

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 (δ) :

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

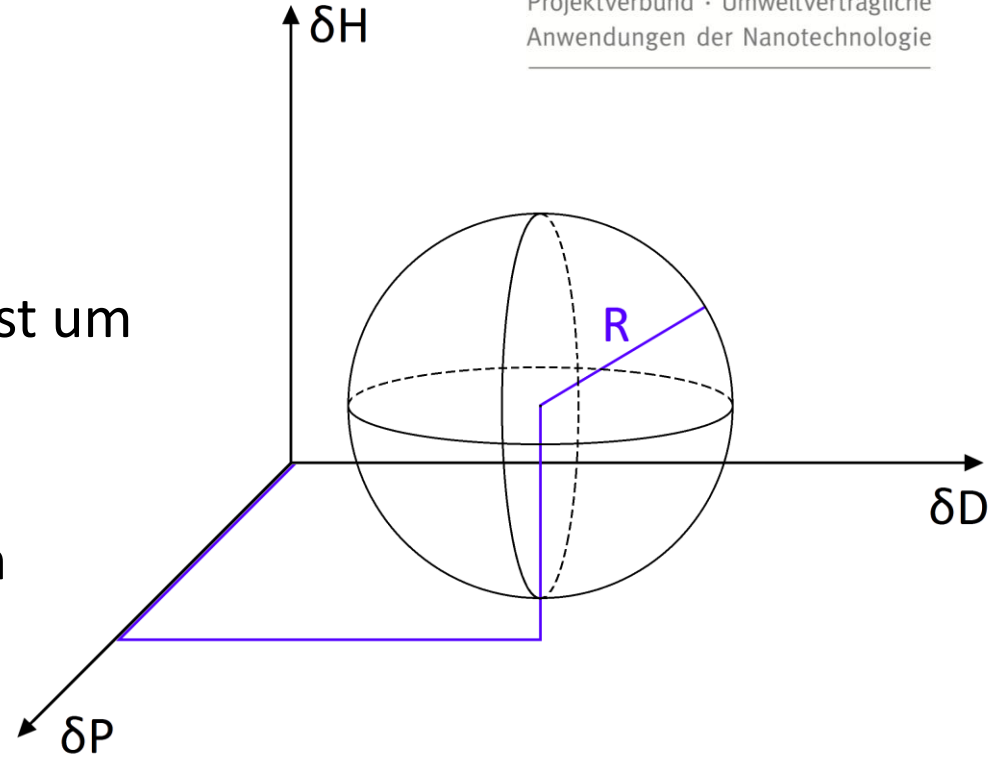
Energie pro Volumen, die nötig ist um intermolekulare Bindungen des Feststoffes zu überwinden

- 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

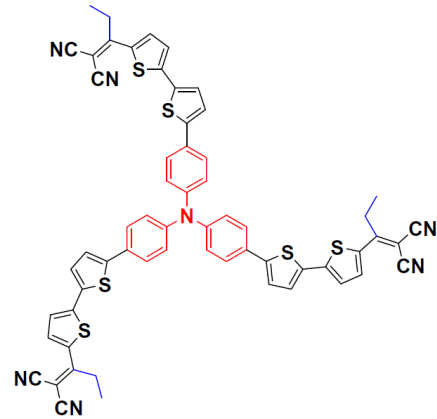
- HSP in 3D: - Löslichkeitskugel mit Radius R
 - Vorauswahl an Lösungsmitteln (LM)
 - Geeignete Lösungsmittel innerhalb der Kugel
 - Je ähnlicher die HSP von Material und LM, desto höher die Löslichkeit



Binäre Lösungsmittelmischungen

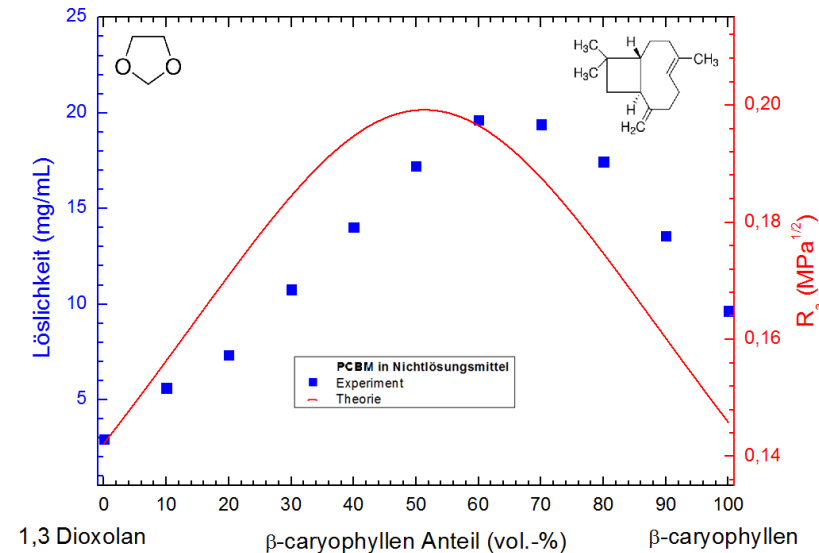
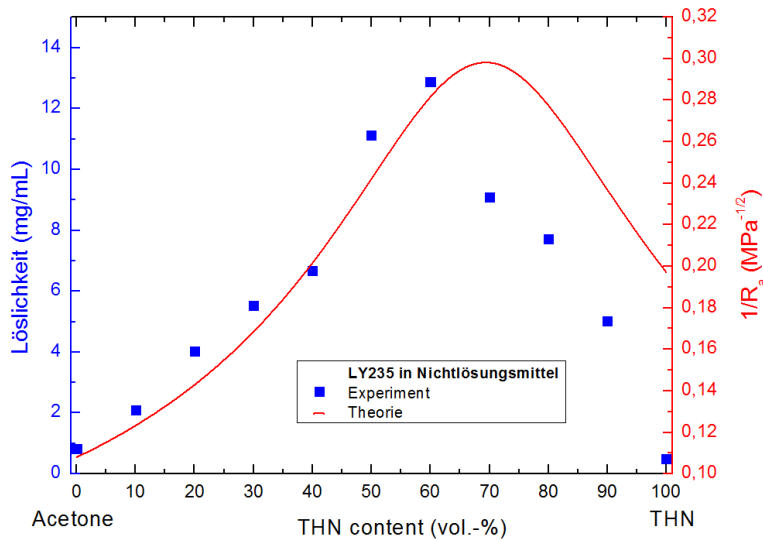
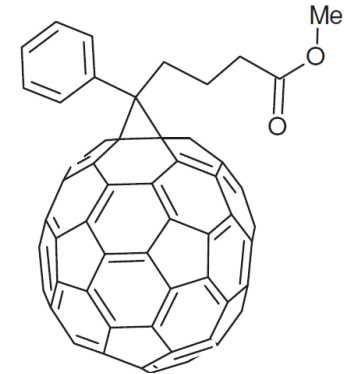
Donator:

