

# Energieforschungsprogramm

## Publizierbarer Endbericht

**Programmsteuerung:**

Klima- und Energiefonds

**Programmabwicklung:**

Österreichische Forschungsförderungsgesellschaft mbH (FFG)

### Endbericht

erstellt am

27/11/2021

## Projekttitle: Alternative Akzeptoren für effiziente organische Solarzelle

Projektnummer: 865072

# Energieforschungsprogramm - 4. Ausschreibung

Klima- und Energiefonds des Bundes – Abwicklung durch die Österreichische  
Forschungsförderungsgesellschaft FFG

Ausschreibung	4. Ausschreibung Energieforschungsprogramm
Projektstart	01/08/2018
Projektende	31/08/2021
Gesamtprojektdauer (in Monaten)	37 Monate
ProjektnehmerIn (Institution)	Johannes Kepler Universität Linz
AnsprechpartnerIn	Dr. Markus Scharber
Postadresse	Altenbergerstrasse 69
Telefon	0732-2468-5845
Fax	
E-mail	Markus_clark.scharber@jku.at
Website	www.jku.at

# Alternative Akzeptoren für effiziente organische Solarzelle

Untertitel (überschreiben)

**AutorInnen:**

**Dr. Markus Scharber**

**Dr. Thomas Rath**

**Univ. Prof. Dr. Gregor Trimmel**

## 1 Inhaltsverzeichnis

1	Inhaltsverzeichnis .....	4
2	Einleitung .....	5
2.1	Einordnung in das Programm und Schwerpunkte des Projekts .....	6
3	Inhaltliche Darstellung.....	8
3.1	Problemstellung .....	8
3.2	Zusammensetzung des Konsortiums .....	9
3.3	Aufgabenverteilung und Arbeitsprogramm .....	10
3.3.1	Design und Synthese von Akzeptoren.....	10
3.3.2	Charakterisierung der Akzeptoren und Mischungen von Akzeptoren mit ausgewählten Donoren .....	10
3.3.3	Herstellung und detaillierte Untersuchung von organischen Solarzellen mit den synthetisierten Akzeptoren .....	11
3.3.4	Entwicklung eines Struktur-Eigenschaft Zusammenhangs und einer Erklärung der Wirkungsweise der untersuchten Akzeptoren .....	12
4	Ergebnisse und Schlussfolgerungen.....	12
4.1	Erste Generation der Perylen-Derivate.....	13
4.2	Zweite Generation der Perylen-Derivate.....	17
4.3	Organische Solarzellen mit alternative Akzeptoren .....	20
4.4	Das Wirkungsgradlimit organischer Solarzellen.....	21
4.5	D18:PMI-FF-PMI als Absorber mit weiter Bandlücke in Stapelsolarzellen .....	22
4.6	Neueste internationale Entwicklunge auf dem Gebiet der NFAs.....	23
4.7	Weitere Abschlussarbeiten und Veröffentlichungen.....	24
5	Ausblick und Empfehlungen.....	27
6	Literaturverzeichnis.....	28
7	Anhang .....	28
8	Kontaktdaten.....	29

## 2 Einleitung

Die Photovoltaik ist auf Grund ihres Potentials eine der wichtigsten erneuerbaren Energiequellen. Derzeit werden intensive Bemühungen unternommen, kostengünstige und effiziente Solarzellen zu entwickeln. In letzter Zeit haben besonders organische Solarzellen dabei an Bedeutung gewonnen, insbesondere aufgrund ihrer einfachen Verarbeitbarkeit und dem geringen Energieaufwand für ihre Herstellung, zum Beispiel durch Druck- oder Rolle-zu-Rolle-Verfahren. Sowohl Industrie als auch Forschungseinrichtungen haben daher große Anstrengungen unternommen, um leistungsstarke, dünne und flexible organische Solarzellen bei gleichzeitiger Kosten- und Energiereduktion zu entwickeln.

Die hauptsächlich untersuchten sogenannten Polymer-Fulleren-Solarzellen weisen bereits Wirkungsgrade von bis zu 12 Prozent auf. Jedoch hat diese Technologie einige Nachteile. Fulleren-basierte Akzeptoren sind teuer und zeigen eine eher geringe optische Absorption im sichtbaren und infraroten Bereich des Sonnenspektrums. Weitere limitierende Prozesse sind verschiedene Rekombinationsverluste, die zu einer niedrigen Klemmenspannung und damit zu einem moderaten maximalen Wirkungsgrad führen. Dieser ist inhärent auf 13-15 % begrenzt. Die erst kürzlich entdeckten Nicht-Fulleren-Akzeptoren (NFA) könnten diese Nachteile beheben. In den ersten Experimenten wurden deutlich geringere Spannungsverluste beobachtet. Auch wurden bereits Wirkungsgrade  $>10\%$  berichtet.

Im Rahmen des ALTAFOS-Projekts wurden neue NFAs basierend auf dem Farbstoff Perylen synthetisiert und detailliert charakterisiert. In einem zweiten Schritt wurden die Moleküle in organischen Solarzellen getestet. Nach einer intensiven Prozessoptimierung konnten organische Solarzellen mit einem Wirkungsgrad von 6 % hergestellt werden. Die Bauteile zeigen eine sehr hohe Klemmenspannung  $> 1.4\text{ V}$ . Die hohe Bandlücke der Absorberschicht begrenzt den Wirkungsgrad der Solarzellen. Weiters wurden im Laufe des Projekts organische Solarzelle mit unterschiedlichen Absorber-Schichten auf ihre Verluste untersucht. Dabei hat sich gezeigt, dass hocheffiziente Solarzellen mit Nicht-Fulleren-Akzeptoren die geringsten Klemmenspannungsverluste und die stärkste Elektrolumineszenz zeigen. Die Resultate zeigen einmal mehr die wichtige Rolle der strahlenden Rekombination von Ladungsträgern in Solarzellen. Basierend auf diesen Erkenntnissen können in Zukunft Bauteile mit geringerem Klemmenspannungsverlust und mit deutlich höherem Wirkungsgrad ( $> 20\%$ ) entwickelt und damit die Technologie zum Durchbruch geführt werden. Ein Erfolg dieser Technologie hätte aufgrund der energieschonenden und kostengünstigen Herstellungsmöglichkeiten ein enormes  $\text{CO}_2$ -Reduktionspotential bei der Energiegewinnung.

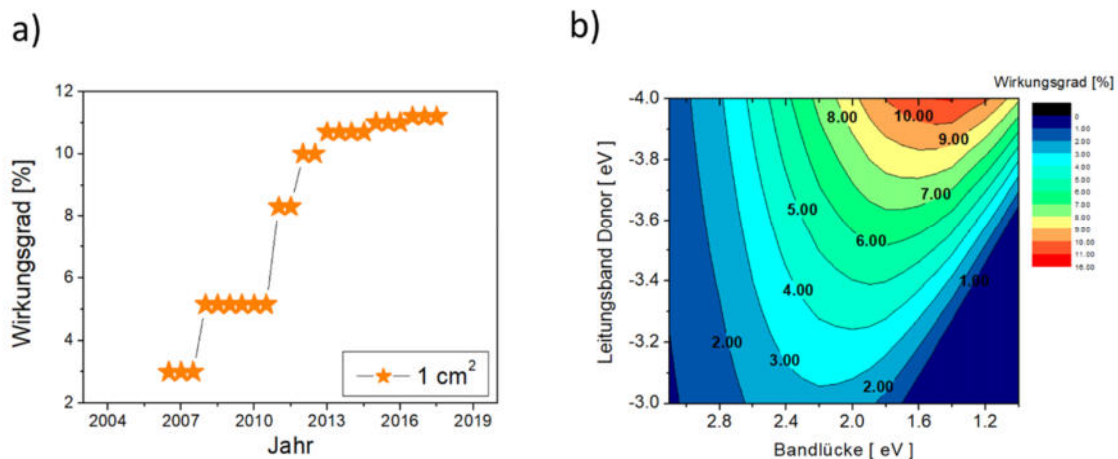
Das Projekt ALTAFOS wurde in Rahmen der Energieforschung (e!MISSION), 4. Ausschreibung 2017 eingereicht und gefördert. Der Projektverlauf stand stark im Einfluss der COVID Pandemie. Dadurch konnte viele geplante Aktivitäten nur in reduzierter Form durchgeführt werden. Die Dissemination der Projektergebnisse im Rahmen von Konferenzen und Workshops war leider nur sehr eingeschränkt möglich. Auch der fehlende persönlich Kontakt und die Einschränkungen für gemeinsame Arbeiten im Labor oder für längere Besuche beim Konsortialpartner haben die Durchführung des Projekts erschwert. Nichtsdestotrotz

konnte das Arbeitsprogramm weitgehend abgearbeitet und die Projektziele im Großen und Ganzen erreicht werden.

## 2.1 Einordnung in das Programm und Schwerpunkte des Projekts

Die Folgen des Klimawandels, verursacht durch den ständig steigenden Verbrauch an fossilen Energieträgern, und die Notwendigkeit der CO<sub>2</sub>-Einsparung bei der Energiegewinnung führen in der Gesellschaft immer mehr zu einem Umdenken in Richtung einer erneuerbaren, umweltschonender Energieversorgung. Photovoltaik (PV) zählt neben der Stromerzeugung durch Windkraftanlagen und Wasserkraftwerken zu den Zukunftstechnologien. Schon heute sind in Österreich Photovoltaikanlagen mit einer kumulierten Leistung von über 2000 MW<sub>p</sub> installiert [1] und der Ausbau wird sich in den nächsten Jahren noch verstärken. Dabei sind zunehmend Technologien von Interesse, die auf Grund ihres Aufbaus einen flexibleren Einsatz im Vergleich zur derzeit hauptsächlich eingesetzten Siliziumphotovoltaik ermöglichen. Die Erforschung neuer, sowie die Verbesserung bestehender flexibler PV-Technologien muss daher ein Schwerpunkt der F&E-Aktivitäten sein. Einerseits müssen effiziente neue Absorber für flexible Solarzellen erforscht und andererseits neue, umweltschonende Herstellungsverfahren entwickelt werden. Seit einiger Zeit werden Solarzellen mit organischen Absorber-Schichten intensiv untersucht. Diese Technologie besitzt gegenüber anderen einige wichtige Vorteile:

- 1) Mögliche und einfache Realisierung flexibler Solarzellen mit geringem Gewicht - wichtig für mobile Anwendungen aller Art
- 2) Deutlich geringere Herstellungskosten verglichen mit konventioneller PV durch kontinuierliche Rolle-zu-Rolle-Prozesse und einer Herstellung mit einfachen Drucktechniken
- 3) Sehr kurze „energetische Amortisationszeiten“ von nur 3 bis 6 Monaten und ein niedriger Carbon-Fußabdruck [2]



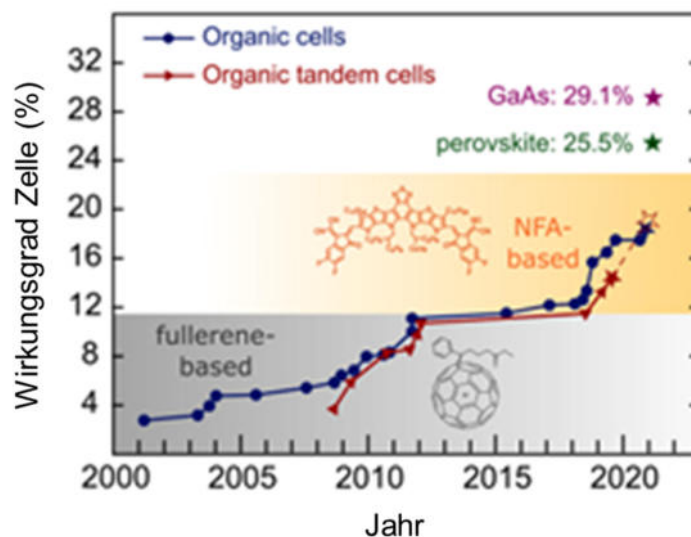
**Abbildung 1:** a) Entwicklung des zertifizierten Wirkungsgrads von organischen Solarzellen mit einer Fläche  $\geq 1 \text{ cm}^2$ ; b) Wirkungsgrad-Limit von Fulleren-basierten OPVs.

