

New Material Concepts for Organic Solar Cells

Jan Meiß

Bibliografische Information der Deutschen Bibliothek

Die Deutsche Bibliothek verzeichnet diese Publikation in der Deutschen Nationalbibliografie; detaillierte bibliografische Daten sind im Internet über <http://dnb.ddb.de> abrufbar.

1. Gutachter:	Prof. Dr. Karl Leo
2. Gutachter:	Prof. Dr. Vladimir Dyakonov
Eingereicht am:	31.05.2010
Verteidigt am:	28.02.2011

Meiß, Jan:

New Material Concepts for Organic Solar Cells
ISBN 978-3-941274-71-6

Alle Rechte vorbehalten

1. Auflage 2011, Göttingen

© Optimus Verlag

URL: www.optimus-verlag.de

Printed in Germany

Papier ist FSC zertifiziert (holzfrei, chlorfrei und säurefrei,
sowie alterungsbeständig nach ANSI 3948 und ISO 9706)

Das Werk einschließlich aller seiner Teile ist urheberrechtlich geschützt. Jede Verwertung außerhalb der engen Grenzen des Urheberrechtsgesetzes in Deutschland ist ohne Zustimmung des Autors unzulässig und strafbar. Dies gilt insbesondere für Vervielfältigungen, Übersetzungen, Mikroverfilmungen und die Einspeicherung und Verarbeitung in elektronischen Systemen.

New Material Concepts for Organic Solar Cells

Dissertation
zur Erlangung des akademischen Grades
Doktor der Naturwissenschaften
(Dr. rer. nat.)

vorgelegt von

Jan Meiß
geboren am 24.10.1980 in Warendorf

Institut für Angewandte Physik
Fakultät für Mathematik und Naturwissenschaften
der Technischen Universität Dresden
Dresden 2010

Kurzdarstellung

Die vorliegende Arbeit befasst sich mit zwei grundlegenden praktischen Problemen organischer Solarzellen (OSZ): transparente Topkontakte und alternative Donatormaterialien.

Transparente Topkontakte sind eine Voraussetzung für invertierte, d.h. von oben beleuchtete OSZ auf nichttransparenten Substraten. In dieser Arbeit werden transparente dünne Metallschichten als Möglichkeit für diese Anwendung gezeigt. Es zeigt sich, dass Silber- und Goldschichten mit Schichtdicken < 20 nm hinreichend transparent und leitfähig sind, um entsprechende OSZ herzustellen. Durch die Verwendung nanometerdicker Aluminium-Zwischenschichten zwischen Organik und Ag oder Au ist es möglich, die Morphologie der Metallschichten erheblich zu verbessern, was auch die elektrischen Eigenschaften positiv beeinflusst. Es wird weiterhin gezeigt, dass transparente organische Deckschichten die Lichteinkopplung durch Metallschichten in OSZ deutlich verbessern. Weiterhin konnten im Rahmen dieser Arbeit in Kooperation mit der Heliatek GmbH unter Verwendung optimierter Deckschichten und Metall-Topkontakte hocheffiziente, lichtdurchlässige Tandem-OSZ in Modulgröße hergestellt werden.

Drei Diindenoperylen-Derivate werden als grün absorbierende Donatormaterialien vorgestellt. Obwohl diese Experimente noch im Anfangsstadium sind, weisen OSZ mit diesen Materialien hohe Füllfaktoren von über 76 % und Spannungen von 1 V auf. OSZ mit Mischschichten dieser Derivate in Verbindung mit dem Fulleren C₆₀ zeigen unterschiedliche Eigenschaften, wenn das Substrat während der Probenherstellung geheizt wird. Dadurch wird die Möglichkeit eröffnet, dickere Mischschichten für höhere Photoströme zu verwenden, ohne starke Verluste bei Spannung oder Füllfaktor zu erleiden.

Abstract

The current work investigates two fundamental problems of small molecule organic solar cells (OSC): transparent top contacts and alternative donor materials.

Transparent top contacts are a prerequisite for inverted, i.e. top-illuminated OSC on opaque substrates. This work documents that transparent, ultra-thin metal films are a possible solution to this problem. It is shown that silver or gold layers with thicknesses < 20 nm are sufficiently transparent and conductive to fabricate suitable OSC. Utilisation of nanometer-thin Al interlayers between Ag or Au and the organic underlayers allow for considerable improvement of morphological and electrical properties of the top contacts. Organic capping layers are presented that strongly improve light incoupling through the metal films into the OSC devices. In cooperation with Heliatek GmbH, highly efficient semitransparent tandem OSC in module size could be created by employing optimised light incoupling layers and Al surfactants.