LY235

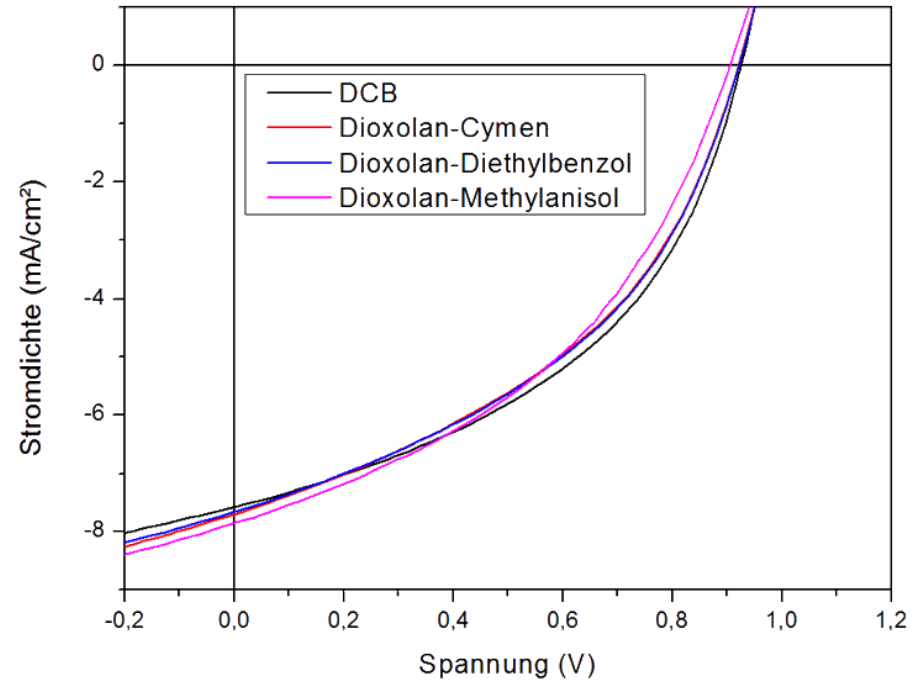
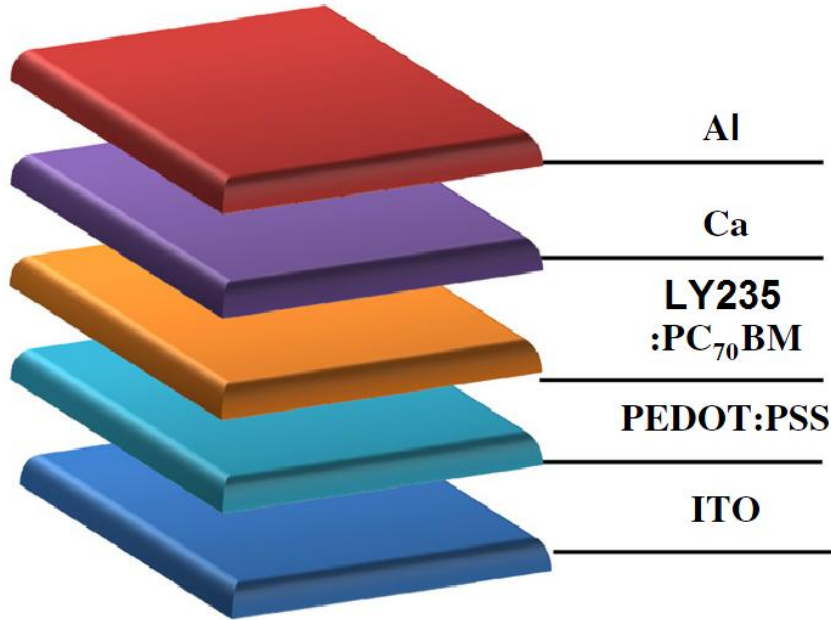


Lösungsmittelmischungen
=
Einstellen gewünschter
Löslichkeit

Akzeptor:
PCBM



Solarzellen aus grünen Lösungen



Lösungsmittel(-mischungen)	J_{sc} (mA/cm ²)	PCE (%)	V_{oc} (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