## Energieforschungsprogramm - 4. Ausschreibung

Klima- und Energiefonds des Bundes – Abwicklung durch die Österreichische Forschungsförderungsgesellschaft FFG

Typische organische Solarzellen (OPV) basieren auf einer Absorberschicht, die aus einer Mischung aus einem halbleitenden Polymer (Elektron-Donor) und einem Fulleren-Derivat (Elektron-Akzeptor) zusammengesetzt ist. Mit diesem Ansatz konnten bis heute Wirkungsgrade von ~11 % realisiert werden. Abbildung 1a zeigt die Entwicklung des OPV Wirkungsgrads in den letzten Jahren. Nach einem rasanten Anstieg zwischen 2008 und 2013 stagniert der Wert für den höchsten Wirkungsgrad. Theoretische Untersuchungen und einige experimentelle Resultate lassen vermuten, dass der Wirkungsgrad organischer Solarzellen mit Fullerenen mit ca. 12-13 % begrenzt ist, d.h. die erreichten Werte schon sehr nahe am Maximum liegen (Abbildung 1b). **Diese Wirkungsgrade sind für großflächige Anwendungen zu gering und es bedarf alternativer Ansätze um organische Solarzellen weiter zu entwickeln.**

Seit längerer Zeit gibt es Versuche, alternative Akzeptoren, oft auch „nicht Fulleren Akzeptor“ (non-fullerene acceptors, NFA) genannt, für organische Solarzellen zu entwickeln. Oberstes Ziel ist dabei eine Reduktion der Klemmenspannungsverluste und damit eine Erhöhung des Wirkungsgrads. Aber erst seit kurzem gibt es Berichte über einen erfolgreichen Einsatz dieser Fulleren-freien, alternativen Akzeptoren. Für diese Solarzellen konnten deutlich kleinere Klemmenspannungsverluste gezeigt werden und damit enorme Steigerungen des Wirkungsgrads erreicht werden. In Abbildung 2 ist die Entwicklung des Wirkungsgrads der organischen Solarzellen zusammengefasst [3].



**Abbildung 2:** Entwicklung des Zellwirkungsgrads von organischen Solarzellen.

Erst durch den Einsatz der neuen Akzeptoren konnte die Zell-Effizienz deutlich über 12 % gesteigert werden.

## 3 Inhaltliche Darstellung

### 3.1 Problemstellung

Im Projektantrag wurden die Problemstellung und die Ziele des Forschungsvorhabens wie folgt definiert:

#### **Welche grundlegenden Materialeigenschaften der alternativen n-Typ Halbleiter führen zum beobachteten Verhalten der organischen Solarzellen?**

Es ist von früheren Arbeiten an organischen Solarzellen mit Fullerenen bekannt, dass die elektrischen und optischen Eigenschaften und die Position der elektronischen Energieniveaus der Molekülorbitale einen entscheidenden Einfluss auf die Funktionsweise der resultierenden Absorberschicht haben. Zusätzlich spielt die chemische Struktur eine wichtige Rolle für die ideale Anordnung der Halbleitermaterialien auf der Nanoskala. Ähnliche Einflüsse werden auch für neue Halbleitermaterialien erwartet. Ein detailliertes Verständnis wird bei der Entwicklung neuer Halbleiter und bei der Optimierung bestehender Materialien sehr wichtig sein.

#### **Welche grundlegenden Mechanismen können diesen geringen Spannungsverlust erklären?**

Eine Fragestellung hierbei ist, inwieweit die Permittivität (auch Dielektrizitätszahl) der Materialien eine Rolle spielt bzw. spielen kann. Mehrere Autoren betonen, dass bei Erhöhung der spezifischen Permittivität, ein drastischer Anstieg des Wirkungsgrads zu erwarten sei. Dies ist überaus anschaulich von L. J. A. Koster et al. [4] berechnet worden. Sie konnten zeigen, dass sich mit einer Erhöhung der Permittivität von  $\epsilon_r = 3$ , ein für konjugierte Polymere üblicher Wert, auf einen Wert von  $\epsilon_r = 10$ , die Effizienz von Solarzellen mit 12 % auf 22 % steigern ließe, wenn alle anderen Parameter dabei gleich bleiben. Eine weitere Fragestellung ist, welchen Einfluss die elektronische Struktur des angeregten Zustands und die Bildung eines Ladungstransferzustands auf die Licht-induzierte Ladungsgenerierung, auf die strahlende Rekombination und die erzielte Klemmenspannung haben.

#### **Ziele von ALTAFOS waren**

- **die grundlegende Funktionsweise von NFAs besser zu verstehen.**

Dafür wurden Modell-Akzeptoren mit ausgewählten Eigenschaften synthetisiert und detailliert charakterisiert. Das Design der Moleküle wurde mit quantenchemischen Simulationen unterstützt. Es wurden Mischungen der Modell-Akzeptoren mit ausgewählten Donormaterialien hergestellt und charakterisiert. Mit diesen Mischungen werden Solarzellen hergestellt und detailliert untersucht.



- **die Etablierung einer Struktur-Eigenschaften-Relation für die untersuchten Akzeptoren.**

Dafür wurden die gesammelten experimentellen Material- und Bauteildaten analysiert und Trends abgeleitet.

- **die Entwicklung von Designrichtlinien für neue Akzeptoren.**

Durch eine Generalisierung der vorhandenen experimentellen Daten und der erarbeiteten Struktur-Eigenschaft-Relation konnten allgemeinere Richtlinien für das Design von Akzeptoren abgeleitet werden.

- **den Weg für eine neue Generation von organischen Solarzellen mit Wirkungsgraden von 15+% zu ebnen.**

Durch ein besseres Verständnis und den erarbeiteten Designrichtlinien wird es in Zukunft möglich sein, effizientere Solarzellen mit deutlich höheren Wirkungsgraden herzustellen. Diese Effizienzsteigerung wurde während der Laufzeit des Projekts von mehreren Arbeitsgruppen erreicht und sogar übertroffen [5,6]. Auch dem Projektteam ist unter Verwendung von kommerziell erhältlichen Halbleitermaterialien die Demonstration einer organischen Solarzelle mit einem Wirkungsgrad von >16 % gelungen [7].

### 3.2 Zusammensetzung des Konsortiums

Das ALTAFOS-Konsortium besteht aus dem Linzer Institut für Organische Solarzellen (LIOS) an der Johannes Kepler Universität und dem Institut für Chemische Technologie von Materialien (ICTM) an der Technischen Universität Graz. Die Expertisen der beiden Institute zeigen eine starke Komplementarität und sind ideal für die Durchführung von Forschungsvorhaben zum Thema organische Photovoltaik.

Das **Linzer Institut für Organische Solarzellen** beschäftigt sich bereits seit mehr als 20 Jahren an der Entwicklung effizienter organischer und hybrider Solarzellen. In diesem Zeitraum wurden viele grundlegende Arbeiten zum Thema „Organische Solarzellen auf Donor-Akzeptor-Basis“ publiziert und auch Solarzellen mit besonders hohem Wirkungsgrad beschrieben. Das LIOS verfügt über Labors für die Herstellung organischer und hybrider Solarzellen und kleiner Solarmodule. Ein Glove-Box System erlaubt ein vollständiges Prozessieren in inerter Atmosphäre. Es sind verschiedene Beschichtungsmethoden verfügbar, mit denen druckähnliche Verfahren nachgestellt werden können. Das LIOS verfügt über diverse elektrische und optische Methoden, die für die Untersuchung von Halbleiterschichten verwendet werden. Die exakte Bestimmung des Solarzellen-Wirkungsgrads ist mittels Solarsimulator und der Messungen der spektralen externen Quanteneffizienz (EQE) möglich. Zusätzlich verfügt der Antragsteller auch über die Möglichkeit, die EQE nahe der Bandlücke der Solarzellen mit hoher Genauigkeit zu untersuchen. Für die Messungen der Elektrolumineszenz steht eine Monochromator mit CCD-Kamera und eine spektral kalibrierte

Photodiode zur Verfügung. Für die Ladungstransport-Messungen wurde ein CELIV-Experiment aufgebaut und es kann ein Spitzenmessplatz für die Charakterisierung von Transistoren verwendet werden. Mit einem Closed-Cycle Helium-Kryostat können Messungen bei verschiedenen Temperaturen durchgeführt werden. Im Rahmen des Projekts stehen ein Atomkraftmikroskop, ein Elektronenmikroskop, ein Profilometer und verschiedene optische Mikroskope zur Verfügung. In einem eigenen Chemielabor werden die Halbleiterlösungen formuliert.

Das **Institut für Chemische Technologie von Materialien** hat langjährige Erfahrung auf dem Gebiet der Synthese und Charakterisierung von funktionellen Materialien im Bereich der organischen Elektronik, sowie langjährige Erfahrung bei der Herstellung und Charakterisierung von Polymer-basierten Solarzellen. Zahlreiche Publikationen konnten in diesem Bereich veröffentlicht werden. Am ICTM stehen modernst und voll ausgestatteten Chemielabors inkl. Schutzgasausrüstung, stehen Gloveboxen, modernen NMR-, FTIR und UV-Vis Spektroskope, Massenspektrometer (GC / MS und MALDI-TOF), thermischen Analysengeräte (Thermogravimetrie (TGA), Differentiale Wärmekalorimetrie (DSC), Dynamisch mechanische Thermoanalyse (DMTA), Mikrowellenreaktoren, Ausrüstung für präparative und analytischen Chromatographie- Methoden, sowie Impedanzspektrometer zur Bestimmung der Permittivität zur Verfügung.

