

University of Groningen

Device physics of polymer:fullerene bulk heterojunction solar cells

Bartesaghi, Davide

IMPORTANT NOTE: You are advised to consult the publisher's version (publisher's PDF) if you wish to cite from it. Please check the document version below.

Document Version

Publisher's PDF, also known as Version of record

Publication date:

2016

[Link to publication in University of Groningen/UMCG research database](#)

Citation for published version (APA):

Bartesaghi, D. (2016). *Device physics of polymer:fullerene bulk heterojunction solar cells*. [Thesis fully internal (DIV), University of Groningen]. Rijksuniversiteit Groningen.

Copyright

Other than for strictly personal use, it is not permitted to download or to forward/distribute the text or part of it without the consent of the author(s) and/or copyright holder(s), unless the work is under an open content license (like Creative Commons).

The publication may also be distributed here under the terms of Article 25fa of the Dutch Copyright Act, indicated by the "Taverne" license. More information can be found on the University of Groningen website: <https://www.rug.nl/library/open-access/self-archiving-pure/taverne-amendment>.

Take-down policy

If you believe that this document breaches copyright please contact us providing details, and we will remove access to the work immediately and investigate your claim.

Downloaded from the University of Groningen/UMCG research database (Pure): <http://www.rug.nl/research/portal>. For technical reasons the number of authors shown on this cover page is limited to 10 maximum.

SAMENVATTING

Alhoewel organische fofovoltaïca (OPV) een veelbelovende technologie is voor zonne-energie zijn de OPV's nog niet in staat om de strijd aan te gaan met conventionele anorganische technologieën. Het commerciële succes van OPV's is pas mogelijk wanneer de efficiëntie en stabiliteit verbeterd worden. Om deze doelen te bereiken is er een grondig begrip nodig van de fundamentele processen die plaatsvinden in een organische zonnecel. Dit proefschrift richt zich op de natuurkundige aspecten van bulk heterojunction organische zonnecellen en bespreekt tevens de beperkende factoren van de prestatie en de levensduur van deze apparaten. Het eerste deel van het proefschrift gaat over het donor-acceptor systeem PDPP5T:[70]PCBM. De morfologie van PDPP5T:[70]PCBM lagen hangt sterk af van de verwerkingscondities; door het variëren van de verwerkingscondities en de donor:acceptor verhouding kan een groot aantal verschillende morfologieën worden verkregen. Zodoende is het PDPP5T:[70]PCBM mengsel geschikt voor onze doelstelling om een kwantitatieve relatie tussen morfologie en efficiëntie van organische zonnecellen vast te stellen.

We analyseren zonnecellen waarin het actieve mengsel een fijn verstrooid mengsel van donor en acceptor is of een grove fase gescheiden morfologie met grote [70] PCBM domeinen ingesloten in een polymeer-rijke matrix. De fijne dispersie wordt gevormd met behulp van het toevoegen van een co-solvent of door de concentratie van [70]PCBM onder een bepaalde drempelwaarde te houden. De zonnecel met homogene morfologie verkregen via de additie van een co-solvent gaf de beste resultaten. De homogene zonnecellen verkregen via het laag houden van de concentratie [70]PCBM hadden een veel lagere efficiëntie; zonnecellen met grove [70]PCBM domeinen hadden ook een lage efficiëntie ten opzichte van geoptimaliseerde zonnecellen.

Om een beter begrip te krijgen over de efficiëntie van deze zonnecellen wordt in **hoofdstuk 2** experimenteel het transport en de recombinatie van ladingen in PDPP5T:[70]PCBM mengsels gekarakteriseerd. We voeren de metingen uit onder ver-

schillende concentraties [70]PCBM en onder verschillende morfologieën van de actieve lagen. De mobiliteit van de elektronen blijkt sterk afhankelijk van de [70]PCBM concentratie, terwijl de gatenmobiliteit ongevoelig is voor de compositie van het mengsel. Daarnaast tonen we aan dat de elektronenmobiliteit meer en meer afhankelijk wordt van het elektrische veld als de concentratie van de acceptor in het mengsel wordt vermindert. De sterkte van de bimoleculaire recombinatie, ten opzichte van de sterkte voorgesteld door Langevin's theorie, blijkt af te nemen wanneer de fasescheiding toeneemt. Voor zonnecellen met kleine domeingrootte is de relatieve sterkte van bimoleculaire recombinatie dichterbij de waarde gemeten voor de homogene mengsels.