Three diindenoperylene derivatives are introduced as green donor materials. Although these experiments are still at a very early stage, OSC are fabricated that exhibit very high fill factors of over 76 % and voltages of 1 V. Devices with bulk heterojunctions of such perylene derivatives and the fullerene C₆₀ can be influenced by substrate heating during film deposition. This opens the possibility of using thicker bulk heterojunctions in order to achieve higher photocurrents without high losses of photovoltage or fill factor.

Contents

Publications	ix
1 Introduction	1
2 Motivation	5
2.1 Why photovoltaics?	5
2.2 Why organic photovoltaics?	8
2.3 Why transparent top contacts?	9
3 Transparent electrode materials	11
3.1 Important characteristics and criteria	11
3.2 Transparent conductive oxides	13
3.3 Alternatives to TCOs	15
3.4 Evaluation of thin metal layers as electrode	16
4 Fundamentals	19
4.1 Organic semiconductors	19
4.1.1 Molecular orbitals and conjugated π -systems	20
4.1.2 Intermolecular interactions	22
4.1.3 Excitation processes and energy transfer	24
4.1.4 Exciton types	26
4.2 Solar cells	30
4.2.1 pn junction and single diode equation	30
4.2.2 Quasi-Fermi level splitting	32
4.2.3 Basic solar cell characteristics	34
4.2.4 Illumination spectra and spectral mismatch	35

4.3	Organic solar cells	38
4.3.1	Photon absorption and conversion	39
4.3.2	The <i>p-i-n</i> concept	42
4.3.3	Donor/acceptor interfaces and bulk heterojunctions	44
4.3.4	Exciton blocking layers	45
4.3.5	Tandem devices	46
4.4	Optics	48
4.4.1	Permittivity and optical constants	48
4.4.2	Absorption	49
4.4.3	Interference and thin-film optics	51
4.4.4	Transfer matrix method	53
4.5	Metals	54
4.5.1	Film growth	54
4.5.2	Drude model	57
4.5.3	Metal layers below the coalescence threshold	59
5	Experimental	63
5.1	Vacuum thermal evaporation	63
5.1.1	Molecular doping	64
5.1.2	UFO1	65
5.1.3	Lesker tools	65
5.1.4	Encapsulation	67
5.2	Materials	68
5.2.1	Absorbers materials	69
5.2.2	Transporter and dopants	71
5.2.3	Capping materials	73
5.2.4	Electrode materials	73
5.2.5	Substrates	74
5.3	Wet chemical processes	76
5.3.1	Spin coating of PEDOT:PSS films	76
5.3.2	Structuring of PEDOT:PSS films	76
5.4	Layer and device characterisation	78
5.4.1	Optical and electrical characterisation	78

5.4.2	Current voltage characterization	80
5.4.3	External quantum efficiency	81
5.4.4	Morphological characterization	81
5.5	Optical simulations	82
6	Results: PEDOT:PSS	85
6.1	Spincoating	85
6.2	Basic characterisation	87
6.3	Photovoltaic devices	89
6.4	Conclusion	97
7	Results: Thin metal top contacts	99
7.1	Preliminary studies	99
7.2	Metal and capping layer variation	101
7.3	Optimisation of Al/Ag metal contacts	106
7.4	Morphology of thin metal films	114
7.5	Influence of the light incoupling layer	123
7.5.1	Optical studies of single layers	123
7.5.2	OSC with different capping layer thicknesses	125
7.6	NTCDA as alternative ETL	137
7.7	Semitransparent OSC	141
7.8	Semitransparent tandem OSC	148
8	Results: Diindenoperylene derivatives as green donors	151
8.1	Preparatory work	151
8.2	B2-PH4-DIP	153
8.3	P4-Ph4-DIP	157
8.3.1	Single solar cells	157
8.3.2	Heated BHJ devices with P4-Ph4-DIP	163
8.4	Bu4-Ph4-DIP	171
9	Conclusion and Outlook	175
	Bibliography	179