### 3.3 Aufgabenverteilung und Arbeitsprogramm

#### 3.3.1 Design und Synthese von Akzeptoren

Für das Design und die Synthese der Akzeptoren war das ICTM verantwortlich. Es wurden gängige, kommerziell erhältliche NFAs hinsichtlich ihrer optischen und elektrischen Eigenschaften untersucht. Parallel dazu wurden Akzeptoren mit ähnlicher chemischer Struktur aber unterschiedlichen optischen und elektronischen Eigenschaften und Akzeptoren mit verschiedenen Seitengruppen, um die Löslichkeit und das Stapelverhalten der Moleküle zu ändern, synthetisiert. Durch quantenchemische Simulationen wurde die Auswahl der vielversprechendsten chemischen Strukturen unterstützt. Diese Berechnungen lieferten in den meisten Fällen zwar nur qualitative Aussagen, zusammen mit der „chemischen Intuition“ konnten aber höchst relevante Zusammenhänge für den Auswahlprozess deduziert werden. Weitere Aspekte für das Design und die Synthese der neuen Akzeptoren waren eine einfache Herstellung und eine große Anzahl von Variationsmöglichkeiten der ausgewählten Molekülstruktur.

#### 3.3.2 Charakterisierung der Akzeptoren und Mischungen von Akzeptoren mit ausgewählten Donoren

Diese Aufgabe wurde von beiden Konsortialpartnern bearbeitet. Eine detaillierte Charakterisierung der hergestellten Materialien ist für die Aufklärung der Wirkungsweise der

neuen Akzeptoren sehr wichtig. Es wurden daher verschiedenste Materialeigenschaften untersucht. Neben der optischen Transmission und der Fluoreszenz sind die Lage der Energieniveaus und die Beweglichkeit der Ladungsträger (im Akzeptor-Fall besonders der Elektronen) von hoher Relevanz. Die Position der Bandlagen wurde mittels Cyclovoltammetrie (CV) und elektrochemische Spannungs-Spektroskopie (EVS) ermittelt. Während CV einen groben Überblick über die Redox-Eigenschaften des Materials liefert, erlaubt EVS eine genaue Bestimmung der Redox-Potentiale. Als weiterer Parameter wurde durch Kapazitätsmessungen in Metall-Isolator-Metall-Strukturen mittels Impedanzspektrometrie die Permittivität (Dielektrizitätskonstante) der neuen Akzeptoren ermittelt. Ladungsträger-Beweglichkeiten in reinen Akzeptorschichten wurden mit Hilfe eines Feldeffekt-Transistor Aufbaus gemessen. Für einige Materialien wurde die Ladungsträger-Mobilität mittels raumladungsbegrenzten Strommessungen (SCLC) bestimmt.

Weiters ist die Verteilung der Donor und Akzeptor Moleküle (Nano-Morphologie) in OPV Absorber-Schichten von großem Interesse. Mit Röntgenstreuung wurde die Kristallinität der Donor-Akzeptor Mischung bestimmt. Hochauflösende Mikroskopie wurde eingesetzt um die Morphologie direkt zu beobachten. Weiters wurde mittels detaillierten Fluoreszenz-Messungen die mikroskopische Verteilung der Moleküle und die Rekombinationskinetik studiert. Photoinduzierte Absorption (UV-VIS-IR Bereich) und optische Messungen in hohen Magnetfeldern wurden für die Untersuchung des Ladungstransfers und die Identifizierung von weiteren angeregten Zuständen verwendet (z.B. Triplet-Zustand).

### **3.3.3 Herstellung und detaillierte Untersuchung von organischen Solarzellen mit den synthetisierten Akzeptoren**

Diese Aufgabe wurde von beiden Konsortialpartner bearbeitet.

Kleinflächige Solarzellen wurden mittels Spin- oder Blade-Coating hergestellt. Es wurden unterschiedliche Bauteil-Architekturen und Transport für die Untersuchung der neuen organischen Halbleiter verwendet. Zusätzlich kamen verschiedene Methoden für die Prozess-Optimierung zum Einsatz. Neben Lösungsmittel-Additiven wurden Temperatur- oder Lösungsmitteldampf-Behandlungen für die Optimierung der photoaktiven Schicht untersucht. Falls notwendig wurden die fertigen Bauteile mit einem Epoxidharz und einem Deckglas verkapselt. Diese Option wurde besonders für Solarzellen angewandt, die länger unter Beleuchtung und Umgebungsbedingungen untersucht wurden.

Die Untersuchung der Bauteile erfolgte typischerweise in folgender Sequenz:

- Messung der Strom-Spannungskurve ohne Beleuchtung bzw. mit Beleuchtung (100 mW/cm<sup>2</sup>, AM1.5G)
- Bestimmung der externen Quanteneffizienz mit und ohne Hintergrundbeleuchtung
- Bestimmung der externen Quanteneffizienz nahe der Bandlücke
- Messung der spektralen Elektrolumineszenz und der Quantenausbeute der Elektrolumineszenz bei unterschiedlichen Betriebsspannungen

Mit diesen Messungen können die Klemmenspannungsverluste sehr gut abgeschätzt werden. Außerdem erhält man den Wirkungsgrad des Bauteils.

In einigen Fällen wurde auch die Impedanz der Solarzellen unter Beleuchtung untersucht. Dafür kam die sogenannte intensitätsmodulierte Photospannungsspektroskopie (IMVS) für die Bestimmung der Lebenszeit der photoinduzierten Ladungsträger unter Klemmenspannungsbedingungen zum Einsatz.

### **3.3.4 Entwicklung eines Struktur-Eigenschaft Zusammenhangs und einer Erklärung der Wirkungsweise der untersuchten Akzeptoren**

Diese Aufgabe wurde vom LIOS bearbeitet.

Mit den im Projekt gesammelten Daten wurden versucht ein qualitatives Modells und in einem zweiten Schritt ein quantitatives Modell für den Solarzellenwirkungsgrad zu entwickelt. Damit sollten mittels Bauteil- und Materialparametern das Wirkungsgrad-Limit von organischen Solarzellen voraussagt werden können. Mit aussagekräftigen Modellen könnte die Synthese von neuen Akzeptoren gezielt vorangetrieben und der Wirkungsgrad von OPV schneller gesteigert werden.

## **4 Ergebnisse und Schlussfolgerungen**

In diesem Abschnitt werden die wichtigsten Ergebnisse des Forschungsvorhabens zusammengefasst. Diese sind zum Zeitpunkt der Berichtserstellung bereits publiziert oder liegen als Publikationsentwürfe oder fertige Manuskripte vor, die in naher Zukunft in peer-reviewed Journalen eingereicht werden sollten. Es handelt sich dabei um folgende Manuskripte:

### **Bereits publiziert:**

Stefan Weber, Jakob Hofinger, Thomas Rath, Matiss Reinfelds, David Pfeifer, Sergey M. Borisov, Peter Fürk, Heinz Amenitsch, Markus C. Scharber, Gregor Trimmel

### **Comparison of Fluorene, Silafluorene and Carbazol as Linkers in Perylene Monoimide Based Non-Fullerene Acceptors**

Materials Advances, 2020, 1, 2095-2106

Bettina Schweda, Matiss Reinfelds, Petra Hofstadler, Gregor Trimmel, Thomas Rath

### **Recent Progress in the Design of Fused-Ring Non-Fullerene Acceptors - Relations between Molecular Structure and Optical, Electronic, and Photovoltaic Properties**

ACS Applied Energy Materials, 2021, 4, 11899-11981

J. Hofinger, C. Putz, F. Mayr, K. Gugujonovic, D. Wielend, M. C. Scharber

**Understanding the low voltage losses in high-performance non-fullerene acceptor-based organic solar cells**

Materials Advances, 2021, 2, 4291–4302

**Eingereicht oder in Vorbereitung**

Jakob Hofinger, Stefan Weber, Felix Mayr, Anna Jodlbauer, Matiss Reinfelds, Thomas Rath, Gregor Trimmel, Markus C. Scharber

**Wide-bandgap organic solar cells with a novel perylene-based non-fullerene acceptor enabling open-circuit voltages beyond 1.4 V.**

Under Review, Journal of Materials Chemistry A

Bettina Schweda et al.

**Acceptor-donor-acceptor (A-D-A) dyes based on perylene monoimide, a structure-properties relation study,** in Vorbereitung

Jakob Hofinger et al.

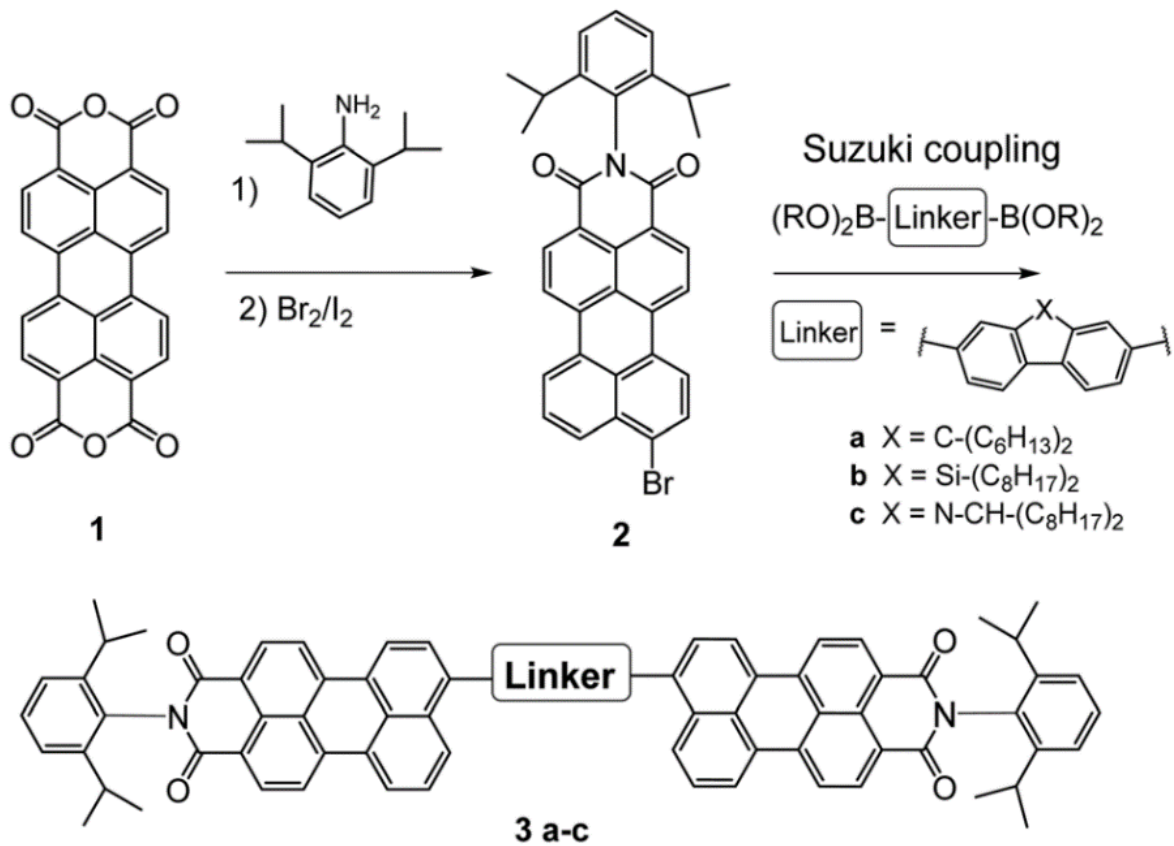
**Novel interlayer for solution processed low work function cathodes for high performance OPVs,** in Vorbereitung

### 4.1 Erste Generation der Perylen-Derivate

Im Rahmen des Projekts wurden eine Vielzahl von Nicht-Fulleren Akzeptoren auf der Basis von Perylen-Dimeren hergestellt [8]. Quantenchemische Rechnungen zeigen, dass die elektronische Struktur der Moleküle durch geschickte Wahl des Linkers oder durch Substitution leicht verändert werden kann. Ein vereinfachtes Synthese-Schema ist in Abbildung 3 gezeigt.

