

## UMWELTnanoTECH

Projektverbund · Umweltverträgliche  
Anwendungen der Nanotechnologie



finanziert durch

Bayerisches Staatsministerium für  
Umwelt und Verbraucherschutz



## Projektverbund Umweltverträgliche Anwendungen der Nanotechnologie

### Next Generation Solar Energy

23 - 26 November 2016

## Umweltverträgliche Hocheffiziente Organische Solarzellen (UOS)

### Prof. Dr. Vladimir Dyakonov

Julius-Maximilians Universität Würzburg

Lehrstuhl für Energieforschung

### Prof. Christoph Brabec

Friedrich-Alexander Universität Erlangen-Nürnberg

Lehrstuhl für Materialien der Elektronik und der

Energietechnologie

- 1) Solarzellen aus umweltfreundlichen (grünen) Photovoltaik (PV)-Tinten
- 2) Bestimmung mikroskopischer Parameter  
→ umweltfreundlich vs. toxisch
- 3) Simulation von thermodynamischen Eigenschaften mittels COSMO-RS
- 4) Wasserbasierte PV-Tinten bestehend aus nanopartikulären organischen Halbleitern

---

# Organische Solarzellen hergestellt aus umweltfreundlichen (grünen) Photovoltaik-Tinten

# Hansen Löslichkeits-Parameter (HSP)

- Hildebrand-Parameter ( $\delta$ ) :

$$\delta = \sqrt{\frac{\Delta E_v}{V_m}}$$

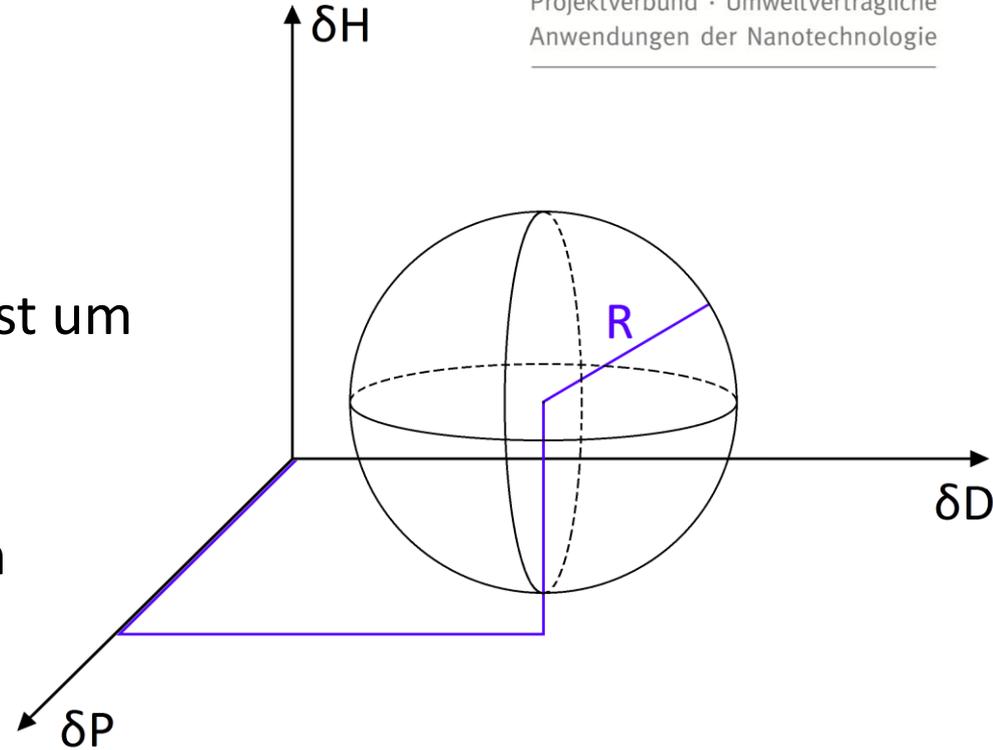
Energie pro Volumen, die nötig ist um intermolekulare Bindungen des Feststoffes zu überwinden

- Aufteilung in die verschiedenen Bindungsarten ergeben die HSP

$$(\delta)^2 = (\delta_D)^2 + (\delta_P)^2 + (\delta_H)^2$$

D: disperse Bindung; P: polare Bindung; H: Wasserstoffbrückenbindung

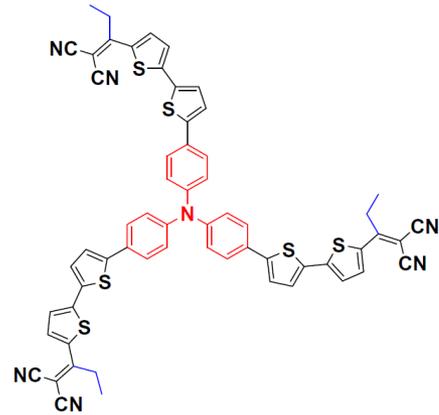
- HSP in 3D: - Löslichkeitskugel mit Radius R
  - Vorauswahl an Lösungsmitteln (LM)
  - Geeignete Lösungsmittel innerhalb der Kugel
  - Je ähnlicher die HSP von Material und LM, desto höher die Löslichkeit