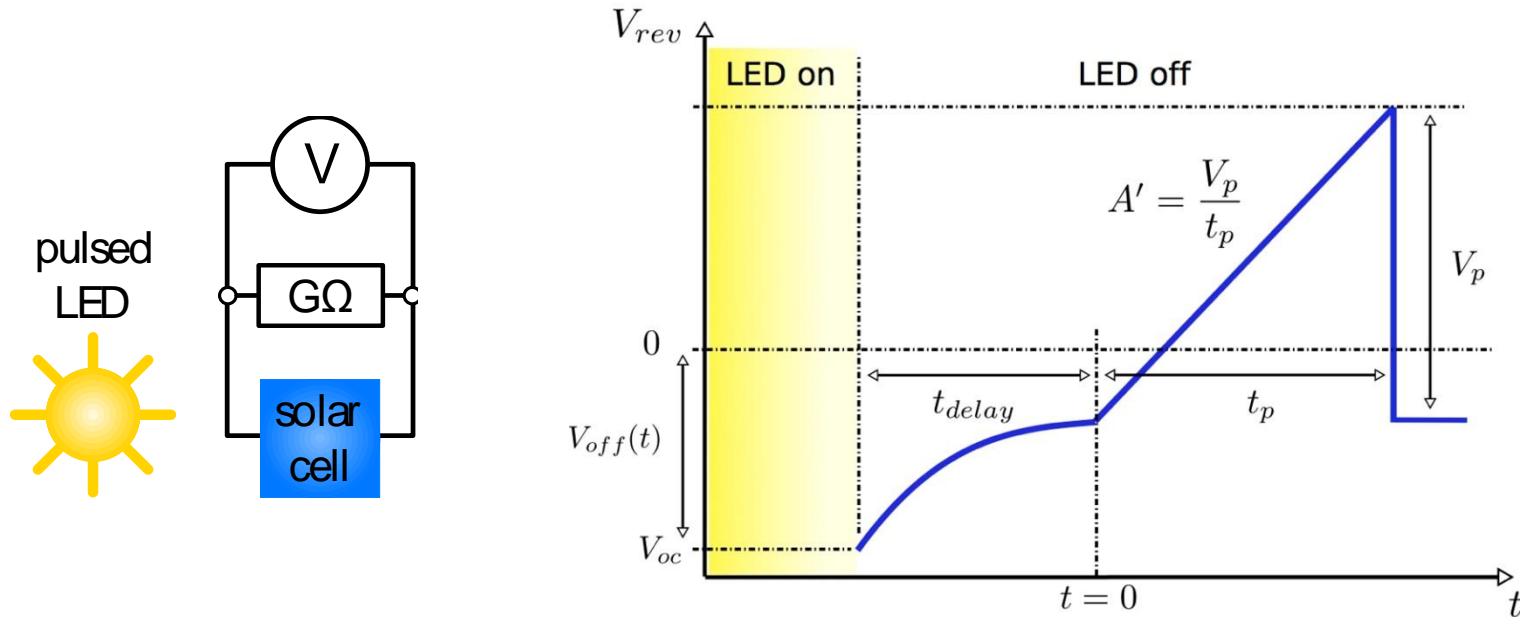


**Vergleichbare
Wirkungsgrade**

Bestimmung mikroskopischer Parameter

→ umweltfreundlich vs. toxisch

- OTRACE¹: OCVD (*open circuit voltage decay*) kombiniert mit Ladungsextraktionsmessmethode CELIV (*charge carrier extraction by linearly increasing voltage*)

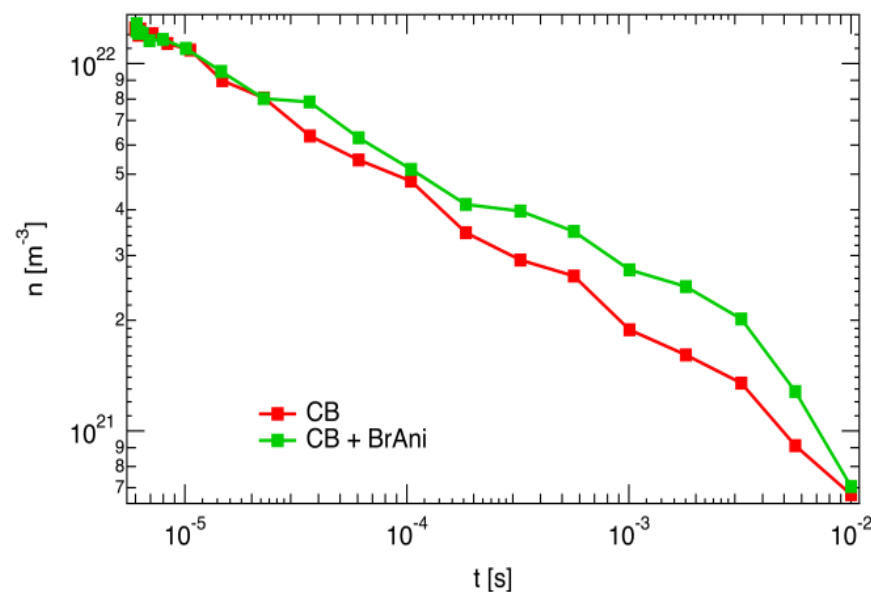
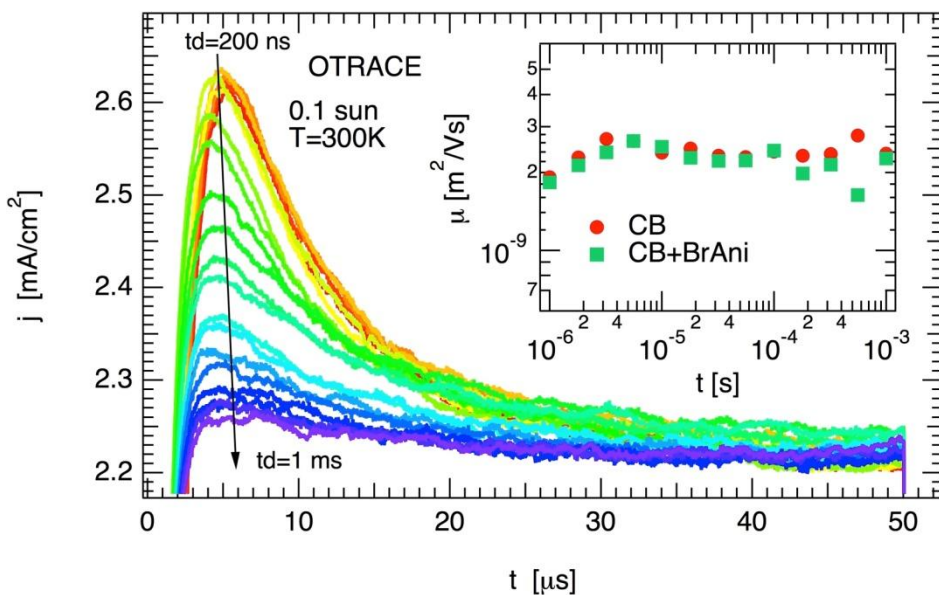