# Energieforschungsprogramm - 4. Ausschreibung

Klima- und Energiefonds des Bundes – Abwicklung durch die Österreichische Forschungsförderungsgesellschaft FFG

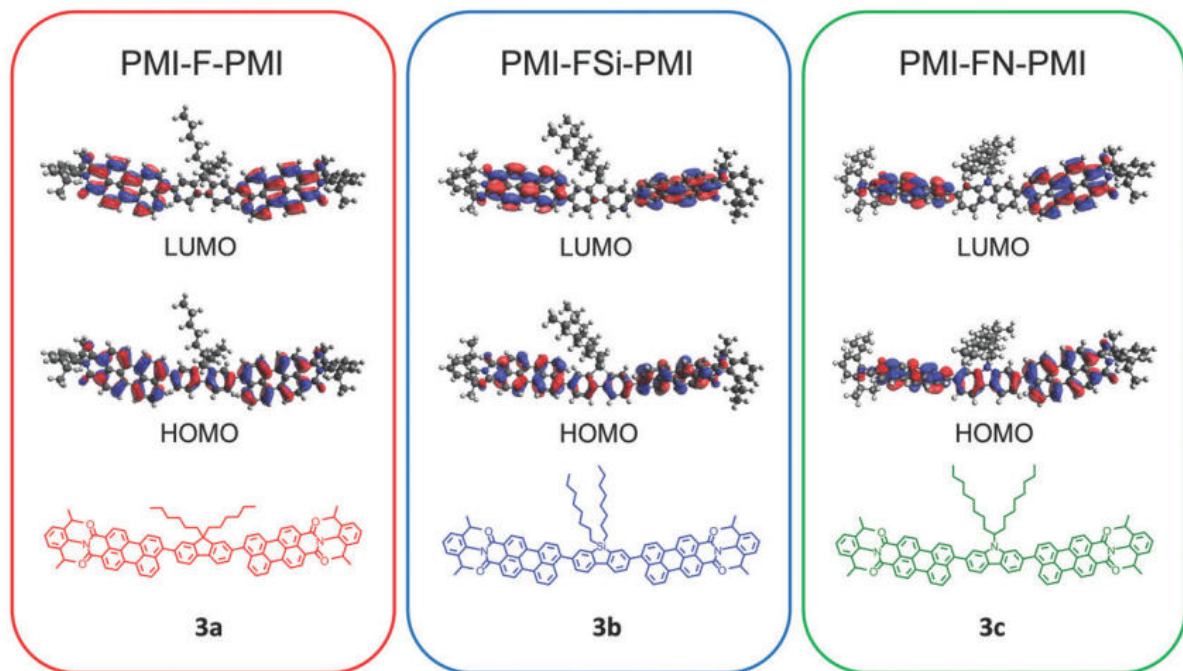


**Abbildung 3:** Synthese von Perylen-Linker-Perylen Nicht-Fulleren-Akzeptoren [8].

In Abbildung 4 sind die detaillierten Molekülstrukturen und die Elektronenverteilung im Grundzustand und angeregten Zustand gezeigt. Die Dichtefunktionaltheorie-Rechnungen liefern einen interessanten Einblick in die Rolle der Linker-Einheit. Im Grundzustand (HOMO) findet man für alle Moleküle eine gleichmäßige Elektronendichteverteilung.

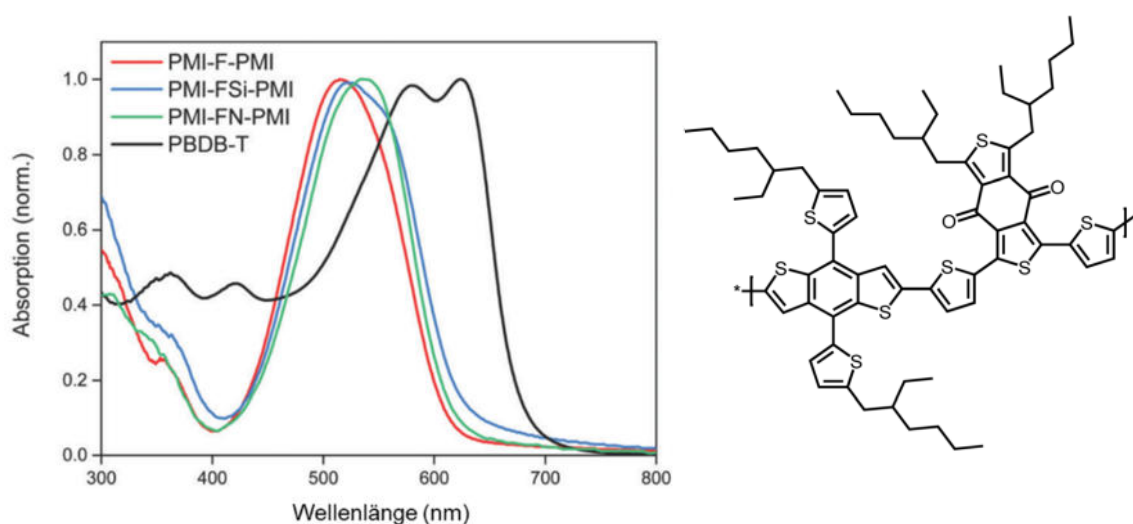
## Energieforschungsprogramm - 4. Ausschreibung

Klima- und Energiefonds des Bundes – Abwicklung durch die Österreichische Forschungsförderungsgesellschaft FFG



**Abbildung 4:** Chemische Struktur und Elektronendichteverteilung im HOMO (High Occupied Molecular Orbital) und LUMO (Lowest Unoccupied Molecular Orbital) [8].

Der angeregte Zustand (LUMO) wird von den beiden Perylen-Einheiten dominiert. Die Elektronendichte am Linker-Segment ist in allen Fällen sehr klein. Man erwartet daher sehr ähnliche optische Eigenschaften der hergestellten Moleküle. Die optische Absorption von dünnen Perylen-Linker-Perylen Filmen ist in Abbildung 5 gezeigt.



**Abbildung 5:** Optische Absorption von dünnen Schichten auf einem Glassubstrat und die chemische Struktur des Polymer-Donors PBDB-T [8].

Zusätzlich sind in Abbildung die chemische Struktur des organischen Halbleiters PBDB-T und die Absorption eines dünnen PBDB-T Films gezeigt. In den weiteren Experimenten werden



# Energieforschungsprogramm - 4. Ausschreibung

Klima- und Energiefonds des Bundes – Abwicklung durch die Österreichische Forschungsförderungsgesellschaft FFG

Mischungen aus PBDB-T und den hergestellten Perlyen-Linker-Perylen Molekülen als Absorber in organischen Solarzellen untersucht.

Die Nanostruktur der Absorber-Schicht (Anordnung der Donor- und Akzeptor-Moleküle) ist für organische Solarzellen von besonderer Bedeutung. Daher wurden sowohl Röntgen-Streuexperimente (GIWAXS = Grazing-Incidence Wide-Angle X-ray Scattering) und Untersuchungen mit einem Atomkraftmikroskop (AFM = Atomic Force Microscopy) durchgeführt. Die GIWAXS Daten zeigen eine ähnliche Kristallinität der verschiedenen Donor-Akzeptor Mischungen. Die AFM-Studien zeigen, dass die Oberflächen-Morphologie und Rauigkeit für die verschiedenen Akzeptoren durchaus unterschiedlich sind.