# Binäre Lösungsmittelmischungen

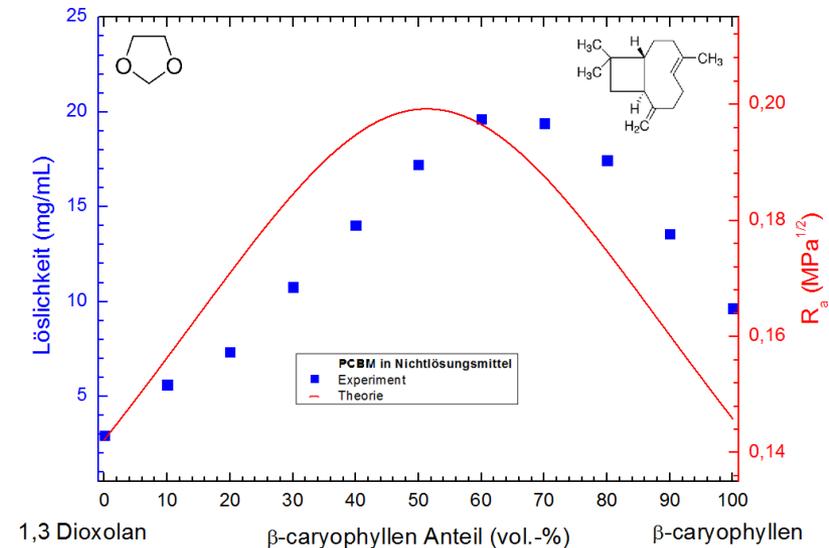
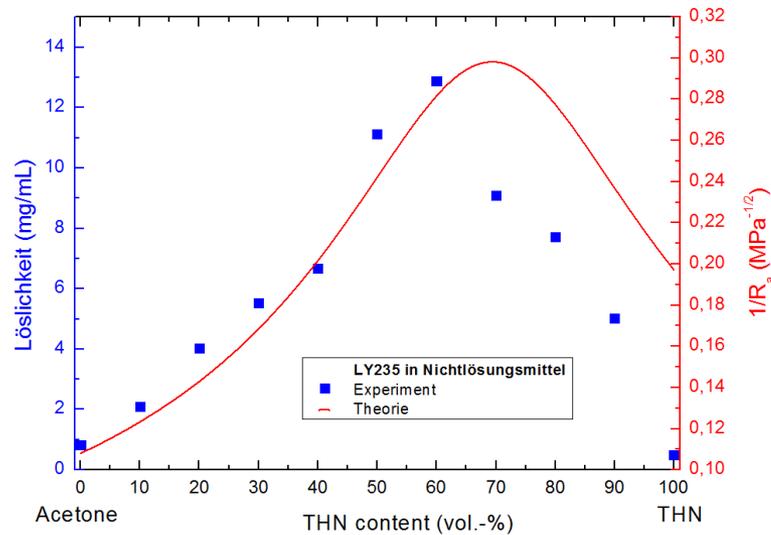
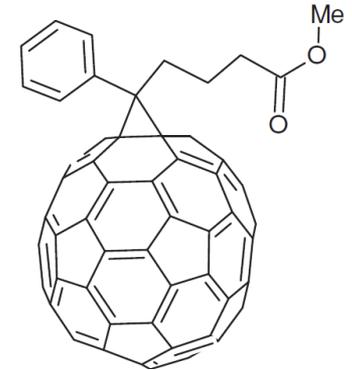
Donator:

LY235

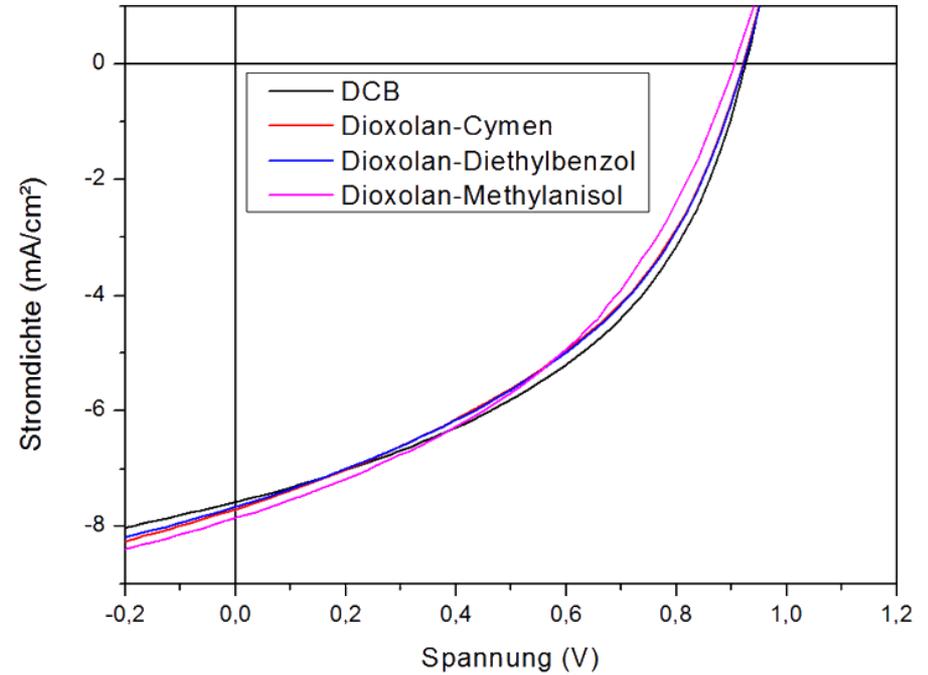
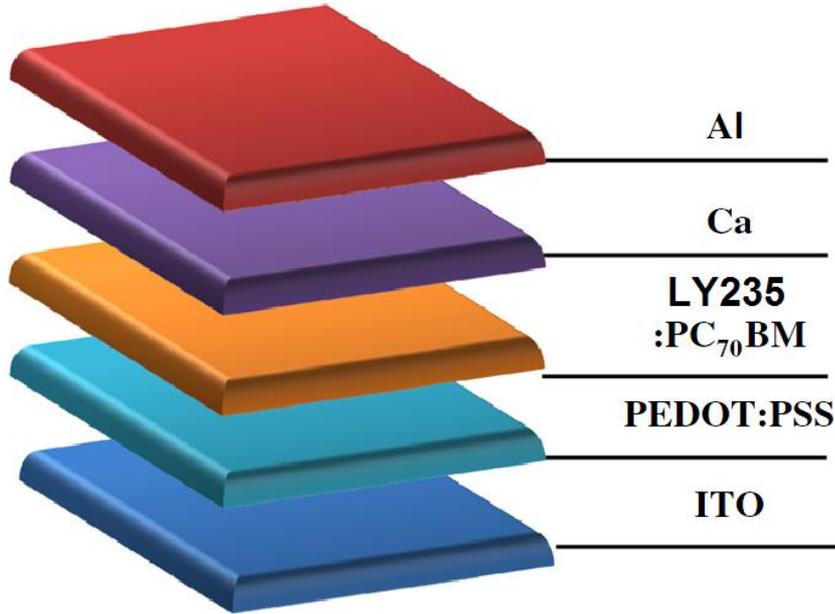


