, Tripoly) као инжењер од 1991. до 1995. године. Затим је, 1995. године уписао магистарске студије на Смеру за оптоелектронику и ласерску технику на Електротехничком факултету Универзитета у Београду, и дипломирао је са просечном оценом 8,4. Магистарску тезу под називом „Design and development of optical gathering system“ под менторством проф. др. Миодрага В. Поповића одбранио је 15. октобра 1997. године. У периоду од 1997. до 2011. године поново је радио у истраживачко-развојном центру у Триполију као истраживач-сарадник за развој оптичког система за контролу дивергенције снопа ласерске диоде као јединице бежичног телекомуникационог линка. У истом периоду радио је хонорарно и као предавач на Факултету за науку Универзитета у Триполију, Одсек за физику, и Високом институту рачунарства у Триполију. Али Калф је 2014. године уписао докторске академске студије на Електротехничком факултету у Београду на модулу Наноелектроника и фотоника. Тренутно је на трећој години студија и положио је све испите са просечном оценом 9,5.

1.2. Сечено научноистраживачко искуство

Кандидат Али Калф је на Електротехничком факултету Универзитета у Београду, Смер за оптоелектронику и ласерску технику, под менторством проф. др. Миодрага В. Поповића, израдио и 15. октобра 1997. године одбранио магистарску тезу под насловом „Design and development of optical gathering system“. Области којима припада магистарска тезе су оптоелектронски системи и ситеми за обраду слике.

Кандидат је 2014. године уписао докторске академске студије на Електротехничком факултету у Београду на модулу Наноелектроника и фотоника. Тренутно је на трећој години студија и положио је све испите са просечном оценом 9,5.

Током студија положио је све планом предвиђене испите и испунио све обавезе, и то:

Рд. Бр.	Назив испита	Оцена	ЕСПБ
1	Модерне фотонске компоненте и системи	8	9
2	Оптичке особине полупроводничких хетероструктура	10	9
3	Нумеричка анализа	10	9
4	Транспортни процеси у наноелектроници и фотоници	8	9
5	Ветроенергетика и соларна енергетика	10	9
6	Нелинеарна оптика	10	9
7	Моделовање хетероструктурних микроелектронских направа	10	9
8	Енглески језик	9	6
9	Електронска структура полупроводника	10	9
10	Математичко моделовање физичко техничких процеса	10	9
	Назив обавезе		
1	Студијски истраживачки рад I		15
2	Студијски истраживачки рад II		15
3	Научно стручни рад		3

Резултати студијског истраживачког рада мр Али Калфа објављени су у два рада у часописима од међународног значаја (са *impract* фактором) и једном раду на међународној конференцији:

Рад у врхунском међународном часопису (M21):

[1] Khalf A., Gojanović J., Ćirović N., Živanović S., Matavulj P.: *The Impact of Surface Processes on the J-V Characteristics of Organic Solar Cells*, IEEE Journal of Photovoltaics, Vol 10 No 2, 2020, pp. 514-521.

Рад у међународном часопису (M23):

[2] Khalf A., Gojanović J., Ćirović N., Živanović S.: *Two different types of S-shaped J-V characteristics in organic solar cells*, Optical and Quantum Electronics, Vol 52, 2020, pp. 121(1-10).

Саопштење на скупу од међународног значаја штампано у изводу (M34):

[3] Khalf A., Gojanović J., Ćirović N., Islam M., Živanović S., Matavulj P.: *Analysis of the Surface Recombination Influence on Organic Solar Cell J-V curve*, OSA Technical Digest (Optical Society of America, 2019), OSA Advanced Photonics Congress (AP), Burlingame, California, United States, 2019, paper JT4A.26.

Кандидат је 22.06.2020. године на Електротехничком факултету у Београду јавно усмено бранио предложену тему докторске дисертације пред комисијом у саставу:

1. др Петар Матавуљ, редовни професор, Електротехнички факултет у Београду
2. др Милица Гвозденовић, редовни професор, Технолошко-металуршки факултет у Београду
3. др Иван Поповић, ванредни професор, Електротехнички факултет у Београду

Комисија је закључила да је кандидат добио оцену **задовољно** и да испуњава услове за рад на предложеној теми докторске дисертације.