- Lebensdauer und Beweglichkeit der Ladungsträger lassen sich unter realen Arbeitsbedingungen (solare Einstrahlung) bestimmen

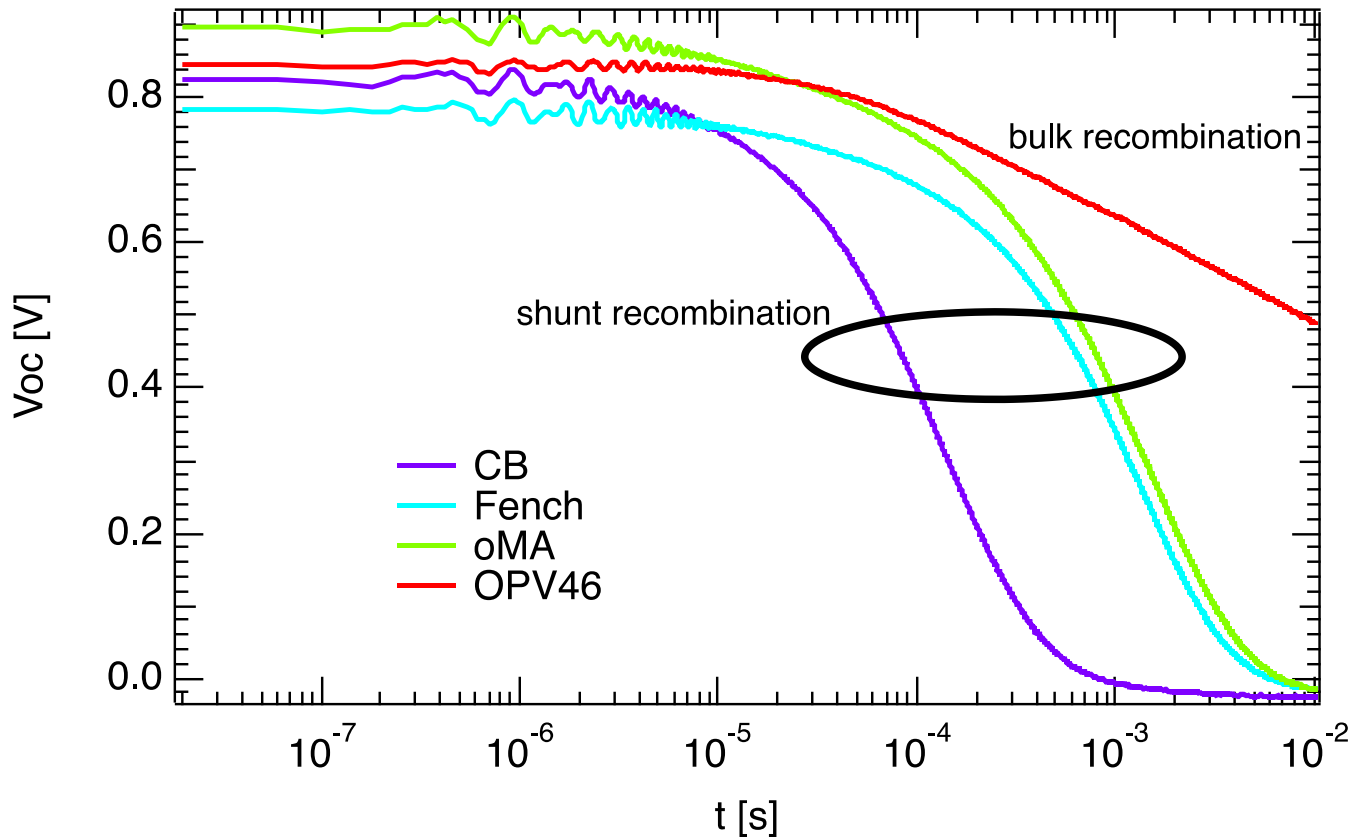
¹A. Baumann, et al., AM, 2012, 24, 4381–4386