Lösungsmittelmischungen  
=  
Einstellen gewünschter  
Löslichkeit

Akzeptor:  
PCBM



# Solarzellen aus grünen Lösungen



Lösungsmittel(-mischungen)	J <sub>sc</sub> (mA/cm <sup>2</sup> )	PCE (%)	V <sub>oc</sub> (V)	FF (%)
DCB (toxisch)	-7,58	3,15	0,92	44,90
Dioxolan-Cymen (toxisch/grün)	-7,71	2,99	0,92	42,16
Dioxolan-Diethylbenzol (grün)	-7,66	3,01	0,92	42,60
Dioxolan-Methylanisole (grün)	-7,85	2,96	0,90	41,74

**grün vs. toxisch**

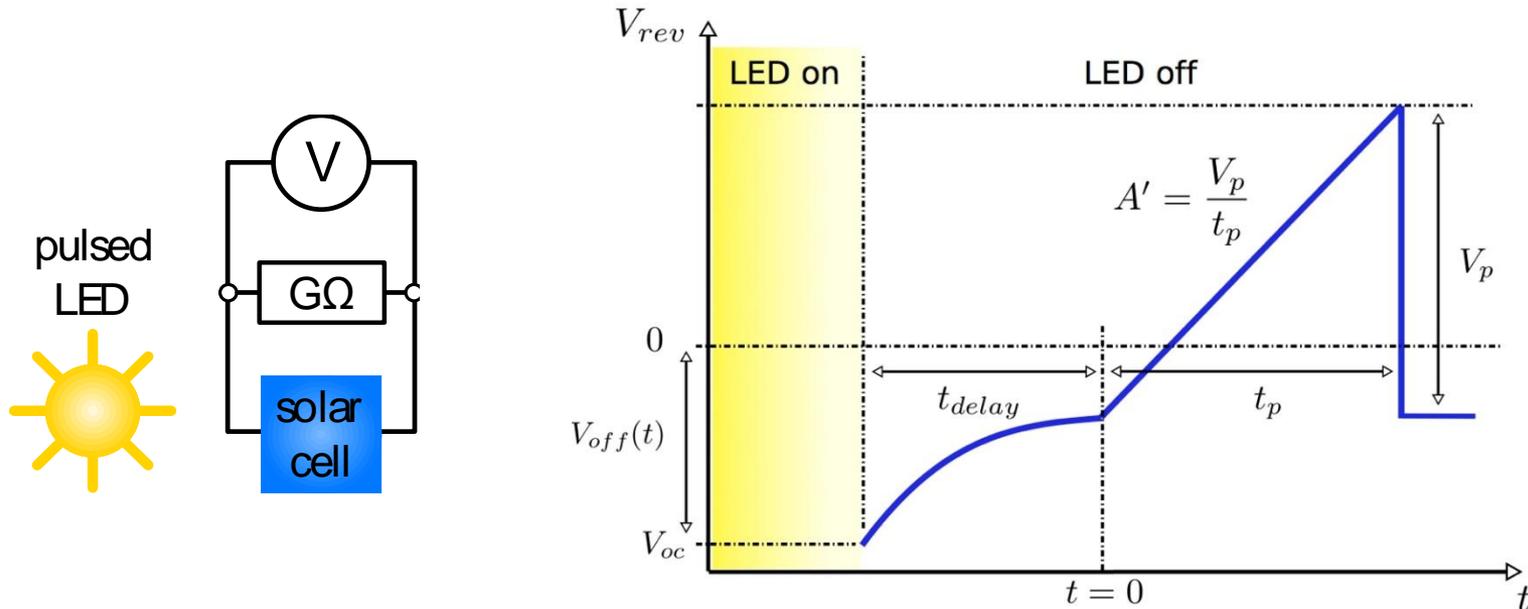


**Vergleichbare  
Wirkungsgrade**

# Bestimmung mikroskopischer Parameter

→ umweltfreundlich vs. toxisch

- OTRACE<sup>1</sup>: OCVD (*open circuit voltage decay*) kombiniert mit Ladungsextraktionsmessmethode CELIV (*charge carrier extraction by linearly increasing voltage*)