1.3. Оцена подобности кандидата за рад на предложеној теми

На основу претходно приказаних резултата кандидата, комисија константује да је мр Али Калф:

- Положио све планом предвиђене испите и испунио све обавезе, чиме је сакупио потребних 120 ЕСПБ бодова,
- Јавно одбранио тему докторске дисертације 22.06.2020. године, пред комисијом формираном од стране Наставно-научног већа Електротехничког факултета у Београду,
- Публиковао 2 рада у часописима од међународног значаја и 1 рад на међународној конференцији који су непосредно везани за истраживања из предложене теме, чиме је приказао квалификације за научни рад и афинитет према теми.

Стога комисија сматра да кандидат мр Али Калф задовољава све услове за рад на предложеној теми.

2. Предмет и циљ истраживања

Извори енергије су једна од најбитнијих тема данашњице. Угаљ, нафта и природни гас, као и нуклеарна енергија, који се данас превасходно користе за производњу електричне енергије имају ограничене ресурсе, а уз то су и значајни извори загађења. Алтернатива овим изворима енергије су обновљиви извори енергије међу којима се соларне ћелије нарочито издвајају. Оне користе Сунце као неисцрпан извор енергије при чему је фотоволтаична конверзија сунчеве светлости у електричну енергију потпуно еколошка. Међутим, масовна употреба соларних панела још увек није остврена зато што се они производе у највећој мери од силицијума и имају скупу технологију производње. Органске соларне ћелије (ОСћ) су јефтине, имају јефтине процесе фабрикације и зато су у последњих 20 година веома честа

тема научних истраживања. Главна препрека на путу комерцијализације ових направа су мала ефикасност и брза деградација.

У последње време показало се да физички процеси на контактима имају велики утицај на струјно-напонску (I-V) криву ОСћ а самим тим и на њену ефикасност. Испоставља се да су спојеви активног материјала и блокирајућег/транспортног слоја као и спојеви са електродама изразито важни за рад направе. Код ОСћ се понекад јавља такозвана S-деформација у I-V карактеристици која доводи до драстичног смањења ефикасности ових направа. Иако непожељна у пракси, ова појава се показала као јако корисна управо за испитивање контактних процеса у ОСћ. Површинска рекомбинација [1-3], постојање инјекционих и екстракционих баријера за већинске носиоце [4-8], или неизбалансираност покретљивости електрона и шупљина [9] означени су као извори S-деформације у I-V кривој. Разматрани су и многи други процеси [10] али издвојено дејство свакога од њих није сагледано и анализирано. Неопходно је познавати појединачан утицај и значај сваког од поменутих процеса да би била могућа даља оптимизација и унапређење перформанси ОСћ. Такође, јасна веза измеђ физичких процеса који су присутни на контактима и селективности контаката није успостављена. Познато је да су селективни контакти неопходан предуслов за правилан рад ОСћ.

Циљ истраживања је да се применом дрифт-дифузионог модела (ДДМ) [11, 12] размотри независан утицај површинске рекомбинације на облик I-V криве ОСћ, а након тога да се сагледа и анализира утицај који на I-V криву имају висине инјекционих баријера за већинске носиоце на електродама. Такође, циљ је утврдити и какав утицај има површинска рекомбинација, а какав висина инјекционих баријера за већинске носиоце на селективност контаката ОСћ.