➤ Optimierung der Morphologie via Additive

- vergleichbare Ladungsträgermobilität
- kein negativer Einfluss auf Ladungsträgerkonzentration



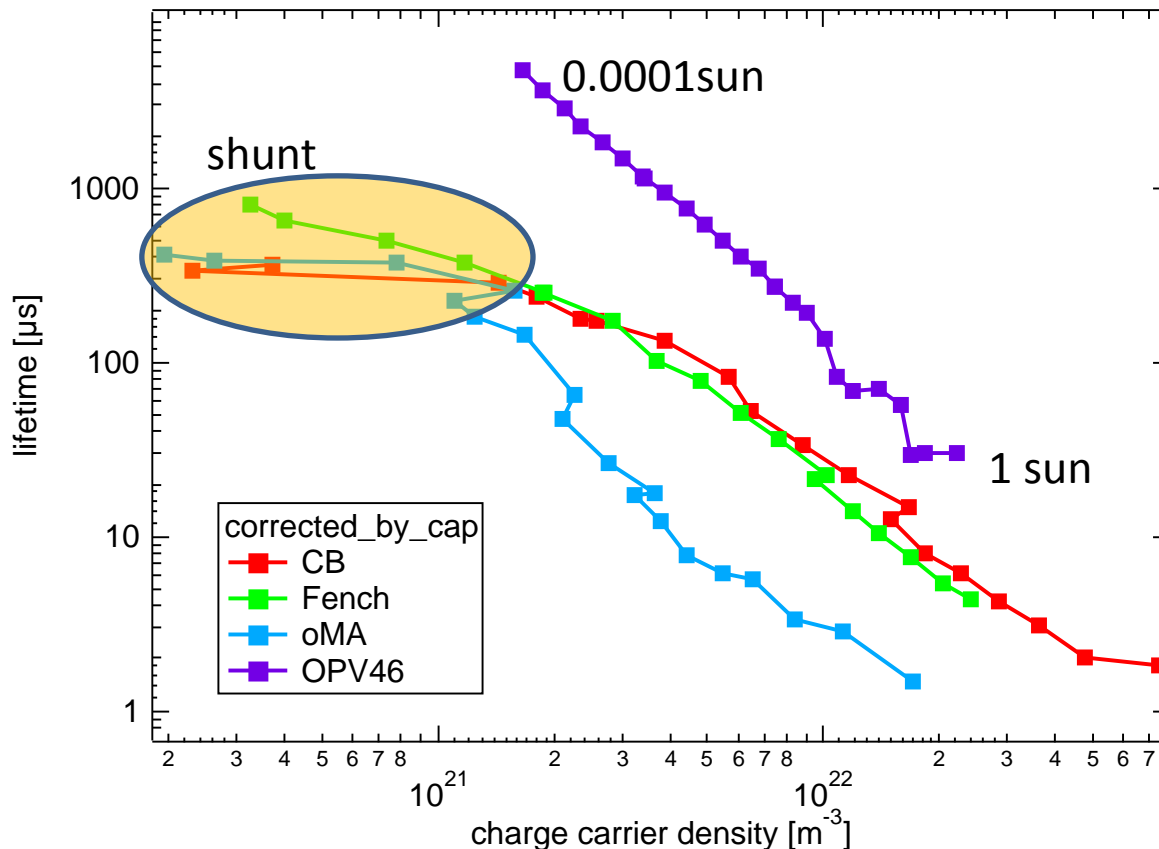
- LY235 Solarzellen: grüne Formulierungen vs. CB
- Nur die OPV46 Mischung zeigt einen OCVD Verfall, welcher in der gezeigten Zeitskala nicht durch Shunts beeinflusst ist



➤ OPV46 basierte Solarzellen:

- bei geringen Beleuchtungsstärken nicht beeinflusst von Shunts
- lange Ladungsträgerlebensdauer: 28 μs bei 1 Sonne