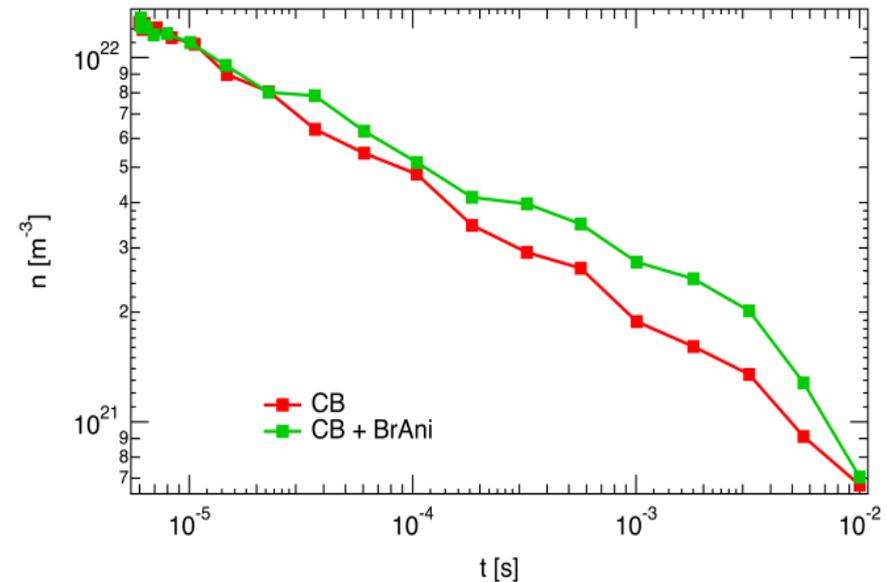
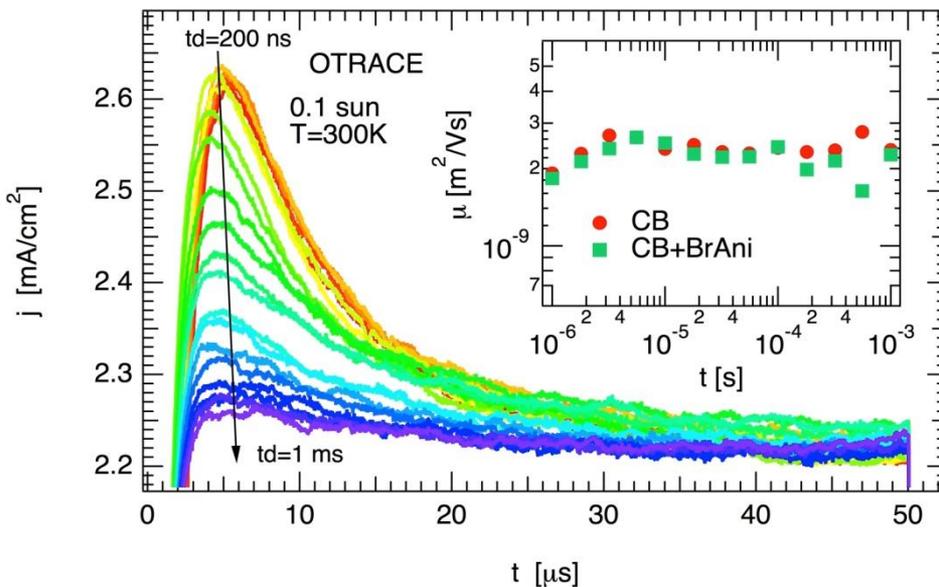


- Lebensdauer und Beweglichkeit der Ladungsträger lassen sich unter realen Arbeitsbedingungen (solare Einstrahlung) bestimmen

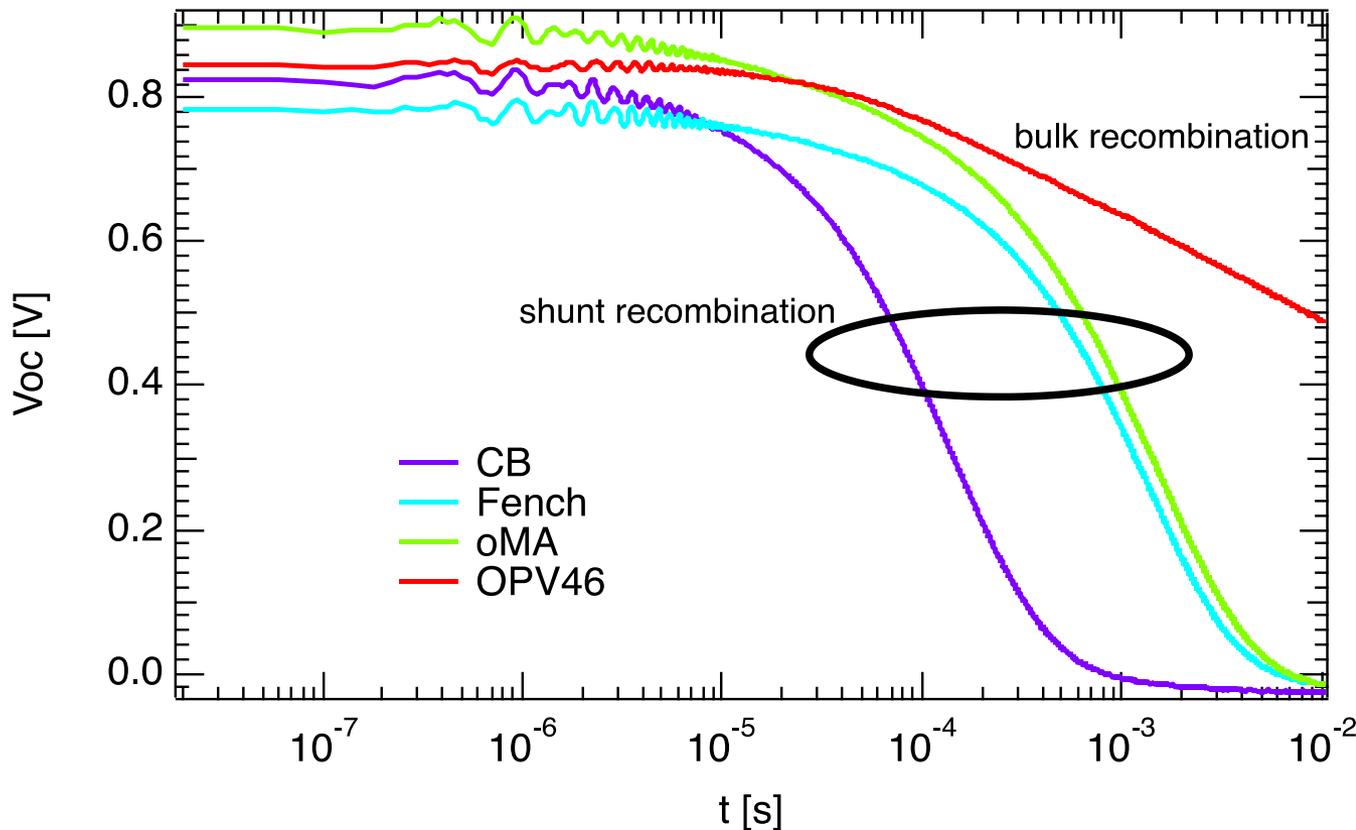
<sup>1</sup>A. Baumann, et al., AM, 2012, 24, 4381–4386