2.1. Релевантни радови из области истраживања

- [1] Sandberg O. J., Nyman M., Österbacka R.: *Effect of contacts in organic bulk heterojunction solar cells*, Phys. Rev. Appl., Vol 1, No 2, 2014, pp. 024003(1-15).
- [2] Sandberg O. J., Sandén S., Sundqvist A., Smått J. H., Österbacka R.: *Determination of surface recombination velocities at contacts in organic semiconductor devices using injected carrier reservoirs*, Phys. Rev. Lett., Vol 118, No 7, 2017, pp. 076601(1-5).
- [3] Wagenpfahl A., Rauh D., Binder M., Deibel C., Dyakonov V.: *S-shaped current-voltage characteristics of organic solar devices*, Phys. Rev. B., Vol 82, No 11, 2010, pp. 115306 (1-8).
- [4] Tress W., Corvers S., Leo K., Riede M.: *Investigation of driving forces for charge extraction in organic solar cells: Transient photocurrent measurements on solar cells showing S-shaped current-voltage characteristics*, Adv. Energy Mater., Vol 3, 2013, pp. 873-880.
- [5] Tress W., Leo K., Riede M.: *Influence of hole-transport layers and donor materials on open-circuit voltage and shape of I-V curves of organic solar cells*, Adv. Funct. Mater., Vol 21, 2011, pp. 2140-2149.
- [6] Tress W., Inganäs O.: *Simple experimental test to distinguish extraction and injection barriers at the electrodes of organic solar cells with S-shaped current-voltage characteristics*, Solar Energy Materials and Solar Cells, Vol 117, 2013, pp. 599-603.
- [7] Guerrero A., Chambon S., Hirsch L., Garcia-Belmonte G.: *Light-modulated TiO_x interlayer dipole and contact activation in organic solar cell cathodes*, Adv. Funct. Mater., Vol 24, No 39, 2014, pp. 6234-6240.
- [8] Sundqvist A., Sandberg O. J., Nyman M., Jan-Henrik S., Österbacka R.: *Origin of the S-shaped JV curve and the light-soaking issue in inverted organic solar cells*, Adv. Funct. Mater., Vol 6, No 6, 2016, pp. 1502265(1-7).
- [9] Wagenpfahl A., Deibel C., Dyakonov V.: *Organic solar cell efficiencies under the aspect of reduced surface recombination velocities*, IEEE Journal of Selected Topics in Quantum Electronics., Vol 16, No 6, 2010, pp. 1759-1763.

- [10] Gusain A., Faria R. M., Miranda P. B.: *Polymer Solar Cells - Interfacial Processes Related to Performance Issues*, Front. Chem. Vol 7, 2019, pp. 61(1-25).
- [11] Li G. Liu L., Wei F., Xia S., Qian X.: *Recent Progress in Modeling, Simulation and Optimisation of Polymer Solar Cells*, IEEE Journal of Photovoltaics, Vol 2, No 3, 2012, pp. 320-340.
- [12] Jelić Ž., Petrović J. Matavulj P., Melancon J., Sharma A., Zellhofer C., Živanović S.: *Modeling of the polymer solar cell with P3HT:PCBM active layer*, Physica Scripta, Vol T162, 2014, pp. 014035(1-4).

3. Полазне хипотезе

На основу досадашњег научног истраживања усвојене су следеће полазне хипотезе које ће се користити у наставку истраживања:

- Независтан утицај површинске рекомбинације на I-V карактеристику ОСћ могуће је испитати применом ДДМ коришћењем граничних услова који урачунавају искључиво дејство овог процеса на електроодним контактима.
- Након сагледавања утицаја површинске рекомбинације на I-V карактеристику ОСћ могуће је у граничне услове укључити и дејство инјекционих баријера за већинске носиоце на електродама и помоћу ДДМ анализирати њихов утицај на I-V криву ових направа.
- Код соларних ћелија селективни контакти су они који су идеално проводни за већинске носиоце (електроне на катоди и шупљине на аноди), а блокирајући за мањинске носиоце. Селективност контаката ОСћ може бити квантитативно описана помоћу брзина површинске рекомбинације за оба типа носилаца на обе електроде и висина инјекционих баријера за већинске носиоце.

4. Научне методе истраживања

За анализу утицаја површинске рекомбинације и висине инјекционих баријера за већинске носиоце на I-V карактеристику ОСћ биће коришћен ДДМ. Овај модел чини систем једначина, Поасонова једначина и једначине континуитета за електроне и шупљине. При томе, струје електрона и шупљина у активној области ОСћ укључују дрефт и дифузију одговарајућих носилаца наелектрисања. Овакав модел примењује се и код класичних, неорганских направа, с тим што су процеси фотогенерације транспорта и рекомбинације носилаца наелектрисања у органским материјалима у потпуности другачији у односу на класичне полупроводнике. Процес фотогенерације у ДДМ биће моделован применом трансфер матричног оптичког прорачуна расподеле оптичког поља унутар активног слоја ОСћ [11] сматрајући да сваки апсорбовани фотон (са коначном вероватноћом мањом од један) директно и тренутно производи пар слободних носилаца. Покретљивости електрона и шупљина, у опсегу напона поларизације примењених на ОСћ, биће сматране константним [11]. Рекомбинација носилаца ће бити посматрана као бимолекуларан просец Ланжевеновог типа [11]. Два различита облика граничних услова ће бити коришћена, у једном случају биће укључена само површинска рекомбинација, док ће у другом случају уз површинску рекомбинацију бити укључена и термионска емисија (инјекција) носилаца са електрода. За решавање формираног система од три нелинеарне нехомогене диференцијалне једначине биће коришћена метода коначних разлика уз примену Scharfetter-Gummel [11] приступа за дискретизацију и Њутнова метода за решавање добијеног система алгебарских једначина.