4.7 ms bei 10^{-4} Sonnen



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

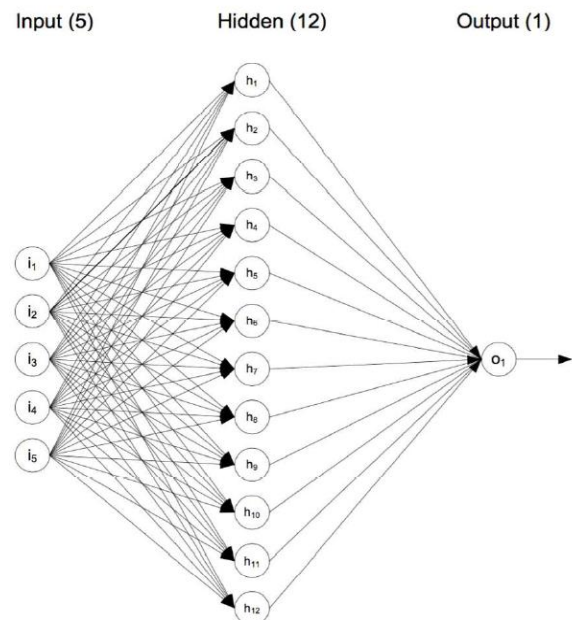
HyperChem

- Molekulardesign →
- Energetisch günstigste Struktur

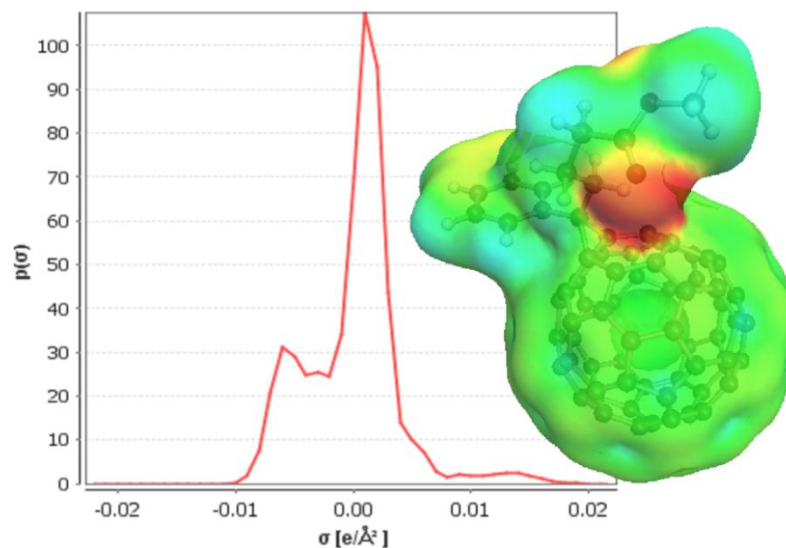
COSMOtherm

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

Neuronales Netzwerk



Sigma Profil



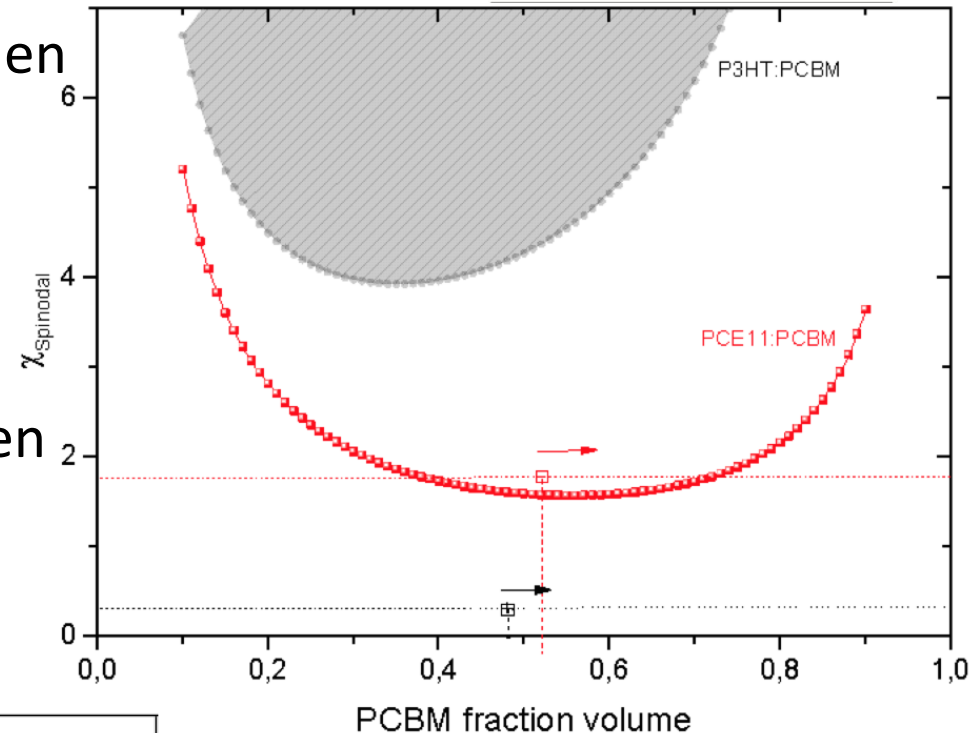
$$P_s^X(\sigma) = C_0 + C_1 M_0^X + C_2 M_1^X + C_3 M_2^X + C_{10} M_{\text{hb,acc}}^X + C_{14} M_{\text{hb,don}}^X$$

Vorhersage vs. Experiment

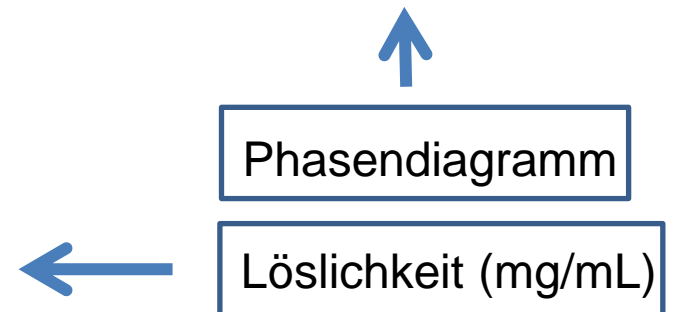
- Simulation (DFT-ANN) ergibt vergleichbare Werte
- Spart Messung und Kosten der Materialien
- Designtool für Moleküle mit geeigneten Eigenschaften

component		exp-BGM	exp-FGAT ³⁵	MD ^{7,36,37}	DFT-ANN
PC ₆₁ BM	δ_T	20.48		21.78	21.60
	δ_d	19.70		20.18	20.60
	$\delta_p + \delta_{hb}$	7.80		7.97	9.16
bisPC ₆₁ BM	δ_T	21.78	20.70		25.41
	δ_d	20.83	19.70		24.32
	$\delta_p + \delta_{hb}$	8.92	8.60		8.75
ICMA	δ_T	20.30		20.45	20.56
	δ_d	19.50		20.04	20.40
	$\delta_p + \delta_{hb}$	7.90		4.09	2.90
ICBA	δ_T	21.74	20.50		20.81
	δ_d	21.00	19.80		20.44
	$\delta_p + \delta_{hb}$	7.50	7.00		5.53
PC ₇₁ BM	δ_T	20.90		21.58	21.20
	δ_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