## ➤ Optimierung der Morphologie via Additive

- vergleichbare Ladungsträgermobilität
- kein negativer Einfluss auf Ladungsträgerkonzentration



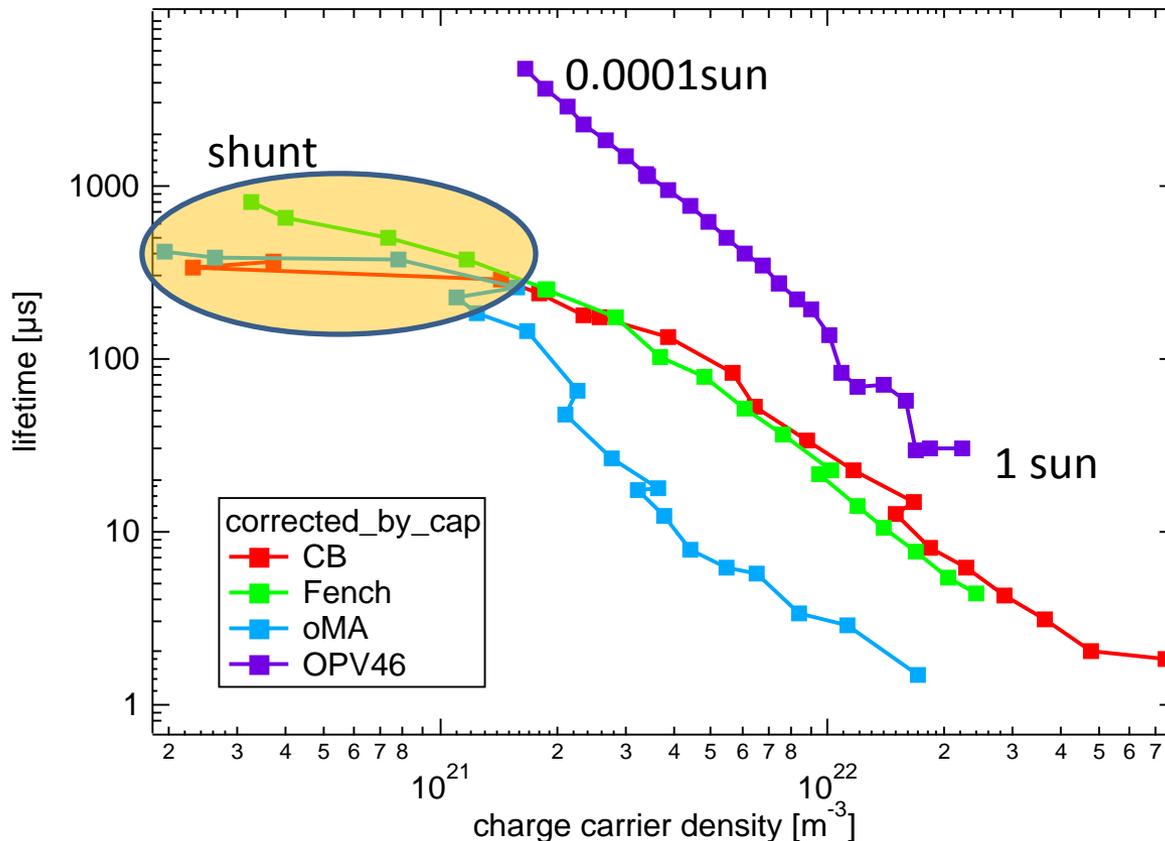
- LY235 Solarzellen: grüne Formulierungen vs. CB
- Nur die OPV46 Mischung zeigt einen OCVD Verfall, welcher in der gezeigten Zeitskala nicht durch Shunts beeinflusst ist



## ➤ OPV46 basierte Solarzellen:

- bei geringen Beleuchtungsstärken nicht beeinflusst von Shunts
- lange Ladungsträgerlebensdauer: 28  $\mu\text{s}$  bei 1 Sonne