Да би свеобухватно био сагледан утицај површинске рекомбинације на I-V криву ОСћ, коришћењем описаног ДДМ (који укључује само утицај површинске рекомбинације кроз граничне услове) биће симулиране I-V криве ОСћ и то уз варијацију брзина површинске рекомбинације за електроне на аноди и катоди (S_n^a, S_n^c), и за шупљине на аноди и катоди (S_p^a, S_p^c) у широком опсегу вредности од 0 до ∞ уз могућност позитивног + или негативног – предзнака у зависности од смера струје одговарајућих носилаца на посматраној електроди. Јасно је да варијација четири параметра ($S_n^a, S_n^c, S_p^a, S_p^c$) у овако широком опсегу и анализа добијених I-V карактеристика веома сложен и тежак задатак. Из тог разлога биће осмишљен SML (Small Medium Large) приступ. На првом месту, у оквиру овог приступа биће претпостављено да је дифузиона компонента струје доминантна за обе врсте носилаца. На тај начин биће извршен избор знака сваке од четири брзине површинске рекомбинације ($S_n^a > 0, S_n^c < 0, S_p^a < 0, S_p^c > 0$). Даље ће бити уведена три опсега за брзине површинске рекомбинације L (Large), M (Medium) и S (Small). Наиме, показано је [2] да се контакти у зависности од вредности брзине површинске рекомбинације понашају на три различита начина. Када је брзина површинске рекомбинације за одговарајуће носиоце на електроди много већа од брзине којом ти носиоци пристижу на электроду тада се она за дате носиоце понаша као потпуно проводна. Са друге стране ако је брзина површинске рекомбинације за посматране носиоце на електроди много мања од брзине њиховог пристизања тада се ова електрода за дате носиоце понаша као блокирајућа. Уколико је брзина површинске рекомбинације упоредива са брзином доспевања носилаца електрода није ни идеално проводна ни идеално блокирајућа. Према томе у склопу SML анализе која ће бити предложена у овој дисертацији биће разматрана три различита опсега за брзину површинске рекомбинације: $L \gg v_d^{n(p)}$, $M \sim v_d^{n(p)}$ и $S \ll v_d^{n(p)}$, где је $v_d^{n(p)}$ средња дифузиона брзина за електроне (шупљине). На тај начин број посматраних комбинација за анализу је са бесконачно великог редукован на $3^4=81$. Након анализе I-V кривих које одражавају утицај површинске рекомбинације у ДДМ ће кроз граничне услове бити укључена и термионска емисија носилаца са аноде и катодe. Варијацијом висине инјекционе баријере за шупљине на аноди Φ_p и за електроне на катоди Φ_n и генерисањем одговарајућих I-V карактеристика биће сагледан и анализиран утицај ових величина на I-V криву ОСћ.

На крају ће бити извршена верификација модела поређењем симулираних I-V карактеристика са одговарајућим експериментално добијеним карактеристикама за ITO/PEDOT:PSS/P3HT:PCBM/Al и ITO/PEDOT:PSS/P3HT:ICBA/Al соларне ћелије.

5. Очекивани научни допринос

Очекивани научни доприноси су:

- Анализа издвојеног утицаја површинске рекомбинације на I-V криву ОСћ у целокупном опсегу брзина површинске рекомбинације (за оба типа носилаца наелектрисања на обе електроде, аноди и катоди).
- Анализа издвојеног утицаја висина инјекционих баријера за већинске носиоце на I-V карактеристику ОСћ.
- Утврђивање вредности брзина површинске рекомбинације за мањинске и већинске носиоце на обе електроде као и висина инјекционих баријера за већинске носиоце које обезбеђују оптималан рад ОСћ.
- Утврђивање у каквој релацији је селективност контаката ОСћ са брзином површинске рекомбинације као и каква је веза између селективности контаката и висина инјекционих баријера за већинске носиоце на њима.
- Валидност предложеног модела биће утврђена поређењем теоријских предвиђања са експериментом.

