

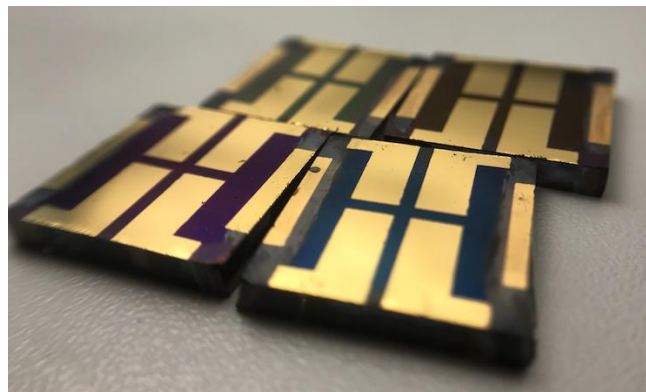
12 April 2019

The interface makes the difference

ICIQ researchers and collaborators look in detail at the interfaces in perovskite solar cells to understand the differences observed in their performance.

A collaboration led by ICIQ's [Palomares group](#) deepens the understanding of the impact that changing the materials in a perovskite solar cell has on its performance. The [results](#), published in the peer-reviewed journal [Energy & Environmental Science](#), will help rationalize the design of the components of cells, thus increasing their commercial appeal.

Perovskite-based solar cells are the fastest-advancing solar technology to date. Since they were first used in 2009, perovskite solar cells have achieved high efficiencies (over 22% under standard solar irradiation) at low production costs. Although most of the perovskite components are optimized, there's still room for improvement. Especially in reference to the Hole Transport Materials (HTMs) employed.



Perovskite solar cells with different materials as HTMs also present different colours. Credit: ICIQ

The collaboration, among researchers from ICIQ's Palomares and [Vidal groups](#), the Physical Chemistry of Surfaces and Interfaces group at the [Institut de Ciència de Materials de Barcelona](#) (ICMAB-CSIC) and [IMDEA Nanociencia](#), sheds light on the reasons behind the differences observed in perovskite solar cells' performance by comparing four different HTMs that present close chemical and physical properties.

Little changes can be powerful

Perovskite-based solar cells are approaching the stability – under working conditions – necessary to be trusted as potential commercial products. The major concern is the materials used, particularly spiro-OMeTAD – the most widely used HTM, which is prone to



degradation. Therefore, current research is focused on finding alternatives. “Scientists have been designing new molecules that could replace spiro-OMeTAD for years. Looking for molecules with similar electrical and optic characteristics than spiro-OMeTAD and hoping to get similar results. But when testing new HTMs, instead of getting similar results, the cells worked very badly. So, we decided to understand why this happened,” explains Núria F. Montcada, a postdoctoral researcher at the Palomares group and one of the first authors of the paper.

The researchers realized that new molecules with the potential to replace spiro-OMeTAD as HTM were selected on the basis to their properties in solution. However, in functional solar cells, these molecules are prepared in the form of thin films whose surfaces, in turn, are placed in contact with other materials, forming interfaces. The created interfaces may confer changes in the properties of the molecules.

Through the collaboration with ICMAB scientists, the *surface work function* of each HTM layer on perovskites solar cells was measured to find that “Spiro-OMeTAD energy levels align perfectly with respect to the other components of the cell, while the energetic landscape is less favorable for layers of the new HTM molecules tested. Surfaces and interfaces created in the solar cell stack have a crucial role in the functional device performances,” says Carmen Ocal, researcher at ICMAB. “We have to be aware that the perovskite-HTM interface may shift the energy levels and produce undesired energy misalignments. We’ve come to demonstrate that the study of molecules needs to match the conditions under which the molecule is going to be used – otherwise molecule design is just trial and error,” concludes Montcada.

Funding from the Spanish Ministry of Science, Innovation and Universities, the European Research Council, the Alexander von Humboldt Foundation, the Generalitat de Catalunya and the Severo Ochoa Program for Centers of Excellence is acknowledged.

Reference Article:

Ilario Gelmetti, Núria F. Montcada, Ana Pérez-Rodríguez, Esther Barrena, Carmen Ocal, Inés García-Benito, Agustín Molina-Ontoria, Nazario Martín, Anton Vidal-Ferran and Emilio Palomares. **Energy alignment and recombination in perovskite solar cells: weighted influence on the open circuit voltage.** Energy & Environmental Science. 2019,12, 1309-1316. DOI: [10.1039/C9EE00528E](https://doi.org/10.1039/C9EE00528E)

ICIQ and ICMAB Communication

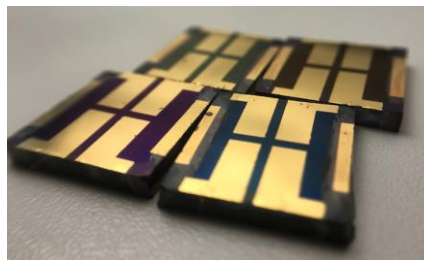
12 d'abril de 2019

La interfase marca la diferencia

Investigadors de l'ICIQ i col·laboradors estudien detalladament els materials que formen les cèl·lules solars basades en perovskites per comprendre les diferències observades en el seu rendiment.