4.7 ms bei  $10^{-4}$  Sonnen



---

# Simulation der HSP mittels COSMO-RS kombiniert mit einem künstlichen neuronalen Netzwerk

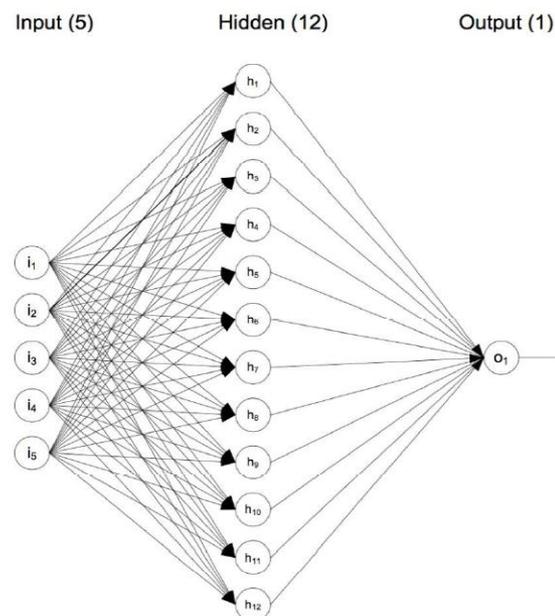
## HyperChem

- Molekulardesign →
- Energetisch günstigste Struktur

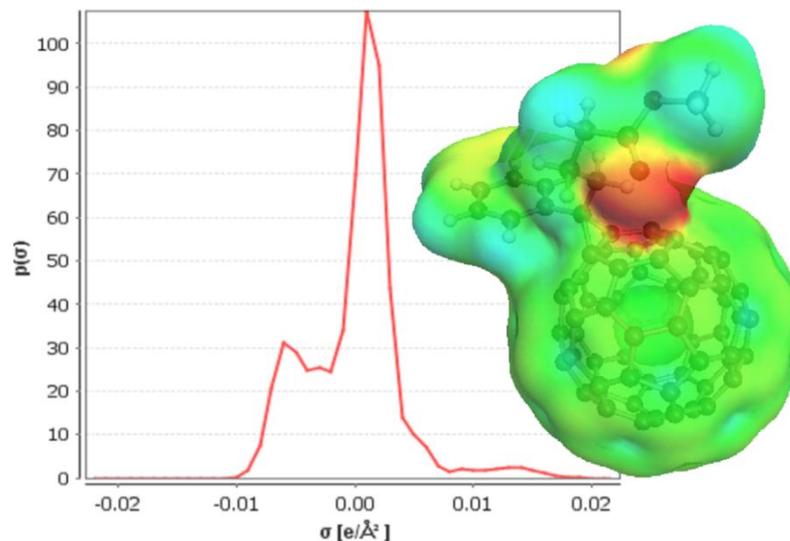
## COSMOtherm

- Quantenchemische Optimierung
- Verteilung der Ladungsträgerdichte (Sigma Profil ( $P(\sigma)$ ))

## Neuronales Netzwerk



## Sigma Profil



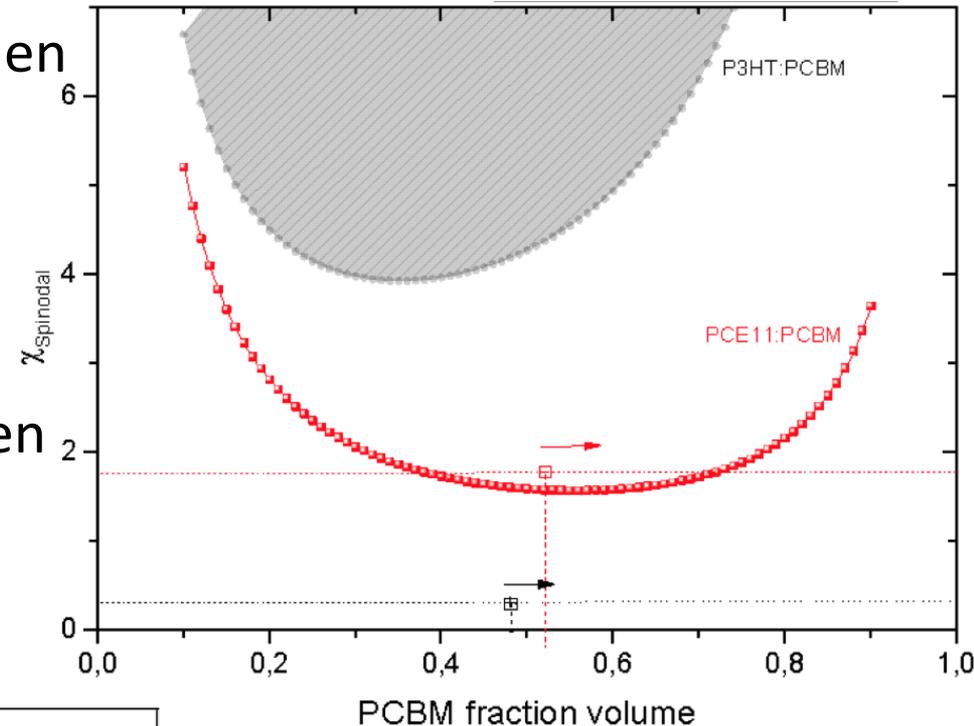
$$P_s^X(\sigma) = C_0 + C_1 M_0^X + C_2 M_1^X + C_3 M_2^X + C_{10} M_{\text{hb,acc}}^X + C_{14} M_{\text{hb,don}}^X$$

# Vorhersage vs. Experiment

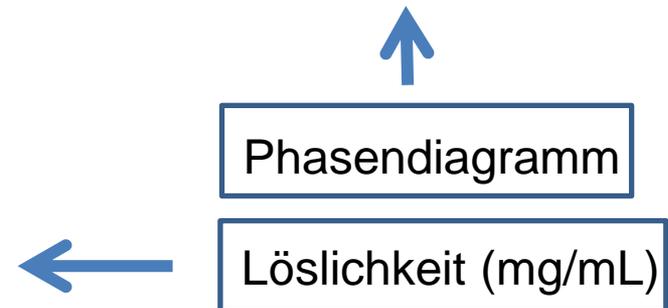
- Simulation (DFT-ANN) ergibt vergleichbare Werte
- Spart Messung und Kosten der Materialien
- Designtool für Moleküle mit geeigneten Eigenschaften

component		exp-BGM	exp-FGAT <sup>35</sup>	MD <sup>7,36,37</sup>	DFT-ANN
PC <sub>61</sub> BM	$\delta_T$	20.48		21.78	21.60
	$\delta_d$	19.70		20.18	20.60
	$\delta_p + \delta_{hb}$	7.80		7.97	9.16
bisPC <sub>61</sub> BM	$\delta_T$	21.78	20.70		25.41
	$\delta_d$	20.83	19.70		24.32
	$\delta_p + \delta_{hb}$	8.92	8.60		8.75
ICMA	$\delta_T$	20.30		20.45	20.56
	$\delta_d$	19.50		20.04	20.40
	$\delta_p + \delta_{hb}$	7.90		4.09	2.90
ICBA	$\delta_T$	21.74	20.50		20.81
	$\delta_d$	21.00	19.80		20.44
	$\delta_p + \delta_{hb}$	7.50	7.00		5.53
PC <sub>71</sub> BM	$\delta_T$	20.90		21.58	21.20
	$\delta_d$	20.20		20.06	20.95
	$\delta_p + \delta_{hb}$	7.30		7.37	4.44