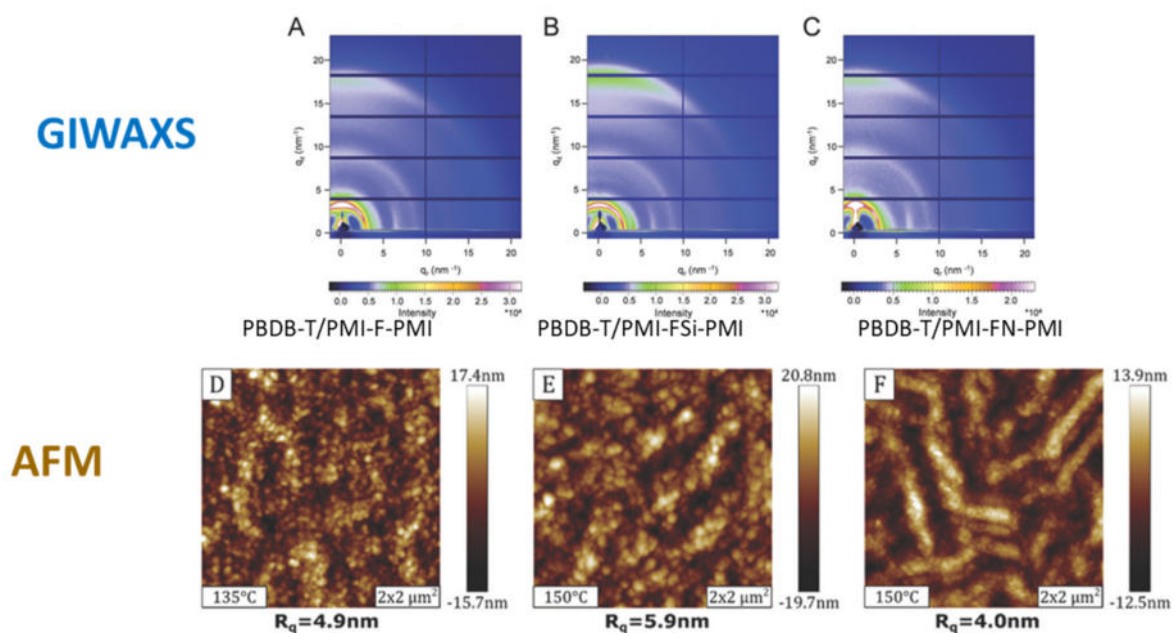


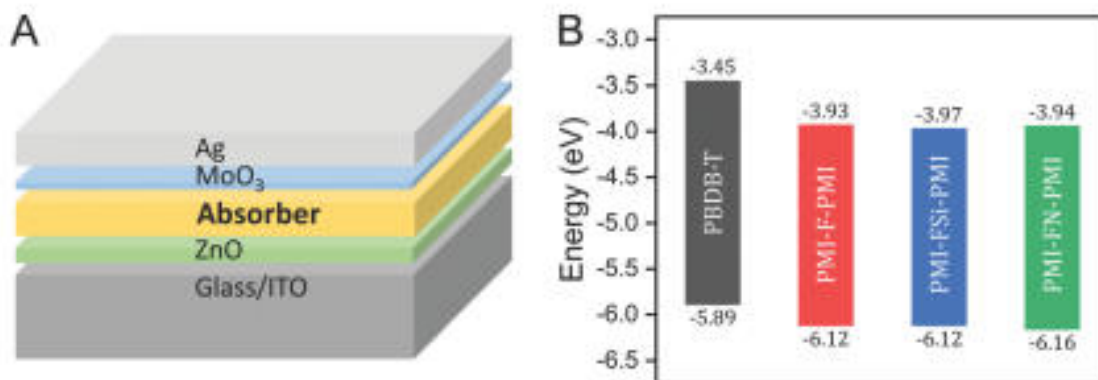
Abbildung 6: GIWAXS und AFM von verschiedenen Donor/Akzeptor-Mischungen [8].

Die verschiedenen Akzeptoren wurden auch in organischen Solarzellen getestet. Die Optimierung der Herstellung ist sehr aufwendig und es müssen viele Bauteile mit unterschiedlichen Schichtdicken, Donor-Akzeptor-Verhältnisse, Beschichtungsparameter und Bauteil-Architekturen hergestellt und getestet werden. Abbildung 7 A zeigt die verwendete Bauteilstruktur. In Abbildung 7 B sind die Energieniveaus der eingesetzten Materialien zusammengefasst. Der Unterschied zwischen den drei Nicht-Fulleren-Akzeptoren ist ebenfalls sehr gering. D.h. der Linker hat sehr wenig Einfluss auf die elektronische Struktur der Akzeptoren. Dieser kann daher sehr einfach für die Änderung der Löslichkeit oder der Geometrie des Moleküls verwendet werden.



# Energieforschungsprogramm - 4. Ausschreibung

Klima- und Energiefonds des Bundes – Abwicklung durch die Österreichische Forschungsförderungsgesellschaft FFG



**Abbildung 7:** A) Bauteilarchitektur und b) Energieniveaus der untersuchten Materialien [8].

In der Tabelle 1 sind die Bauteilparameter zusammengefasst.

**Tabelle 1:** Bauteilparameter von verschiedenen Solarzellen mit PBDB-T/PMI-Linker-PMI Mischungen.

Material	Annealing Temperatur (°C)	Schichtdicke (nm)	Voc (V)	Jsc (mA/cm <sup>2</sup> )	FF (%)	Wirkungsgrad (%)
PMI-F-PMI	-	93	1.1	7.04	45.4	3.48
	135	85	1.1	8.94	52.9	5.16
PMI-FSi-PMI	-	88	1.08	6.58	43.3	3.06
	150	78	1.14	8.55	53.4	5.16
PMI-FN-PMI	-	80	1.08	8.17	39.6	3.46
	150	78	1.06	10.18	48	5.16

Eine thermische Behandlung des Bauteils führt zu einer Verbesserung des Wirkungsgrads. Nach einer längeren Optimierung erzielen alle Nicht-Fulleren-Akzeptoren einen Wirkungsgrad >5%.

Zusammengefasst zeigt der Perylen-Linker-Perylen Ansatz das vielversprechende Potential der Materialklasse. Weitere Modifikationen der Linker-Einheiten können für die Änderung der optischen und elektrischen Eigenschaften eingesetzt werden.

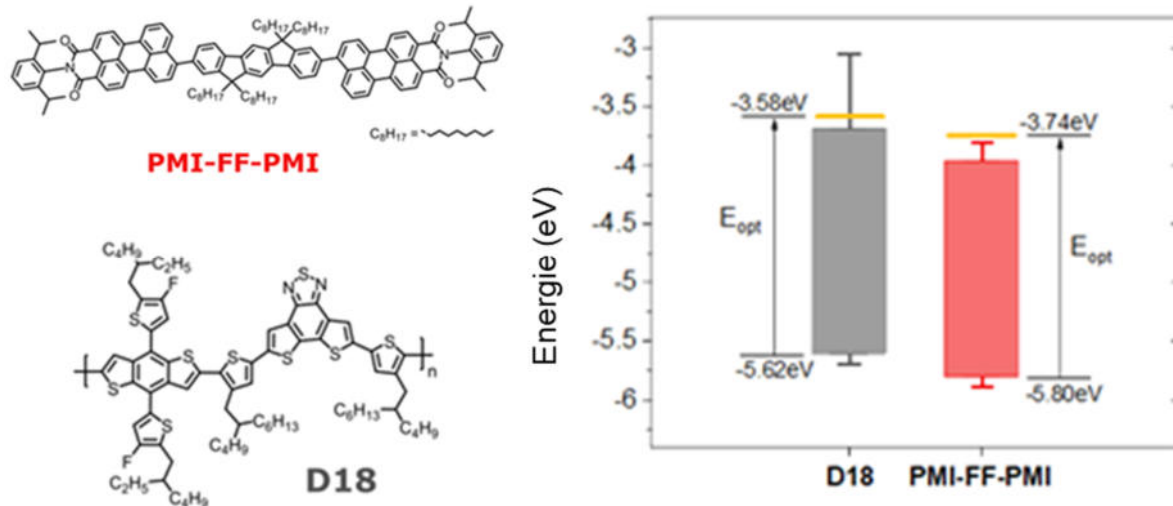
## 4.2 Zweite Generation der Perylen-Derivate

Aus der zweiten Generation der hergestellten Perylen-Dimere hat sich bei ersten Untersuchungen das Molekül PMI-FF-PMI als besonders vielversprechend herausgestellt [9]. Die chemische Struktur und die Energieniveaus sind in Abbildung 8 gezeigt. Zusätzlich sind

# Energieforschungsprogramm - 4. Ausschreibung

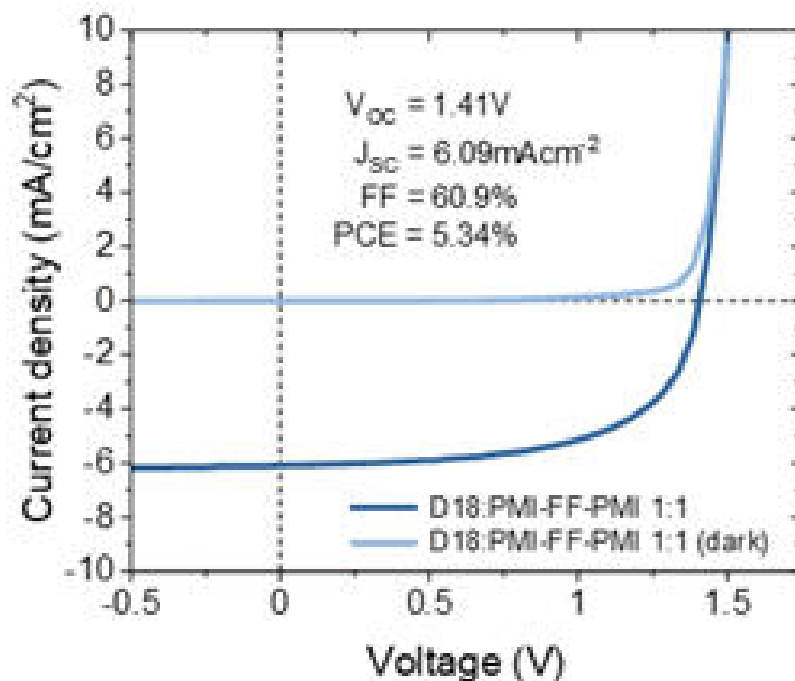
Klima- und Energiefonds des Bundes – Abwicklung durch die Österreichische Forschungsförderungsgesellschaft FFG

die chemische Struktur des Donor-Polymers D18 und dessen Energieniveaus gezeigt. Mischungen aus D18 und PMI-FF-PMI wurden für die Bauteiloptimierung verwendet.



**Abbildung 8:** Chemische Struktur des Akzeptors PMI-FF-PMI, des Donor-Polymers D18 und die Energieniveaus der beiden Materialien [9].

Für PMI-FF-PMI findet man eine deutliche Verschiebung der Energieniveaus. Dies wurde auch von quantenchemischen Rechnungen so vorhergesagt. Die Optimierung des Solarzellewirkungsgrads wurde wieder ähnlich wie für die erste Generation durchgeführt. Die Strom-Spannungskurve eines sehr guten Bauteils ist in Abbildung 9 gezeigt. Im Inset sind die Bauteilparameter zusammengefasst.