Una col·laboració liderada pel grup de recerca d'Emilio Palomares de l'ICIQ aporta noves dades sobre l'impacte dels diferents materials usats en les cèl·lules solars de perovskita en el rendiment. Els resultats, publicats a la revista internacional *Energy & Environmental Science*, ajudaran a racionalitzar el disseny dels components de les cèl·lules, augmentant-ne així el seu atractiu comercial.

La tecnologia de les cèl·lules solars basades en perovskites és la que avança més ràpidament de totes les existents actualment. Des que es van utilitzar per primera vegada al 2009, han aconseguit eficiències altes (més del 22% utilitzant radiació solar estàndard) a baixos costos de producció. Tot i que la majoria dels components de les perovskites estan força optimitzats, encara hi ha marge de millora, especialment en referència als Materials de Transport de Forats (HTMs, per les seves sigles en anglès).



Els diferents materials que s'utilitzen com a HTM també fan canviar el color de les cèl·lules solars de perovskita. Crèdit: ICIQ.

La col·laboració entre investigadors dels grups Palomares i Vidal de l'ICIQ, el grup de *Physical Chemistry of Surfaces and Interfaces* de l'Institut de Ciència de Materials de Barcelona (ICMAB-CSIC) i IMDEA Nanociencia, ens dona detalls dels motius de les diferències observades en el rendiment de les cèl·lules solars de perovskita, al comparar quatre HTM diferents que presenten propietats químiques i físiques semblants.

Els petits canvis poden ser poderosos

Les cèl·lules solars basades en perovskita són cada vegada més estables sota les condicions de treball utilitzades, la qual cosa les fa cada vegada més atractives comercialment. La principal preocupació són els materials utilitzats, especialment l'espíro-OMeTAD, l'HTM



més comú, ja que és propens a la degradació. En conseqüència, la recerca actual se centra en trobar-ne alternatives. "Durant molts anys, els científics han estat dissenyant noves molècules que podrien substituir l'espiro-OMeTAD: molècules amb característiques elèctriques i òptiques similars a les de l'espiro-OMeTAD, confiant que presentaran resultats similars. Però, sorprenentment, quan es proven els nous HTM a les cèl·lules, aquestes funcionen molt pitjor. Per aquest motiu, vam decidir estudiar-ne el perquè", explica Núria F. Montcada, investigadora postdoctoral del grup de Palomares i una de les autores principals de l'estudi.

Els investigadors van adonar-se que les noves molècules que tenien el potencial de substituir l'espiro-OMeTAD com a HTM es van seleccionar sobre la base de les seves propietats en solució. No obstant això, a les cèl·lules solars funcionals, aquestes molècules es preparen i queden confinades en forma de fines pel·lícules, les superfícies de les quals es posen en contacte amb altres materials, formant interfases. Aquestes interfases creades poden conferir canvis a les propietats de les molècules.

Mitjançant la col·laboració amb científiques de l'ICMAB, es va mesurar la funció de treball en superfície de cada capa HTM i es va trobar que "els nivells d'energia de l'espiro-OMeTAD s'alineen perfectament amb els nivells dels altres components de la cèl·lula, mentre que els nivells energètics són menys favorables per a les capes de les noves molècules HTM provades. Les superfícies i les interfases creades a la cèl·lula solar tenen un paper crucial en les funcions dels dispositius funcionals ", explica Carmen Ocal, investigadora de l'ICMAB. "Hem de ser conscients que la interfase perovskite-HTM pot canviar els nivells d'energia i produir desajustaments energètics no desitjats. Aquest fet demostra que les molècules s'han d'estudiar en les mateixes condicions en què s'utilitzaran, en cas contrari, el disseny de molècules és només prova i error", conclou Montcada.

Aquest estudi ha estat finançat amb el Ministeri de Ciència, Innovació i Universitats, el Consell Europeu de Recerca, la Fundació Alexander von Humboldt, La Generalitat de Catalunya i el Programa Severo Ochoa de Centres d'Excel·lència.

