

Título em Português:	Espectroscopia e instrumentação aplicadas ao estudo de células solares orgânicas
Título em Inglês:	Spectroscopy and instrumentation for investigating organic solar cells
Autor:	Gabriel de Melo Borges
Instituição:	Universidade de São Paulo
Unidade:	Instituto de Física de São Carlos
Orientador:	Paulo Barbeitas Miranda
Área de Pesquisa / SubÁrea:	Física da Matéria Condensada
Agência Financiadora:	USP - Programa Unificado de Bolsas

Estudo da Fotofísica de Células Solares Orgânicas

Gabriel de Melo Borges

Colaborador: Anderson Emanuel Ximim Gavim

Orientador: Paulo Barbeitas Miranda

Instituto de Física de São Carlos (IFSC), Universidade de São Paulo (USP)

gabsmb@usp.br

Objetivos

O objetivo geral deste estudo foi fabricar células solares orgânicas de heterojunção de volume (OSCs-BHJ), utilizando o polímero PM6 como doador e Y6 como molécula aceitadora de elétrons, e caracterizar suas propriedades optoeletrônicas. Em particular, o projeto visou caracterizar e discutir os mecanismos de geração, extração e recombinação de cargas, através das medidas transientes que fornecem o tempo de vida das cargas. Por fim, foi possível investigar o papel da massa molecular do PM6 no desempenho fotovoltaico [1].

Métodos e Procedimentos

Os dispositivos foram fabricados na arquitetura ITO (130 nm) / PEDOT:PSS (30nm) / PM6:Y6 (100 nm) / PFN-Br (5 nm) / Ag (120 nm). A caracterização dos dispositivos incluiu: **Curvas JxV**: Para extrair os parâmetros fotovoltaicos. **Espectroscopia de Absorção Transiente (TA) e Transiente Elétrico (TE)**: Medidas simultâneas de Transiente de Absorção (TA) e de Fotocorrente (TPC), ou de Fotovoltagem (TPV), para investigar a dinâmica de extração e recombinação de cargas fotoinduzidas. **Microscopia de Força Atômica (AFM)**: Utilizada para analisar a morfologia da camada ativa.

Resultados

As curvas JxV (Fig. 1) e os parâmetros fotovoltaicos extraídos (Tabela 1) revelaram um desempenho superior para os dispositivos com o polímero PM6 de maior massa molecular (113 kDa).

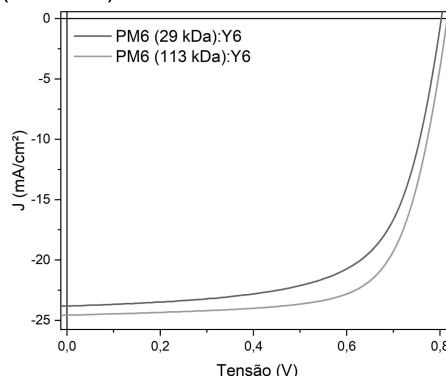


Figura 1: Curva JxV

Polímero doador	V_{oc} (V)	J_{sc} (mA/cm ²)	FF (%)	PCE (%)
PM6 (29 kDa)	0.80 ± 0.01	23.8 ± 0.9	66.0 ± 0.7	12.6 ± 0.4
PM6 (113 kDa)	0.82 ± 0.0	24.6 ± 0.9	70.6 ± 0.7	14.1 ± 0.6

Tabela 1: Parâmetros Fotovoltaicos

As medidas transientes em condição de curto-circuito mostraram que a extração de carga ocorre em dois regimes: um rápido e um lento. O dispositivo com PM6 de maior Mw demonstrou uma eficiência de extração superior, com uma fração residual de cargas de apenas 1-2%, em comparação com cerca de

10% para o dispositivo de menor Mw. Isso indica que a coleta de cargas é mais eficiente no dispositivo de maior Mw. Em circuito aberto, onde a recombinação é dominante, o dispositivo com PM6 de maior Mw apresentou tempos de recombinação tipicamente maiores. Além disso, o tempo de acúmulo de carga foi menor para o dispositivo de 113 kDa, sugerindo uma maior mobilidade de portadores.

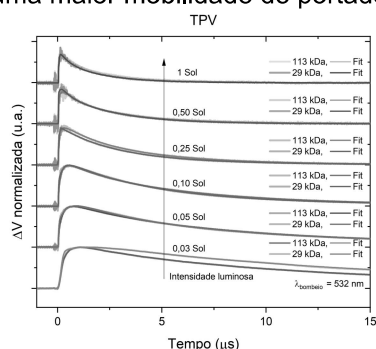


Figura 2: Transiente de fotovoltagem

Pela comparação entre TPV e TA (Figs. 2 e 3), as frações de carga na recombinação lenta indicaram uma menor probabilidade de recombinação para o polímero de maior Mw, o que sugere uma melhor ordenação da camada ativa.