**Abbildung 9:** Strom-Spannungskurve einer D18:PMI-FF-PMI Solarzelle mit einem Wirkungsgrad von 5.34 % [9].

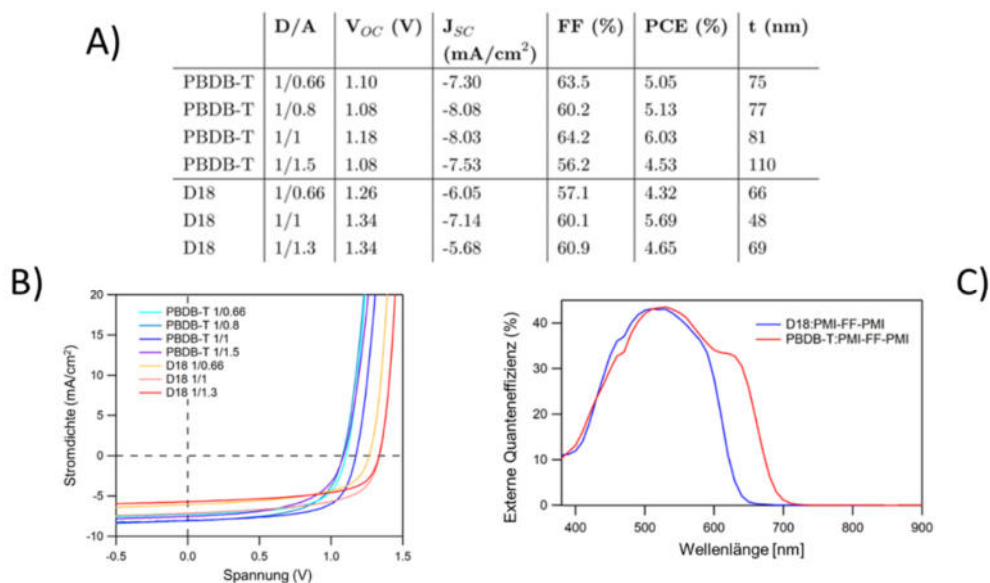
## Energieforschungsprogramm - 4. Ausschreibung

Klima- und Energiefonds des Bundes – Abwicklung durch die Österreichische Forschungsförderungsgesellschaft FFG

Besonders auffällig ist die hohe Klemmenspannung (1.41 V). Leider konnte trotz intensiver Anstrengungen der Kurzschlussstrom nicht entscheidend erhöht werden. Eine leichte Verbesserung konnte durch eine Änderung der Bauteilarchitektur erreicht werden. Durch einen Ersatz des Kalzium/Aluminium Kontakts auf der Bauteiloberseite durch eine Polyethylenimin-Schicht mit einem Silberkontakt konnte der Wirkungsgrad auf ~6 % erhöht werden. Ähnlich hohe Wirkungsgrade können auch mit alternative Donor-Polymeren und anderen Bauteilarchitekturen erzielt werden. Dafür wurden PMI-FF-PMI basierte Solarzellen mit PBDB-T (Abbildung 5) als Donor in der invertieren Architektur (Abbildung 7 A) hergestellt und deren photovoltaische Eigenschaften mit D18:PMI-FF-PMI basierten Solarzellen verglichen.

Abbildung 10 A und B zeigen die charakteristischen Solarzellenparameter bzw. die Strom-Spannungskennlinien von typischen Solarzellen basierend auf den Polymeren PBDB-T und D18 sowie PMI-FF-PMI in verschiedenen Donor:Akzeptor-Verhältnissen. Es ist auffallend, dass die mit PBDB-T hergestellten Solarzellen durchwegs höhere Photoströme aufweisen, was auf die geringere Bandlücke von PBDB-T und daraus folgend der breiteren Absorption der Absorberschicht zurückzuführen ist. Dies ist auch im EQE Spektrum in Abbildung 10 C gut zu erkennen. Hier ist der Onset der Photostromgenerierung beim D18:PMI-FF-PMI Absorber deutlich zu geringeren Wellenlängen verschoben.

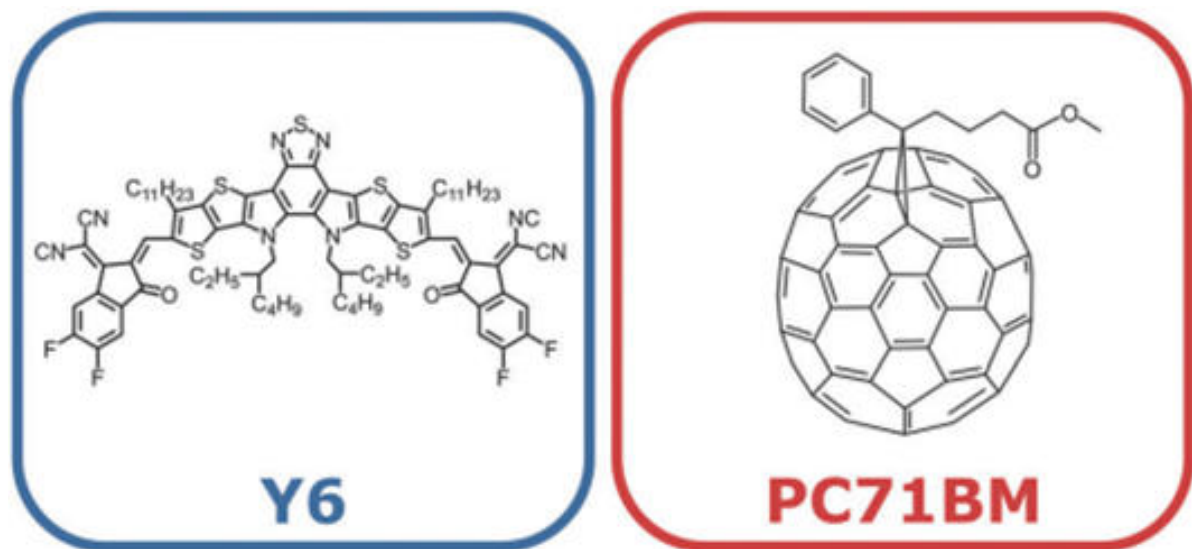
Die Photospannungen sind jedoch bei den D18:PMI-FF-PMI Solarzellen deutlich höher, was am niedriger liegenden HOMO-Energieniveau von D18 (im Vergleich zu PBDB-T) liegt. Bezüglich der Donor:Akzeptor-Verhältnisse wurde herausgefunden, dass Donor:Akzeptor Gewichtsverhältnisse von 1:1 die besten Wirkungsgrade lieferten. Der höchste Wirkungsgrad von 6.03% in diesem Vergleich wurde mit einer PBDB-T:PMI-FF-PMI Solarzelle erreicht. Diese Solarzelle wies einen Photostrom von 8.0 mA/cm<sup>2</sup>, eine Photospannung von 1.18 V und einen Füllfaktor von 64.2% auf.



**Abbildung 10:** A) Charakteristische Solarzellenparameter und B) Strom-Spannungskennlinien der PBDB-T/PMI-FF-PMI und D18/PMI-FF-PMI basierten Solarzellen hergestellt mit verschiedenen Donor:Akzeptor Verhältnissen und C) EQE Spektren von PBDB-T/PMI-FF-PMI und D18/PMI-FF-PMI Solarzellen mit einem Donor:Akzeptor Verhältnis von 1:1.

## 4.3 Organische Solarzellen mit alternative Akzeptoren

Im Rahmen des Projekts wurden auch Solarzellen mit dem Fulleren-Akzeptor PCBM und mit dem Akzeptor Y6 hergestellt [7]. Nach einer intensiven Optimierung wurden die Verluste in den Bauteilen analysiert und ein Model für die Rekombinationsprozesse erstellt. Die chemischen Strukturen sind in Abbildung 11 gezeigt.



**Abbildung 11:** Chemische Strukturen von den Akzeptoren Y6 und PC<sub>71</sub>BM [7].

Kombiniert mit dem Donor-Polymer D18 lassen sich sehr effiziente Solarzellen herstellen. In der Tabelle 2 sind die Bauteilparameter zusammengefasst. D18-Y6 Solarzellen zeigten in den Experimenten einen Wirkungsgrad von 15-16 %. D18-PCBM Solarzellen erreichen 8-9 %.

Tabelle 2: Bauteilparameter typischer D18:Y6 und D18:PC<sub>71</sub>BM Solarzellen

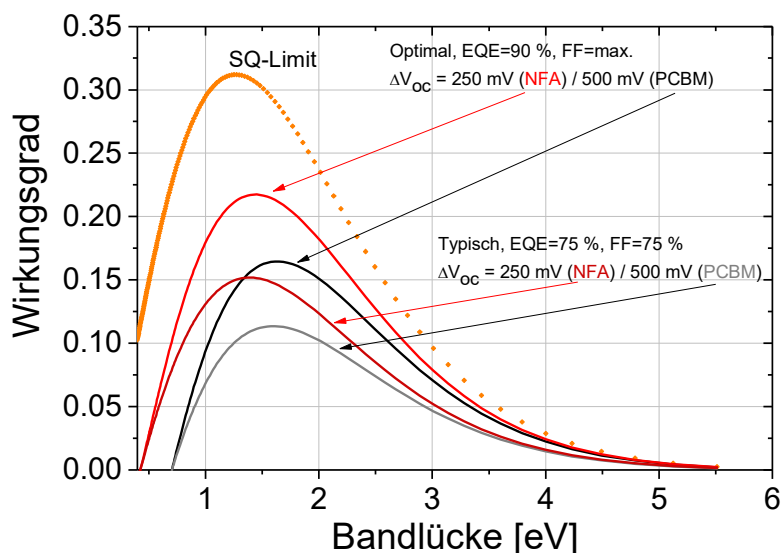
	V <sub>oc</sub> (V)	J <sub>sc</sub> (mA cm <sup>-2</sup> )	FF	Eff (%)
D18:Y6	0.87 ± 0.01	24.5 ± 0.92	70.5 ± 0.6	15.2 ± 0.5
D18:PC <sub>71</sub> BM	0.98 ± 0.01	11.3 ± 0.5	71.4 ± 1.5	8.0 ± 0.5

Der Unterschied in den Wirkungsgraden ergibt sich vor allem durch die unterschiedlichen Kurzschlussströme. Während Y6 eine starke Absorptionsbande im IR-Bereich besitzt, zeigt PCBM eine sehr schwache Absorption in diesem Bereich. Für eine detaillierte Verlustanalyse wurden die Bauteile D18:PMI-FF-PMI, D18:PCBM und D18:Y6 detailliert charakterisiert. Von besonderem Interesse war dabei die strahlende/nicht strahlende Rekombination von Ladungsträgern in diesen Bauteilen. Mit thermodynamischen Argumenten kann man nämlich zeigen, dass die geringsten Verluste / der höchste Wirkungsgrad in Solarzellen mit ausschließlich strahlender Rekombination von Ladungsträgern auftreten. Bei der Analyse der drei genannten Solarzellentypen sind große Unterschiede im Rekombinationsverhalten gefunden worden. Daraus ergeben sich die Verluste in der Klemmenspannung und es konnte auch ein Modell für den Wirkungsgrad als Funktion der Bandlücke errechnet werden. Das

Modell zeigt, dass Solarzellen mit State-of-the-art Nicht-Fulleren-Akzeptoren und einer Bandlücke von  $\sim 1.4$  eV Wirkungsgrade im Bereich von 15 – 21 % erreichen können. Für Solarzellen mit einem Fulleren-Akzeptor reduziert sich das Potential auf 11-16 %. Die im Projekt durchgeführten Arbeiten zeigen sehr deutlich die Vorteile von Nicht-Fulleren-Absorbem. Mit einer weiteren Verbesserung der Materialien könnten organische Solarzellen in der nahen Zukunft den Wirkungsgrad von konventionellen Silizium-Solarzellen erreichen.

