

Rezumat pentru raport anual Program Nucleu (maxim 2 pagini format A4, Times New Roman 12, la un rand)

Titlu Faza: Fenomenul de histerezis in celule solare cu perovskiti – studii experimentale si teoretice

Obiective: Studiul propus se concentreaza pe intelegerea proceselor care duc la aparitia fenomenului de histerezis in celule solare cu perovskiti (PSC) si dezvoltarea unui model dinamic analitic capabil sa descrie aceste efecte. Pentru aceasta vor fi fabricate si caracterizate celule solare cu perovskiti in configuratia standard – de colectare a electronilor in circuitul exterior. Pe baza caracterizarii

Rezultate estimate initial:

- i) fabricarea si caracterizarea chimica si structurala a celulelor solare cu perovskiti halogenati;
- ii) caracterizare electrica si fotoelectrică a acestora, stabilirea dependentei marimii histerezisului atat de caracteristicile intrinseci ale probelor PSC (chimia, structura, geometria si tipul interfetelor cu materialul absorbant de tip halid perovskit) cat si de conditiile de masura (tensiuni maxime aplicate, viteze de variatie a tensiunii in timpul masuratorilor electrice, prezenta sau absenta iluminarii);
- iii) dezvoltarea unui model dinamic analitic care sa considere fenomenele care apar la nivel microscopic, atat datorita compozitiei si structurii PSC cat si a conditiilor de masura, si care sa descrie cantitativ histerezisul in celulele solare cu perovskiti halogenate (PSC).

Rezultate obtinute (scurta descriere a celor mai importante rezultate, cu 1-2 imagini/grafice de impact care sustin rezultatele):

Rezultatele obtinute pot fi sintetizate pe 3 categorii si anume:

(i) fabricarea si caracterizarea chimica/structurala a celulelor solare cu perovskiti halogenati; Structura unei celule solare cu perovskiti (PSC) este sticlă/ FTO/ TiO₂ compact/TiO₂ mezoporos/ MAPI/ spiro-OMeTAD/ Au. In laborator, toate straturile componente se depun de regula prin tehnica spin-coating, inaplicabila inasa pe suprafete mari. Una dintre principalele provocări în domeniul PSC este de a dezvolta tehnologii de fabricație ieftine, potrivite producției la scară largă. Acest lucru presupune depunerea tuturor straturilor dintr-o PSC cu tehnici aplicabile pe arii mari. Până în prezent, cu exceptia stratului de TiO₂ mezoporos (TiO₂m), pentru toate celelalte au fost adaptate metode de depunere pe suprafete mari. Am reusit sa dezvoltam o tehnica de depunere a stratului de TiO₂m pe arii mari, prin pulverizare (r-TiO₂m). Aceasta induce formarea unei structuri reticulate specifice cu cavități ovale bine delimitate, cu diametre cuprinse între 3-7 μm si ~ 350 nm înălțime (vezi Fig.1). Cu aceasta tehnica eficienta PSC creste cu 20% (studiu efectuat pe un nr total de 42 PSC) comparativ cu situatia in care stratul mezoporos era depus prin spin-coating.