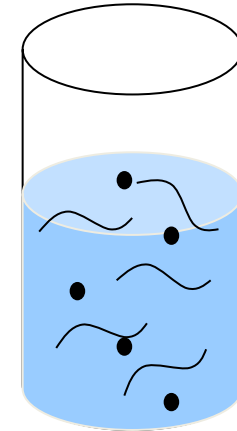
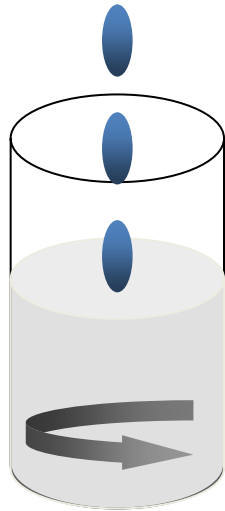


Solvents	PCB ₆₁ BM	PC ₇₁ BM	P3HT
Chlorobenzene	53.12	22.02	28.33
Chloroform	32.50	4.22	45.20
o-xylene	28.71	7.90	27.17
Toluene	58.46	22.53	26.91
o-Dichlorobenzene	25.18	6.91	24.56

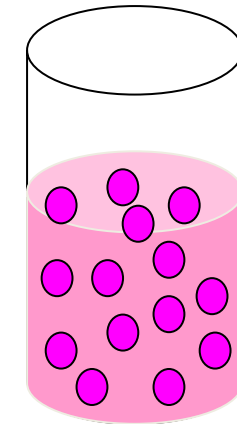


Wasserbasierte PV-Tinten bestehend aus nanopartikulären organischen Halbleitern

- Polymer:Fulleren Lösung in Chloroform

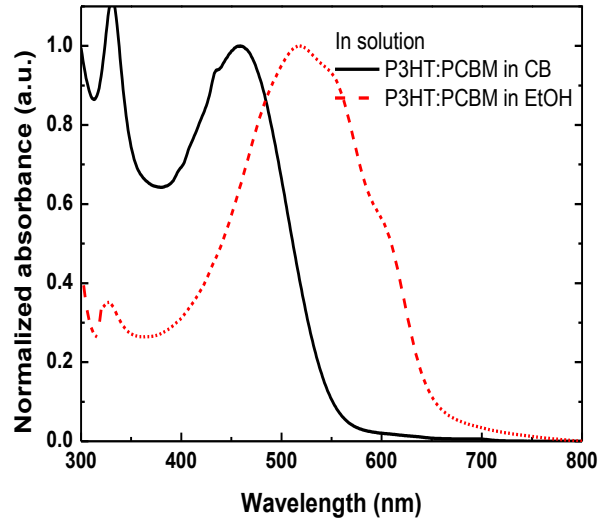


- Injektion in Wasser
- Formierung von BHJ-NP

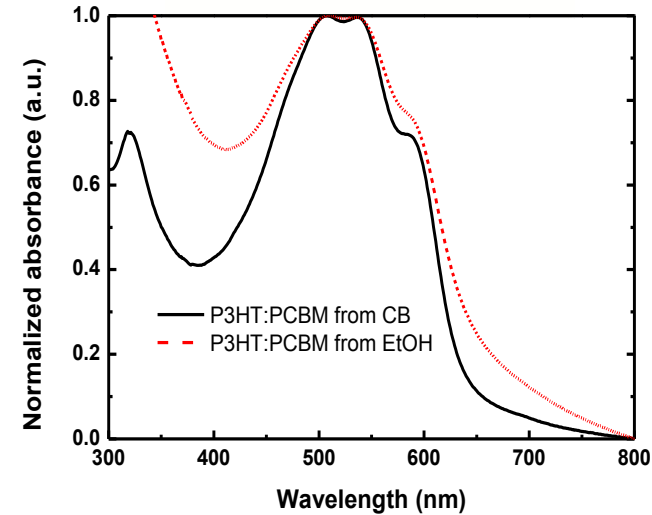


- LM-Verdampfung
- Anreicherung der Partikelkonzentration

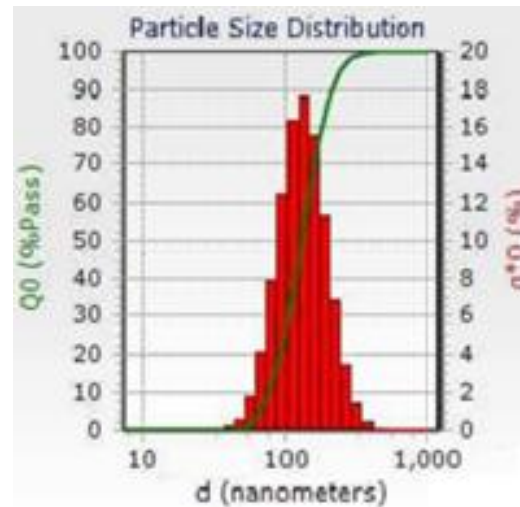
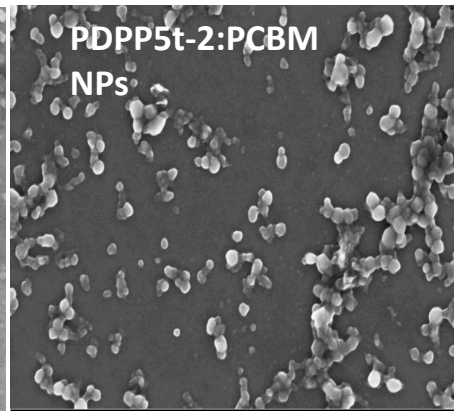
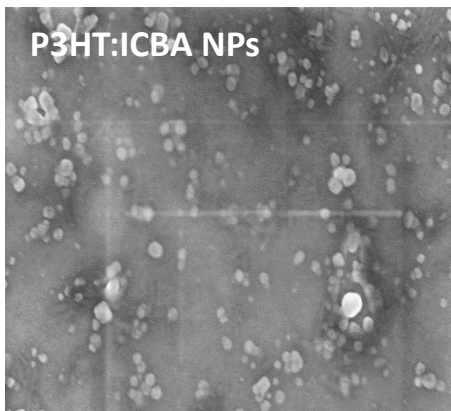
Charakterisierung der Nanopartikel