In **hoofdstuk 3** gebruiken we de experimentele resultaten om een model van de stroom-spanningskarakteristieken van PDPP5T:[70]PCBM zonnecellen te modelleren en om de verschillende prestaties van de verscheidene morfologieën en/of donor:acceptor ratio's te verklaren. Voor de homogene actieve lagen tonen we aan dat de slechte elektronenmobiliteit en haar afhankelijkheid van het elektrische veld beperkende factoren zijn voor de efficiëntie van de zonnecel met lage [70]PCBM concentratie. Door het verhogen van deze [70]PCBM concentratie verdwijnt deze limiterende factor, mits de morfologie homogeen gehouden wordt met behulp van een co-solvent. Bij de afwezigheid van de co-solvent levert een te hoge concentratie [70]PCBM fasescheiding op zoals eerder beschreven. In dit geval worden de prestaties van de zonnecel beperkt door zowel het slechte elektrontransport van de polymeer-rijke gemengde fase als door de lagere omvang van het donor:acceptor grensvlak. We modelleren de stroom onttrokken uit de fase-gescheiden zonnecellen als de som van twee componenten. De eerste is toe te schrijven aan de de ladingsdragers die zich verplaatsen door de gehele gemengde fase. De tweede aan het gedeelte dichtbij het grensvlak van de domeinen. Door het scheiden van de stroom in twee componenten, kan deze apart worden gemodelleerd door middel van een eendimensionale (1D) drift-diffusiecode. Het voordeel van het gebruik van een 1D benadering is de eenvoud in vergelijking met twee- en driedimensionale modellen, waardoor berekeningen sneller uitgevoerd kunnen worden.

In **hoofdstuk 4** valideren we het "parallele model" dat gepresenteerd is in hoofdstuk 3. Door middel van het vergelijken van deze resultaten met de berekeningen uitgevoerd met behulp van een volledige driedimensionale drift-diffusiecode. Daarnaast gebruiken we beide modellen voor de gedetailleerde bestudering van het effect van compositionele inhomogeniteiten op de prestaties van organische zonnecellen.

Hoofdstuk 5 is gewijd aan de vulfactor (FF) van de organische zonnecellen. Onder de verscheidene parameters die de efficiëntie van de zonnecel karakteriseren is over FF het minst bekend. Alhoewel het bekend is dat competitie tussen recombinatie en extractie van lading bepalend zijn voor de vulfactor, ontbreekt een duidelijke relatie voor deze competitie. We laten zien dat de ratio van deze recombinatie- en extractiesnelheden gekwantificeerd kan worden door een parameter, θ . Deze parameter omvat de ladingsdragersmobiliteiten, recombinatiesterkte, laagdikte, generatiesnelheid van ladingen en interne spanning. Wanneer de FF van verscheidene zonnecellen worden geplot tegen θ , vallen de data op één universele curve. Hierbij wordt gedemonstreerd dat θ in staat is om de competitie tussen recombinatie en extractie van vrije ladingen te kwantificeren.

Onze bevindingen worden ondersteund door de drift-diffusiesimulaties en door experimentele resultaten en verklaren waarom de FF's aanzienlijk veranderen met materiaaleigenschappen, lichtintensiteit en laagdikte. Deze relatie kan worden gebruikt voor het rationaliseren van het effect op FF van gelijktijdige veranderende parameters en kan worden gebruikt als een richtlijn voor gerichte verbeteringen van de FF.

Tot slot wordt in **hoofdstuk 6** de stabiliteit van organische zonnecellen behandeld, met in het bijzonder de UV-geïnduceerde degradatie van PTB7:[70]PCBM zonnecellen in een inerte atmosfeer. We meten de elektrontransporteigenschappen van het mengsel voor en na blootstelling aan UV straling. Opmerkelijk genoeg bleek dat het gatentransport niet aangetast wordt door de UV straling. Echter, deze veroorzaken een verslechtering van het elektrontransport. We kunnen deze in verband brengen met een toename in de dichtheid van elektronenvallen en een sterker wordende recombinatie via deze vallen. Daarnaast bewijzen we dat PTB7 niet intrinsiek onstabiel is wanneer het wordt blootgesteld aan UV licht en dat de UV-geïnduceerde degradatie van het mengsel veroorzaakt wordt door de aanwezigheid van [70]PCBM. Onze resultaten suggereren dat de compatibiliteit met [70]PCBM onder UV straling één van de hoofddoelen zou moeten zijn voor het ontwerpen van toekomstige donormaterialen.