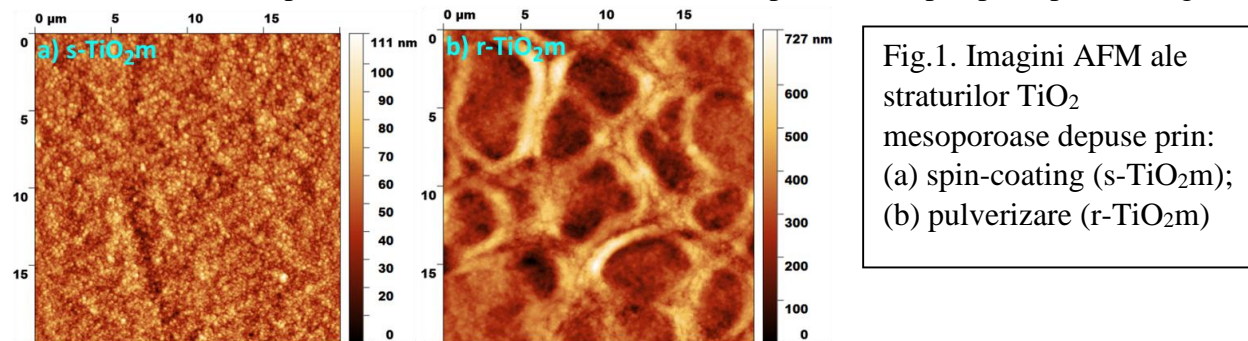


Fig.1. Imagini AFM ale straturilor TiO₂ mezoporoase depuse prin: (a) spin-coating (s-TiO₂m); (b) pulverizare (r-TiO₂m)

(ii) caracterizare electrica si fotoelectrica a PSC cu s-TiO₂m si cu r-TiO₂m

Un set de curbe J-V al celulelor PSC cu diferite tipuri de TiO₂m este prezentat în Fig.2 împreună cu histogramele pentru fiecare caracteristică a celor 42 de dispozitive. Toti parametri fotovoltaici (J_{sc}, V_{oc}, FF, PCE îmbunătățire generală a tuturor parametrilor fotovoltaici poate fi observată în cazul probelor cu r-TiO₂m. Cea mai mare eficiență, de 14,53%, a fost obținută pentru o probă cu TiO₂ mezoporos reticulat, vezi figura 8 a.

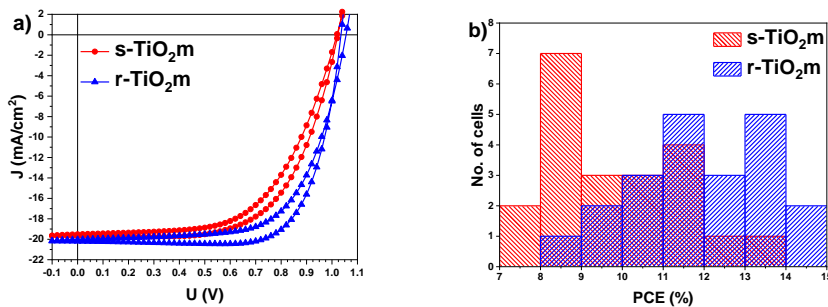


Fig.2. Comparatie între celule solare cu s-TiO₂m si r-TiO₂m: (a) caracteristici I-V; (b) PCE

Acesta este rezultatul unui J_{sc} de 20,1 mA/cm², unui V_{oc} de 1.045 V și a unui FF de 69%. In urma determinarii eficientei conversie de putere (PCE) in toate probele (vezi Fig.2b) a rezultat ca eficienta medie a dispozitivelor cu r-TiO₂m este de aproximativ 12% comparativ cu PCE mediu al celulelor cu s-TiO₂m de ~10%, rezultând la o creștere de 22% a eficienței. Deasemenea, aceasta procedura de arie mare prin pulverizare conduce la obtinerea unor PSC cu histerezis diminuat cu 65% (index de histerezis mediu HI=4.4 pentruPSC cu s-TiO₂m si HI=2.9 pentru PSC cu r-TiO₂m).

iii) dezvoltarea unui model dinamic analitic ce descrie cantitativ histerezisul PSC.

Am dezvoltat un model electric dinamic, care permite explicarea caracteristicilor importante ale PSC, cum ar fi forma histerezisului și apariția unei „cocoase” în măsuratoarea inversă, dependentă de condițiile de măsură, fără a fi necesare ipoteze suplimentare. Am obținut expresii analitice pentru tensiunea circuitului, curentul staționar și cel instantaneu (cu funcția W Lambert). S-a obținut astfel o descriere unificată a comportamentului histeretic al PSC pe baza unui circuit electric generic obținându-se o descriere realistă a caracteristicilor dinamice J – V (vezi Fig.3).