Lösung vs. Film
Nanopartikel
ergeben
vergleichbare
Filmformierung



SEM Aufnahmen der Nanopartikel (NP)

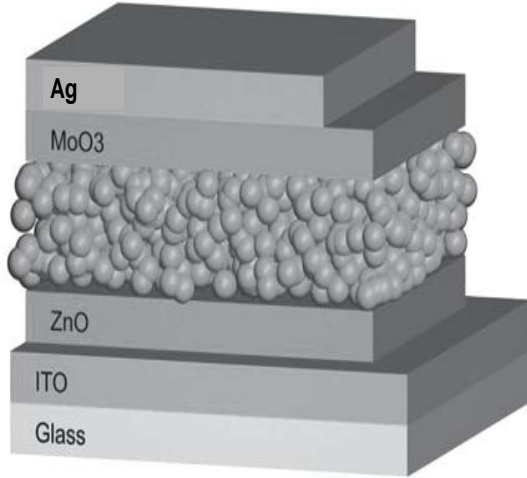


Mittlere Größe

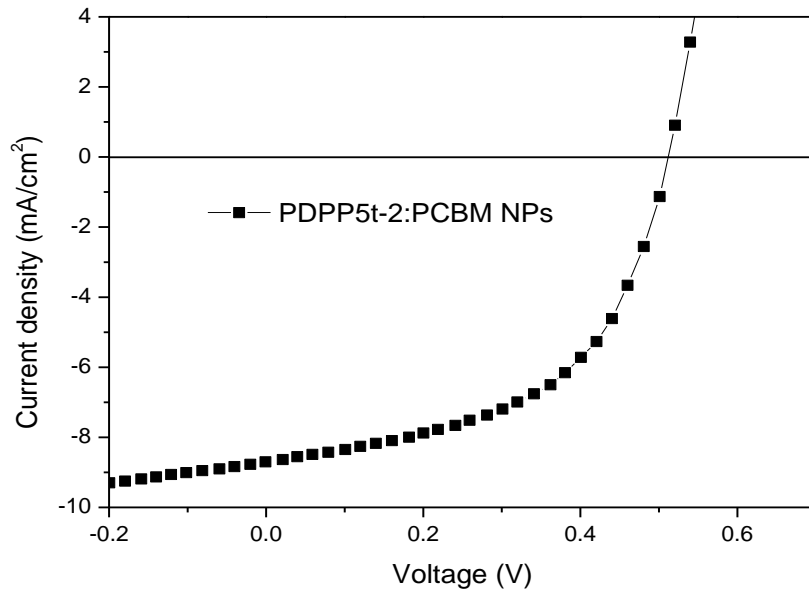
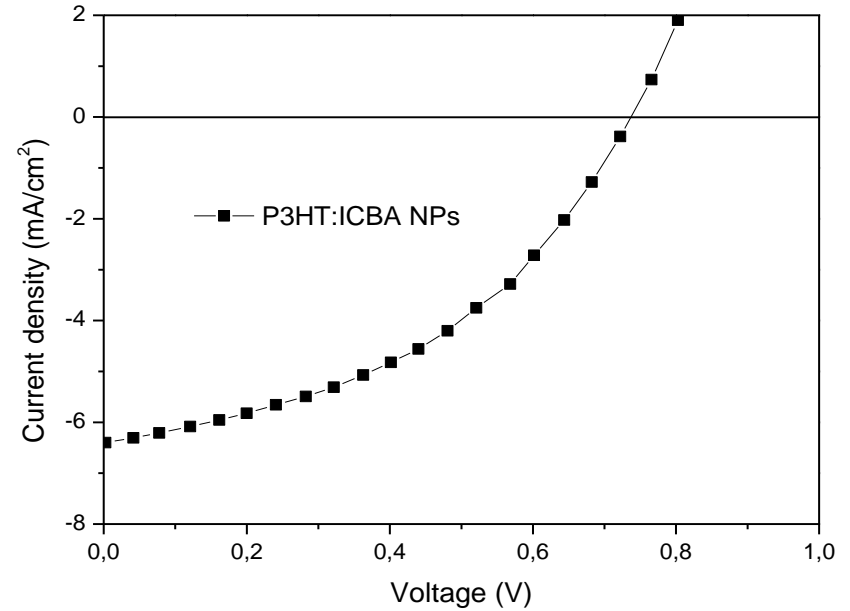


120 nm

Nanopartikuläre Solarzellen



Glas/ITO/ZnO/Nanopartikel/MoO₃/Ag



Nanopartikel	V _{oc} [V]	J _{sc} [mA cm ⁻²]	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