- Simulation von thermodynamischen Eigenschaften vor der Molekülsynthese
- Simulation von Phasendiagrammen
- Berechnung der Löslichkeit



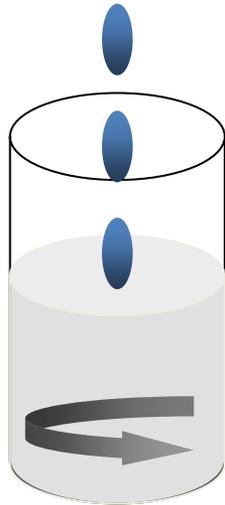
Solvents	PCB <sub>61</sub> BM	PC <sub>71</sub> BM	P3HT
Chlorobenzene	53.12	22.02	28.33
Chloroform	32.50	4.22	45.20
o-xylene	28.71	7.90	27.17
Toluene	58.46	22.53	26.91
o-Dichlorobenzene	25.18	6.91	24.56



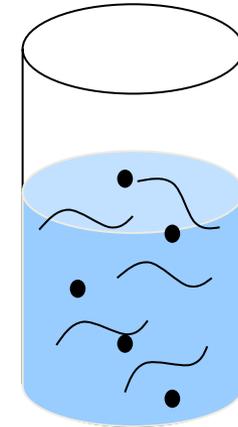
---

# Wasserbasierte PV-Tinten bestehend aus nanopartikulären organischen Halbleitern

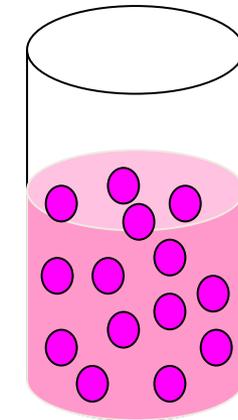
- Polymer:Fulleren Lösung in Chloroform



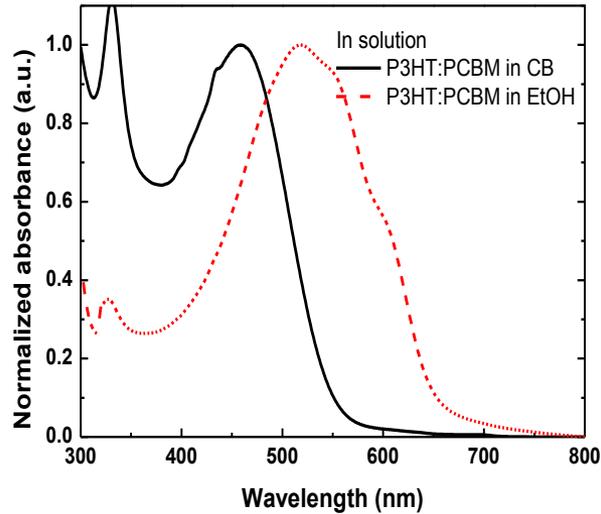
- Injektion in Wasser
- Formierung von BHJ-NP



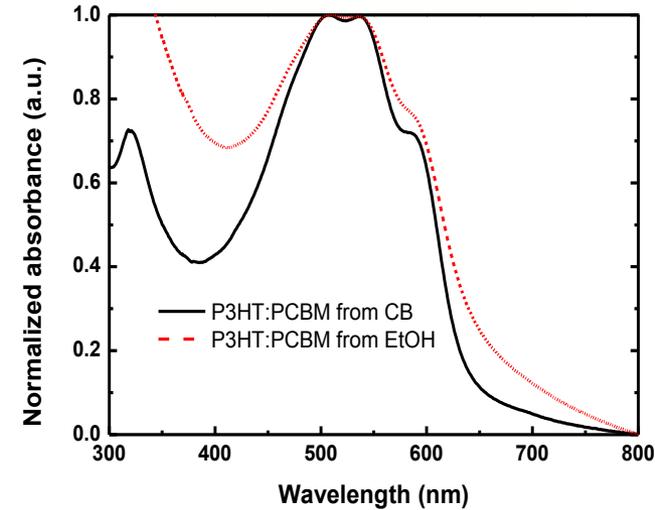
- LM-Verdampfung
- Anreicherung der Partikelkonzentration



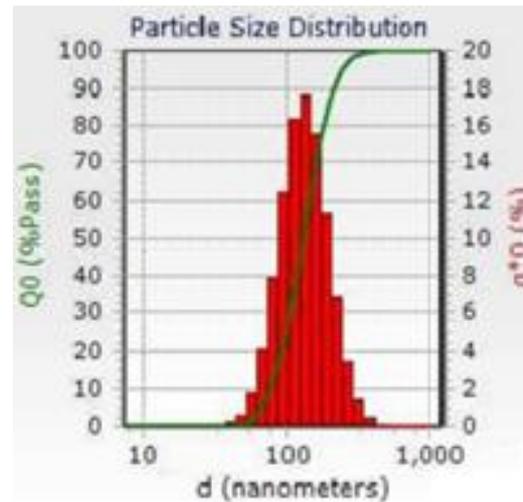
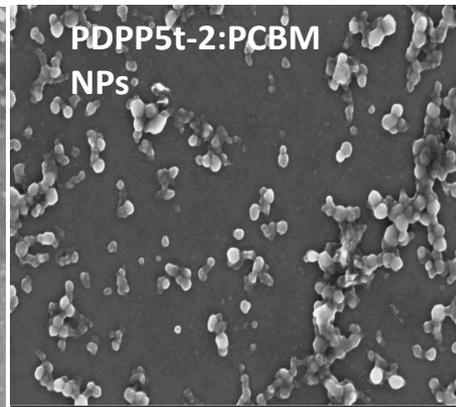
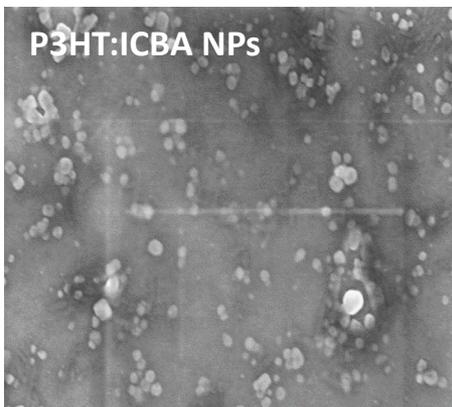
# Charakterisierung der Nanopartikel