## 4.4 Das Wirkungsgradlimit organischer Solarzellen

Im Rahmen des Projekts wurde nach Vorhersagemodellen für die Effizienz von Solarzellen gesucht. Dabei sollten sowohl der Wirkungsgrad als auch die ideale Bandlücke des Absorbers bestimmt werden. Von den verschiedenen untersuchten Modellen erscheint eine Erweiterung des Shockley-Queisser-Modells am erfolgversprechendsten. Dabei wurde zuerst der maximale Wirkungsgrad bei solarer Beleuchtung bestimmt. Für die Berechnung wurde das Sonnenspektrum durch die äquivalente Schwarzkörperstrahlung ersetzt um die Rechnungen zu vereinfachen. In einem zweiten Schritt wurden die typischen Verluste in das Modell einbezogen (Klemmenspannung, optische Verluste, ...) und die Rechnungen für verschiedene Werte wiederholt. Die Ergebnisse sind in der Abbildung 12 zusammengefasst.



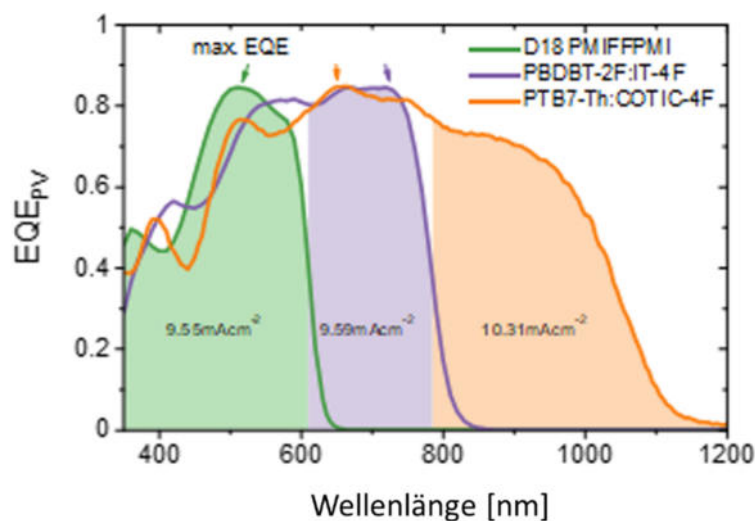
**Abbildung 12:** Wirkungsgrad in Abhängigkeit von der Bandlücke.

Die orange Kurve zeigt den Wirkungsgrad als Funktion der Bandlücke nach Shockley und Queisser. Der maximale Wirkungsgrad einer idealen Solarzelle liegt zwischen 30 und 35 %. Für die Nicht-Fulleren-Systeme wurde ein Klemmenspannungsverlust von 0.25 V angesetzt. Das entspricht den beobachteten Verlusten für die D18:Y6 Solarzellen. Für die Fulleren-basierten Solarzellen wurde analog 0.5 V Verlust angenommen. In der Abbildung 12 sind zwei Szenarien dargestellt. Im optimalen Fall sind die optischen Verluste sehr gering (EQE=90%)

und es gibt keine elektrischen Verluste (d.h. der elektrische Füllfaktor (FF) ist maximal). Im typischen Fall beträgt die EQE und der FF jeweils 75 %. Das Modell sagt für Nicht-Fulleren-Systeme Wirkungsgrade zwischen 15 und 22 % voraus. Die ideale Bandlücke liegt zwischen 1.4 und 1.45 eV. Für Fulleren-Solarzellen liegen die Wirkungsgrade zwischen 11 und 16 % mit idealen Bandlücken bei 1.58 bis 1.65 eV. Die Ergebnisse sind in sehr guter Übereinstimmung mit kürzlich publizierten experimentellen Resultaten [6]. Yong Cui et al. [6] beschreiben eine organische Solarzelle mit einem Nicht-Fulleren-Akzeptor mit einer Bandlücke von ~1.4 eV mit einem Wirkungsgrad von 19 %.

### 4.5 D18:PMI-FF-PMI als Absorber mit weiter Bandlücke in Stapelsolarzellen

Die Berechnungen in 4.4. zeigen, dass die untersuchten D18:PMI-FF-PMI Mischungen eine suboptimale Bandlücke für Solarzellen mit einer einzelnen Absorber-Schicht haben. Allerdings kann die hohe Klemmenspannung der Bauteile für einen Einsatz in einer Tandem- oder Stapelzelle interessant sein. Dabei werden Solarzellen mit unterschiedlichen Bandlücken aufeinander aufgebracht und es kann damit ein größerer Teil der Solarstrahlung mit geringeren Verlusten absorbiert werden. Mit anorganischen Halbleitern funktioniert dieser Ansatz außergewöhnlich gut. Kombinationen aus Germanium und verschiedenen Gallium-Arsen-Legierungen erreichen Wirkungsgrade > 40 % [3]. Ausgehend von den Bauteilparametern für D18:PMI-FF-PMI wurde andere OPVs mit passenden Bandlücken identifiziert und für die Rechnungen verwendet. Dabei stellt sich heraus, dass eine Stapelzelle mit den Absorbieren D18:PMI-FF-PMI, PBDBT-2F:IT-4F (Wirkungsgrad ca. 12 %) [10] und PTB7-Th:COTIC-4F (Wirkungsgrad ca. 8 %) [10] einen Wirkungsgrad von über 20 % erreichen könnte (Abbildung 13).



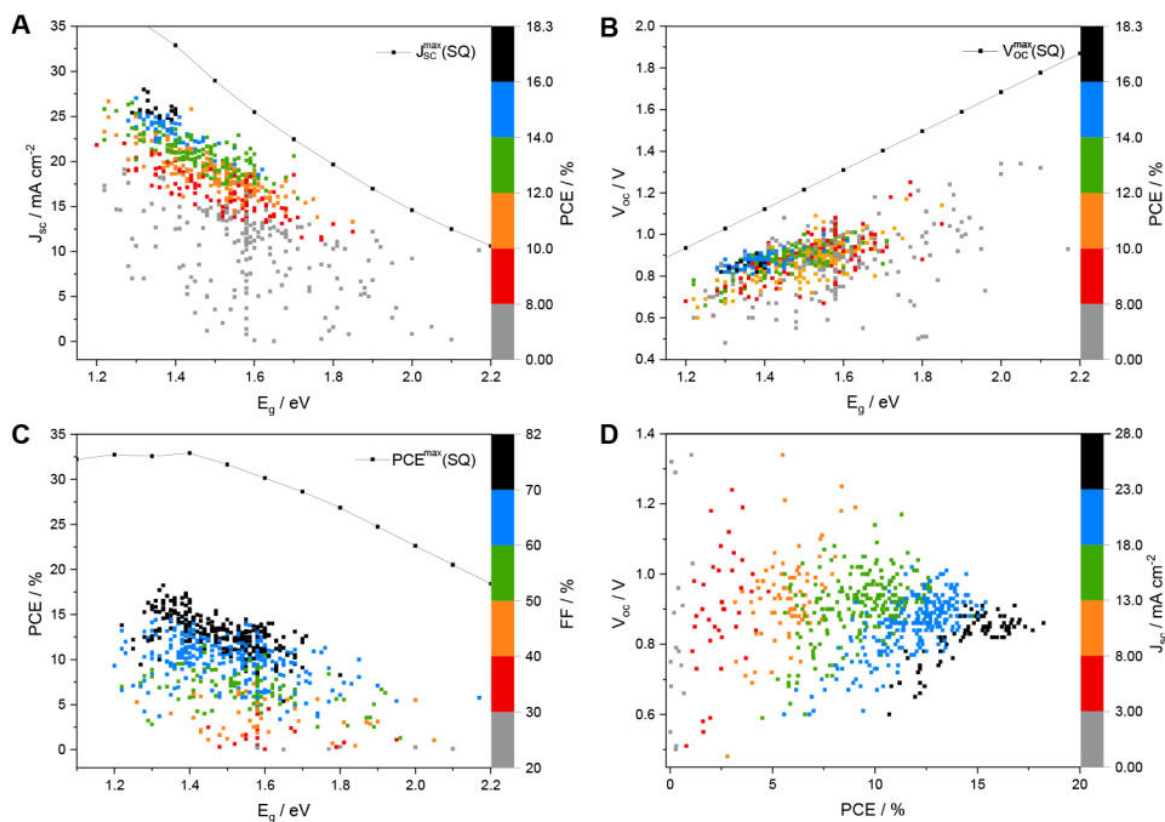
**Abbildung 13:** Simulierte externe Quanteneffizienz-Spektren einer organischen Stapelzelle.



Allerdings muss gesagt werden, dass die Herstellung von Stapelzellen sehr aufwendig und schwierig ist. Zusätzlich sind Stapelzellen durch den erhöhten Materialeinsatz deutlich teurer. Die durchgeführten Simulationsrechnungen zeigen (Abbildung 12), dass optimierte Solarzellen mit einer Absorber-Schicht und dem Einsatz von Nicht-Fullerene-Akzeptoren ganz ähnlich Wirkungsgrade erreichen können. Eine Herstellung von einer Stapelsolarzelle mit den drei erwähnten Absorbieren erscheint daher nur mäßig attraktiv.

## 4.6 Neueste internationale Entwicklungen auf dem Gebiet der NFAs

Aufgrund der Erfolge der letzten Jahre erfuhr das gesamte Feld der organischen Photovoltaik einen enormen Aufschwung und in zahlreichen Studien wurden die NFAs weiterentwickelt. Wie wir selbst im Projekt zeigen konnten, sind mit diesen Materialien ohne Problem Wirkungsgrade deutlich über 15 % möglich. Im Rahmen des Projektes wurde daher auch genau die neueste Literatur verfolgt und die Entwicklungen in den Jahren 2018 bis 2020 wurden in einem Übersichtsartikel zusammengefasst [11].



**Abbildung 14:** Übersicht über die Solarzellenkennzahlen der neuen NFAs: A) Vergleich der Bandlücke mit dem erzielten Kurzschlussstrom, B) Vergleich der Bandlücke mit der Photospannung, C) Vergleich der Bandlücke mit dem Wirkungsgrad (die schwarze Linie repräsentiert die Werte für das Shockley Queisser Limit), D: Korrelation des Wirkungsgrades mit der Photospannung (aus B. Schweda et al. [11]).

Die besten organischen Solarzellen erreichen derzeit 80 % der Klemmenspannung ( $V_{oc}$ ) und des Kurzschlussstroms ( $I_{sc}$ ) im Vergleich zu den maximalen theoretischen Werten aus dem Shockley-Queisser-Limit, wie in Abbildung 14 zu erkennen ist. Zusammen mit einem FF von bis zu 80 % ergibt das PCEs von ca. 50 % der maximal erreichbaren Werte. Damit sind sie zwar noch weiter vom theoretischen Limit entfernt als andere PV-Technologien. Allerdings konnten schon Wirkungsgrade von über 18 % realisiert werden [5,6].