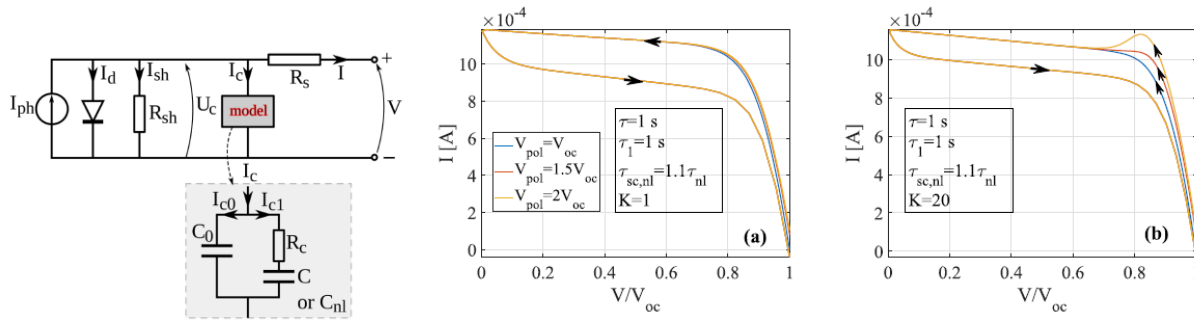


Fig.3. Circuitul echivalent al PSC considerat (stanga) și caracteristici non-staționare I-V ale unei aceeași PSC ((a) și (b)), cu diferite valori ale factorului K , un parametru ce consideră dependența de tensiune a capacității C_{nl} . τ este timpul de relaxare al polarizării inițiale iar τ_{nl} al capacității C_{nl} dependente de V . $\tau_{sc,nl}$ - constanta de timp pentru descărcarea capacității C_{nl} (V) în circuitul extern.

Aceste rezultate au fost valorificate în **2 lucrări ISI**:

1) *Reticulated mesoporous TiO_2 scaffold, fabricated by spraycoating, for large area perovskite solar cells*, ENERGY TECHNOLOGY, Article Number: UNSP 1900922, DOI: 10.1002/ente.201900922 , Early Access: OCT 2019

2) *Modelling J–V hysteresis in perovskite solar cells induced by voltage poling*, Phys. Scr. 94 (2019) 125809, DOI: 10.1088/1402-4896/ab347d

Concluzii și perspective: Studiul efectuat s-a concentrat pe două aspecte, unul tehnologic - de a fabrica PSC eficiente, cu histerezis redus, prin metode aplicabile pe arii mari și altul teoretic – de a modela și înțelege proprietățile PSC și fenomenul de histerezis. **Principalele concluzii:**

- a fost dezvoltată o metodă nouă pentru depunerea pe arii mari a straturilor mezoporoase de TiO_2 , având la baza pulverizarea. Aceasta metodă a dus la o creștere a PCE cu 22%. Adicional, această metodă reduce efectul histeretic. Poate fi simplu integrată în instalații automate, făcând astfel producția la scară largă a PSC foarte fezabilă.

- am dezvoltat un model dinamic pentru o descriere unificată a comportamentului histeretic al PSC, explicând comportamentul neliniar al polarizării printr-o capacitate -dependentă de V . Aceasta are beneficiul asimilării termenului de polarizare direct cu condițiile experimentale, cum ar fi tensiunea de polare V_{pol} . Pe lângă caracteristicile cunoscute, obținem caracteristici care nu au fost încă analizate experimental, ca mutarea „cocoasei” din J-V reversă ca o „burtă” în cea directă, atunci când rata de recombinare este scăzută sau când tensiunea V_{pol} crește.

Perspective: creșterea eficienței PSC prin înglobarea metodelor de depunere în glow-box cu atmosfera controlată; găsirea de soluții pentru a crește și stabiliza PCE în timp ce se mărește suprafața PSC. fabricarea de module PSC eficiente prin dezvoltarea și utilizarea exclusivă a tehnologiilor aplicabile pe suprafețe mari (imprimare și sputtering);