Lösung vs. Film  
Nanopartikel  
ergeben  
vergleichbare  
Filmformierung



SEM Aufnahmen der Nanopartikel (NP)

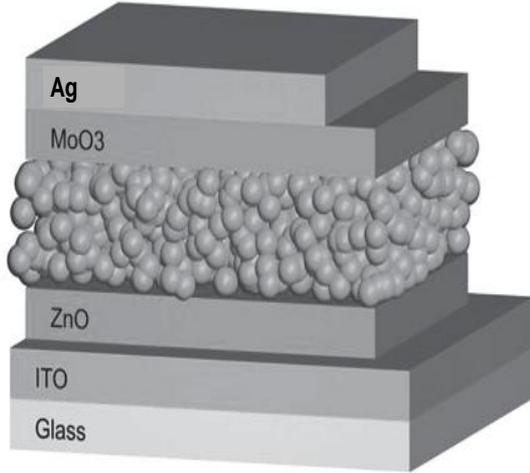


Mittlere Größe

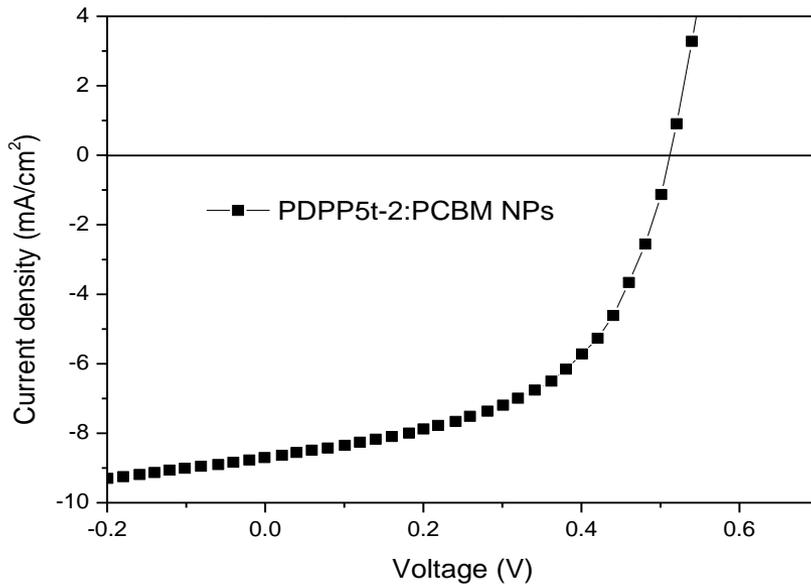
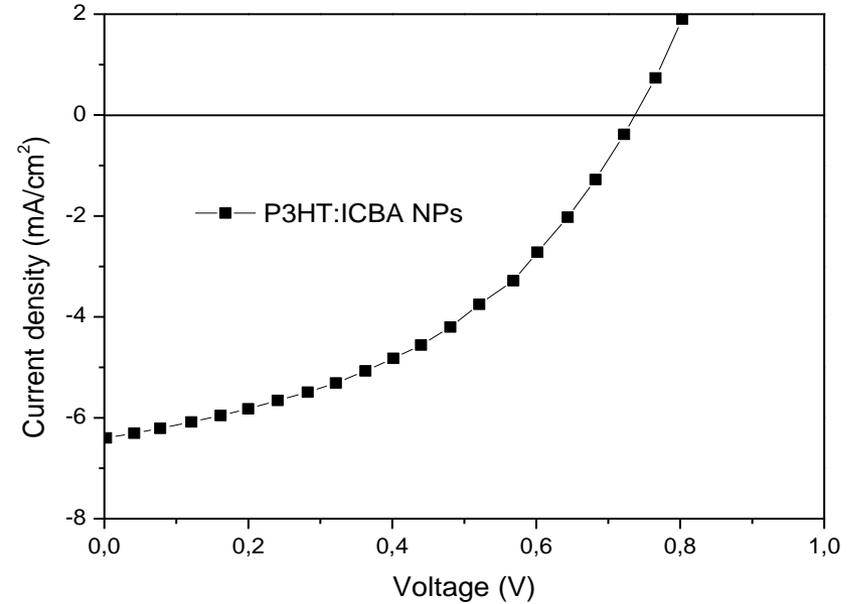


120 nm

# Nanopartikuläre Solarzellen



Glas/ITO/ZnO/Nanopartikel/MoO<sub>3</sub>/Ag



Nanopartikel	V <sub>oc</sub> [V]	J <sub>sc</sub> [mA cm <sup>-2</sup> ]	FF [%]	PCE [%]
P3HT:ICBA	0.72	6.40	43.7	2.02
DPP5t-2:PCBM	0.52	8.70	51.9	2.35

# Unser Dank geht an...

finanziert durch  
Bayerisches Staatsministerium für  
Umwelt und Verbraucherschutz