### 4.7 Weitere Abschlussarbeiten und Veröffentlichungen

Zusätzlich zu den oben aufgelisteten Veröffentlichungen wurden in – trotz Corona – Ergebnisse des Projektes auf internationalen und nationalen Tagungen vorgestellt.

#### Präsentationen auf Konferenzen:

##### **Eingeladener Vortrag:**

- Markus Scharber  
Understanding the low voltage losses in high-performance non-fullerene acceptor-based organic solar cells  
HOPE-PV 2021, IPCP RAS, Chernogolovka, 22-25 November 2021

##### **Vorträge:**

- Stefan Weber, Matíss Reinfelds, Gregor Trimmel, New Non-Fullerene Acceptors for Organic Solar Cells, 18. Österreichische Chemietage Linz, Linz, 26.09.2019 (Vortrag)
- Matíss Reinfelds, Stefan Weber, Aileen, Sauer Moser, Sanela Alibegić, Rene Nauschnig, Bettina Schweda, Gregor Trimmel. Rylene Dyes As Acceptors In Organic Solar Cells, 18. Österreichische Chemietage Linz, Linz, 26.09.2019 (Vortrag)

##### **Posters:**

- Bettina Schweda, Matíss Reinfelds, Stefan Weber, Gregor Trimmel, Synthesis of Perylene-Monoimide-Phenylene-Perylene-Monoimide Acceptors and their Application in Non-Fullerene Solar Cells, 18. Österreichische Chemietage Linz, Linz, 24.09.2019 (Poster)
- Aileen Sauer Moser, Rene Nauschnig, Matíss Reinfelds, Gregor Trimmel, Perylene Diimide Derivates for Organic Photovoltaics, 18. Österreichische Chemietage Linz, Linz, 24.09.2019 (Poster)
- Sanela Alibegić, Matíss Reinfelds, Gregor Trimmel, Synthesis of perylene based acceptor materials for organic solar cells, 18. Österreichische Chemietage Linz, Linz, 24.09.2019 (Poster)
- Stefan Weber, Matíss Reinfelds, Rene Nauschnig, Bettina Schweda, Sanela Alibegić, Aileen Sauer Moser, Peter Fürk, Gregor Trimmel, Perylene Derivatives as Non



## Energieforschungsprogramm - 4. Ausschreibung

Klima- und Energiefonds des Bundes – Abwicklung durch die Österreichische  
Forschungsförderungsgesellschaft FFG

Fullerene Acceptors for Organic Solar Cells, 17. Österreichische Photovoltaik Tagung  
und 10. Stromspeicher Tagung, Wien, 05.11.2019

- Peter Fürk, Stefan Weber, Matiss Reinfelds, Gregor Trimmel, Synthesis of Perylene-Linker-Perylene Triads and their Application in Organic Solar Cells, Central European Conference on Photochemistry (CECP 2020), Bad Hofgastein, 09.02.2020 (Poster)
- Matiss Reinfelds, Bettina Schweda, Georg Bäuml, Gregor Trimmel  
Perylene Monoimide Based Acceptor-Donor-Acceptor Dyes as Non-Fullerene Acceptors  
27. Lecture Conference on Photochemistry, 14.-15. September 2020, Video Conference
- Bettina Schweda, Matiss Reinfelds, Georg Bäuml, Thomas Rath, Gregor Trimmel  
Perylene-containing wide band gap non-fullerene acceptors for the application in organic photovoltaics  
Österreichische Fachtagung für Photovoltaik und Stromspeicherung, 2.-3. Oktober 2020, Wien
- Matiss Reinfelds, Bettina Schweda, Georg Bäuml, Gregor Trimmel  
Rylene diimide dyes for non-fullerene acceptors: Investigation of optical and chemical properties  
International Conference on Hybrid and Organic Photovoltaics (HOPV 2021), 24.-28. Mai 2021, Online Conference
- Bettina Schweda, Aileen Sauer Moser, Michael Haas, Matiss Reinfelds, Thomas Rath, Gregor Trimmel  
Silicon-containing Perylene-based Electron Acceptors for Organic Solar Cells  
Österreichische Fachtagung für Photovoltaik und Stromspeicherung, 13.-14. Oktober 2021, Wien
- Stefan Weber, Thomas Rath, Rene Nauschnig, Gregor Trimmel  
Functionalized perylene Derivatives as non-fullerene acceptors for organic solar cells”  
International Conference on Hybrid and Organic Photovoltaics (HOPV 2019) 12.-15. Mai 2019, Rom, Italien).

Projektideen und Projektergebnisse wurden von Anfang an für die Lehre und institutseigene Forschung weiterverwendet und es gelang mehrere Master- und BachelorstudentInnen zu gewinnen, die ihre Abschlussarbeiten in diesem Projekt durchführten bzw. durchführen. Eine Dissertation wurde bereits abgeschlossen, eine weitere (Jakob Hofinger) wird in Kürze abgeschlossen sein.

### Dissertation

- Stefan Weber, Emerging Photovoltaic Technologies – From Lead-Free Tin and Antimony Halide Perovskites to New Non-Fullerene Acceptors for Solar Cells, Graz University of Technology 2020

# Energieforschungsprogramm - 4. Ausschreibung

Klima- und Energiefonds des Bundes – Abwicklung durch die Österreichische  
Forschungsförderungsgesellschaft FFG

## Masterarbeiten

- Anna Jodlbauer, Fabrication and characterization of organic solar cells with perylene-based acceptor materials, Graz University of Technology 2021
- Birgit Kammlander, Synthesis and Characterization of Perylene-Thiophene-Perylene Non-Fullerene Acceptors and its Application in Organic Photovoltaics, Graz University of Technology 2020
- Felix Mayr: Optical characterization of Organic and Perovskite Semiconductors by Photothermal Deflection Spectroscopy, Johannes Kepler Universität, 2020
- Rene Nauschnig; Synthesis and characterization of non-fullerene acceptor materials for the application in organic solar cells Graz University of Technology 2020
- Bettina Schweda; Phenylene Linked Perylene Monoimide based Acceptors for the Application in Organic Solar Cells Graz University of Technology 2019
- Sanela Alibegić; Synthesis of thiophene and phenyle linked perylenemonoimides as acceptor materials and investigation towards photovoltaic properties Graz University of Technology 2019
- Aileen Sauer Moser; Perylenediimide Derivatives as Acceptor Material for Organic Photovoltaics Graz University of Technology 2019
- Peter Fürk; Enhancing the Permittivity of Perylene-Linker-Perylene Acceptors for Application in Organic Solar Cells Graz University of Technology 2020
- Felix Mayr: Optical characterization of Organic and Perovskite Semiconductors by Photothermal Deflection Spectroscopy Johannes Kepler Universität, 2020

## Bachelorarbeiten

- Georg Bäumel; Perylenderivate als Akzeptormaterial für organische Photovoltaik Zellen
- Christoph Huber: Herstellung organischer Solarzellen basierend auf Perylenmonoimid mit unterschiedlichen Elektronendonoren
- Elisabeth Leeb: Herstellung von lumineszierenden Nanopartikel)
- Theresa Mautz Synthesis and characterization of perylene linked small molecule acceptors and their application in organic solar cells

### **5 Ausblick und Empfehlungen**

Der Wirkungsgrad einer Solarzelle ist mit Abstand der wichtigste Parameter für den Erfolg der Technologie. Über viele Jahre konnten mit organischen Solarzellen nur Wirkungsgrade im Bereich von 9-11 % erzielt werden. Erst durch die Entwicklung von neuartigen Materialien, die als Fulleren-Ersatz verwendet werden, konnten effizientere organische Solarzellen realisiert werden.

Die im Projekt durchgeführten Arbeiten zeigen sehr schön das hohe Potential von Nicht-Fulleren-Akzeptoren in organischen Solarzellen. Gleichzeitig deuten die Ergebnisse auf ein weiteres Verbesserungspotential hin. Dadurch würde wahrscheinlich die Technologie noch interessanter werden und die Kommerzialisierung von organischen Solarzellen könnte sich noch weiter beschleunigen.

Für die zukünftige Entwicklung wären weiter verstärkte Investitionen in die Forschung und Entwicklung von organischen Solarzellen sehr wichtig. Allerdings sollte die akademische Forschung stark in diese Initiativen eingebunden sein. Für ein fundamentales Verständnis der Technologie und deren Potential ist die Grundlagenforschung besonders wichtig.

Grundsätzlich könnte auch mit einer Forschungsunterstützung für die Entwicklung von Nischenprodukten die organische Photovoltaik unterstützt werden. Aviation, Raumfahrt, Mobilität, Internet of Things und ähnliche Anwendungen könnten ideale Märkte für erste Produkte bieten. Dabei könnten die mechanischen und elastischen Eigenschaften der organischen Solarzellen von entscheidendem Vorteil sein.

### 6 Literaturverzeichnis

- [1] P. Biermayr, C. Dißauer, M. Eberl, M. Enigl, H. Fechner, B. Fürnsinn, M. Jaksch-Fliegenschnee, K. Leonhartsberger, S. Moidl, E. Prem, C. Schmidl, C. Strasser, W. Weiss, M. Wittmann, P. Wonisch, E. Wopienka Innovative Energietechnologien in Österreich Marktentwicklung 2020, 2021
- [2] S. B. Darling, et al., RSC Advances, 2013, 3, 17633-17648
- [3] <https://www.nrel.gov/pv/cell-efficiency.html>
- [4] L. J. A. Koster, et al., Advanced Energy Materials, 2012, 2, 1246
- [5] Q. Liu, et al., *Sci. Bull.* **65**, 272–275 (2020)
- [6] Y. Cui, et al. *Adv. Mater.* **33**, 2102420 (2021)
- [7] J. Hofinger, et al., *Mater. Adv.* **2**, 4291–4302 (2021)
- [8] S. Weber, et al., *Mater. Adv.* **1**, 2095–2106 (2020).
- [9] J. Hofinger, et al., submitted
- [10] X.-K. Chen, et al, *Nat Energy*, 2021, **6**, 799–806
- [11] B. Schweda, et al. ACS Applied Energy Materials, 2021, 4, 11899-11981

### 7 Anhang

# Energieforschungsprogramm - 4. Ausschreibung

Klima- und Energiefonds des Bundes – Abwicklung durch die Österreichische  
Forschungsförderungsgesellschaft FFG

## 8 Kontaktdaten

ProjektleiterIn

Dr. Markus C. Scharber

Institut/Unternehmen

Linzer Institut für Organische Solarzellen, Johannes Kepler Universität Linz

Kontaktadresse

Altenbergerstrasse 69, 4040 Linz Österreich

0043-732-2468-5845

[www.jku.at](http://www.jku.at)

Auflistung der weiteren Projekt- bzw. KooperationspartnerInnen Name / Institut oder  
Unternehmen

Univ. Prof. Dr. Gregor Trimmel, Institut für Chemische Technology von Materialien,  
Technische Universität Graz