Article de referència:

Ilario Gelmetti, Núria F. Montcada, Ana Pérez-Rodríguez, Esther Barrena, Carmen Ocal, Inés García-Benito, Agustín Molina-Ontoria, Nazario Martín, Anton Vidal-Ferran and Emilio Palomares. **Energy alignment and recombination in perovskite solar cells: weighted influence on the open circuit voltage.** Energy & Environmental Science. 2019,12, 1309-1316. DOI: [10.1039/C9EE00528E](https://doi.org/10.1039/C9EE00528E)

Comunicació ICIQ i ICMAB

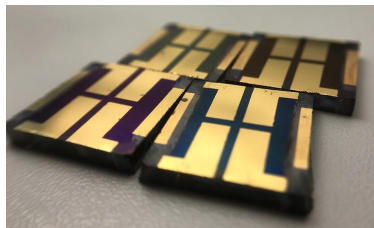
12 de abril de 2019

La interfase marca la diferencia

Investigadores del ICIQ y colaboradores observan en detalle las interfases en celdas solares de perovskita para comprender las diferencias observadas en su rendimiento.

Una colaboración liderada por el grupo de investigación de Emilio Palomares, del ICIQ arroja luz sobre el impacto que tiene el cambio de materiales en el rendimiento de una celda solar de perovskita. Los resultados, publicados en la revista internacional *Energy & Environmental Science*, ayudarán a racionalizar el diseño de componentes de celdas solares, aumentando así su atractivo comercial.

Las celdas solares basadas en perovskita son la tecnología solar que evoluciona más rápidamente de todas las conocidas actualmente. Desde que se utilizaron por primera vez en 2009, las celdas solares de perovskita han logrado eficiencias altas (más del 22% con radiación solar estándar) a bajos costos de producción. Aunque la mayoría de los componentes de la celda solar están optimizados, todavía hay margen de mejora, especialmente en referencia a los Materiales de Transporte de Agujeros (HTM, por sus siglas en inglés).



Cambiar el material que se emplea como HTM también hace cambiar el color de las celdas solares de perovskita. Crédito: ICIQ

La colaboración entre investigadores de los grupos Palomares y Vidal de ICIQ, el grupo de *Physical Chemistry of Surfaces and Interfaces* del Instituto de Ciencia de Materiales de Barcelona (ICMAB-CSIC) y IMDEA Nanociencia, arroja luz sobre las razones tras las diferencias observadas en el rendimiento de celdas solares de perovskita al comparar cuatro HTM que presentan propiedades químicas y físicas similares.

Los pequeños cambios pueden ser poderosos

Las celdas solares basadas en perovskita son cada vez más estables en las condiciones de trabajo utilizadas, lo que las está volviendo atractivas comercialmente. La principal



preocupación son los materiales que se usan, particularmente el espiro-OMeTAD, el HTM más común, a pesar de ser propenso a la degradación. Consecuentemente, la investigación actual se centra en encontrar alternativas. "Durante años, los científicos han estado diseñando nuevas moléculas que podrían reemplazar el espiro-OMeTAD. Buscando moléculas con características eléctricas y ópticas similares a las del espiro-OMeTAD confiando en obtener resultados similares. Pero al probar los nuevos HTM, las celdas funcionaban mucho peor, así que decidimos estudiar el porqué", explica Núria F. Montcada, investigadora postdoctoral del grupo Palomares y una de las autoras principales del estudio.

Los investigadores se dieron cuenta de que las nuevas moléculas con potencial para reemplazar el espiro-OMeTAD como HTM, se seleccionan en función de sus propiedades en solución. Sin embargo, en celdas solares funcionales estas moléculas se preparan en forma de películas delgadas cuyas superficies, a su vez, se ponen en contacto con otros materiales, formando interfases. Las interfases creadas pueden conferir cambios en las propiedades de las moléculas.

A través de la colaboración con científicas del ICMAB, se midió la función de trabajo de superficie de cada HTM en celdas solares de perovskites, descubriendo que "los niveles de energía del espiro-OMeTAD se alinean perfectamente con respecto a los otros componentes de la celda, mientras que los niveles energéticos son menos favorables para las nuevas moléculas HTM probadas. Las superficies e interfases creadas en las celdas solares al apilar distintos materiales, tienen un papel crucial en el rendimiento del dispositivo funcional", dice Carmen Ocal, investigadora del ICMAB. "Tenemos que ser conscientes de que la interfase perovskite-HTM puede cambiar los niveles de energía y producir desalineaciones de energía no deseadas. Hemos demostrado que el estudio de las moléculas se debe realizar en las condiciones en las que se vaya a utilizar la molécula; de lo contrario, el diseño de la molécula es por tanteo", concluye Montcada.

Artículo de referencia:

Ilario Gelmetti, Núria F. Montcada, Ana Pérez-Rodríguez, Esther Barrena, Carmen Ocal, Inés García-Benito, Agustín Molina-Ontoria, Nazario Martín, Anton Vidal-Ferran and Emilio Palomares. **Energy alignment and recombination in perovskite solar cells: weighted influence on the open circuit voltage.** Energy & Environmental Science. 2019,12, 1309-1316. DOI: [10.1039/C9EE00528E](https://doi.org/10.1039/C9EE00528E)

Comunicación ICIQ e ICMAB