6. План истраживања и структура рада

Најпре ће бити извршено унапређење постојећег ДДМ [12] модела имплементацијом трансфер матричног оптичког прорачуна који урачунава интерференционе ефекте у активном слоју ОСћ, затим, применом Scharfetter-Gummel нумеричке методе за сигурнију конвергенцију прорачуна, као и увођењем граничних услова који узимају у обзир површинску рекомбинацију и термионску емисију носилаца са електрода.

У следећем кораку планирана је варијација брзина површинске рекомбинације за већинске и мањинске носиоце наелектрисања на обе електроде, аноди и катоди, у широком опсегу вредности од 0 до ∞ уз избор одговарајућег предзнака (+ или -), који проистиче из претпоставке да је дифузиона компонента струје доминантна и за шупљине и за електроне на обе електроде, и симулација I-V кривих. У овом кораку у склопу граничних услова биће претпостављено да је термионска емисија носилаца са електрода једнака нули. Приликом варијације брзина површинске рекомбинације биће коришћен SML приступ. Уследиће анализа добијених резултата и њихова систематизација како би се дефинисали адекватни закључци и на правилан начин сагледао утицај површинске рекомбинације на I-V карактеристику ОСћ.

Након сагледавања издвојеног утицаја површинске рекомбинације на I-V криву ОСћ у граничне услове ДДМ биће укључена и термионска емисија. Даље ће бити вариране висине инјекционих баријера за већинске носиоце на обе електроде и биће симулиране одговарајуће I-V карактеристике. Поново ће уследити анализа и систематизација добијених резултата као и извлачење адекватних закључака.

Последњи корак истраживања треба да буде верификација модела кроз поређење симулираних и експериментално добијених I-V кривих. Помоћу ДДМ ће најпре бити симулиране I-V карактеристике за ИТО/PEDOT:PSS/РЗНТ:PCBM/Al соларну ћелију и упоређене са измереним. За ову ОСћ карактеризацијом је добијена I-V крива стандардног J-облика. Затим ће прорачун I-V кривих бити извршен за ИТО/PEDOT:PSS/РЗНТ:ICBA/Al соларну ћелију за коју је мерењем утврђено да испољава S-деформацију у I-V карактеристици. Симулиране и измерене I-V криве биће упоређене и узрочници S-деформације ће бити размотрени на бази претходно извршене анализе утицаја површинске рекомбинације и висина инјекционих баријера за већинске носиоце на I-V криву ОСћ.

7. Закључак и предлог

На основу свега претходно наведеног, комисија налази да је кандидат Али Калф, магистар електротехнике, задовољио све услове да спроведе истраживање и реализује предвиђене циљеве на предложеној теми „Утицај површинских процеса на струјно-напонску карактеристику органских соларних ћелија“.

Комисија је такође закључила да је област истраживања предложене теме актуелна, уз очекиван значајан научни допринос. Предложена тема припада ужој научној области физичка електроника - оптоелектроника за коју је Електротехнички факултет Универзитета у Београду матичан.

Комисија предлаже Наставно-научном већу Електротехничког факултета Универзитета у Београду да кандидату Али Калфу одобри израду докторске дисертације под насловом „Утицај површинских процеса на струјно-напонску карактеристику органских соларних ћелија“, односно „**The impact of surface processes on the current-voltage characteristic of organic solar cells**“. За ментора израде докторске дисертације предлаже се др Јована Гојановић, доцент на Електротехничком факултету Универзитета у Београду. Докторска дисертација ће бити писана на енглеском језику.

ЧЛАНОВИ КОМИСИЈЕ

Београд, 24.06.2020.год.



др Јована Гојановић, доцент

Универзитет у Београду – Електротехнички факултет



др Петар Матавуљ, редовни професор

Универзитет у Београду – Електротехнички факултет



др Милица Гвозденовић, редовни професор

Универзитет у Београду – Технолошко-металуршки факултет



др Иван Поповић, ванредни професор

Универзитет у Београду – Електротехнички факултет