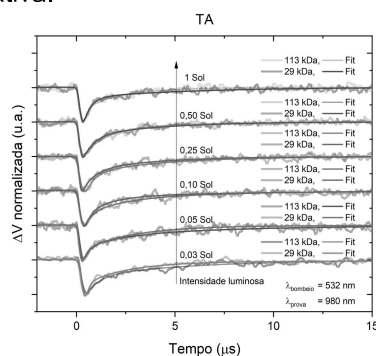


Figura 3: Absorção transiente

As imagens de AFM (Fig.4) revelaram diferenças significativas na morfologia das blendas. A camada ativa com PM6 de 113 kDa apresentou uma superfície mais homogênea, com menor rugosidade (1,46 nm contra 2,24 nm), o que pode explicar o FF superior. As

imagens de fase mostraram a presença de domínios alongados e estruturas fibrilares maiores para a amostra de maior Mw, sugerindo uma separação de fases mais definida entre o doador e o aceitador, favorecendo o transporte de cargas. Em contraste, a amostra de 29 kDa apresentou domínios menores e um contraste de fase mais homogêneo, o que pode facilitar a dissociação do éxciton, mas também tornar as cargas mais suscetíveis à recombinação.

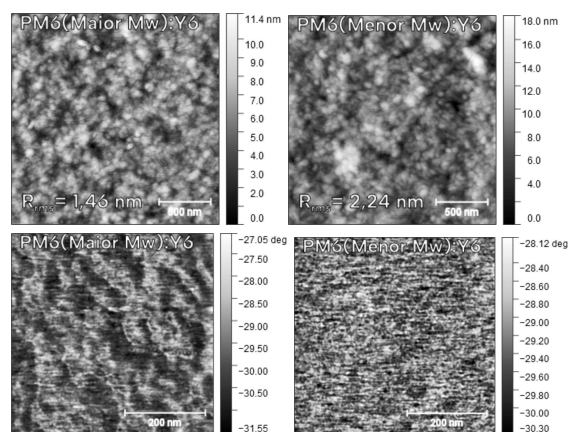


Figura 4: AFM, topografia e separação de fase.

Conclusões

Observamos que a massa molecular do polímero doador PM6 tem forte influência na dinâmica de carga em OSCs-BHJ, conforme já relatado na literatura [1]. Para a blenda PM6:Y6, os dispositivos com o PM6 de maior massa molecular (113 kDa) alcançaram uma eficiência superior (14.1%) em comparação com os de menor massa molecular (12.6%). Isso pode ser explicado por uma morfologia mais favorável, que torna a extração de carga mais eficiente e reduz a recombinação de cargas. Com isso, pudemos entender os mecanismos que levam à melhora de eficiência dos dispositivos de alta massa molar.

Referências

- [1] SAQIB, M. I. et al. The effects of polymer molecular weight on morphology and the device efficiency: Progress and prospects for organic solar cells. *Macromolecular Chemistry and Physics*, 2025.

Study of the photophysics of Organic Solar Cells

Gabriel de Melo Borges

Collaborator: Anderson Emanuel Ximim Gavim

Supervisor: Paulo Barbeitas Miranda

Instituto de Física de São Carlos (IFSC), Universidade de São Paulo (USP)

gabsmb@usp.br

Objectives

The general objective of this study was to fabricate bulk heterojunction organic solar cells (BHJ-OSCs), using the polymer PM6 as a donor and the Y6 molecule as an electron acceptor, and to characterize their optoelectronic properties. In particular, the project aimed to characterize and discuss the mechanisms of charge generation, extraction, and recombination through transient measurements that provide the lifetime of the charges. Finally, it was possible to investigate the role of the molecular weight of PM6 on the photovoltaic performance [1].

Materials and Methods

The devices were fabricated with the ITO (130 nm) / PEDOT:PSS (30nm) / PM6:Y6 (100 nm) / PFN-Br (5 nm) / Ag (120 nm) architecture. The characterization of the devices included: **J-V Curves:** To extract the photovoltaic parameters. **Transient Absorption Spectroscopy (TA) and Electrical Transients (TE):** Simultaneous measurements of Transient Absorption and Transient Photocurrent (TPC), or Transient Photovoltage (TPV), to investigate the dynamics of extraction and recombination of photoinduced charges. **Atomic Force Microscopy (AFM):** Used to analyze the morphology of the active layer.

Results

The J-V curves (Fig. 1) and the extracted photovoltaic parameters (Table 1) revealed a superior performance for the devices with the higher molecular weight PM6 polymer (113 kDa).

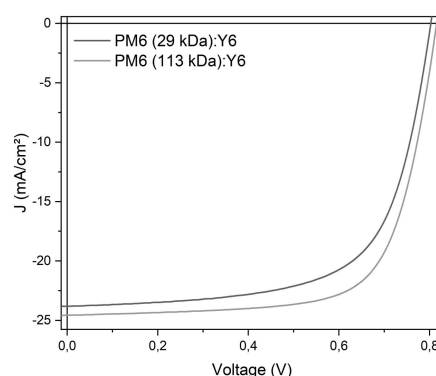


Figure 1: JxV curve

Donor polymer	V_{oc} (V)	J_{sc} (mA/cm^2)	FF (%)	PCE (%)
PM6 (29 kDa)	0.80 ± 0.01	23.8 ± 0.9	66.0 ± 0.7	12.6 ± 0.4
PM6 (113 kDa)	0.82 ± 0.0	24.6 ± 0.9	70.6 ± 0.7	14.1 ± 0.6

Table 1: Photovoltaic parameters

The transient measurements under short-circuit conditions showed that charge extraction occurs in two regimes: a fast one and a slow one. The device with the higher Mw PM6 demonstrated a superior extraction efficiency, with a residual

charge fraction of only 1-2%, compared to about 10% for the lower Mw device. This indicates that charge collection is more efficient in the higher Mw device. In open-circuit condition, where recombination is dominant, the device with higher Mw PM6 showed typically longer recombination times. Furthermore, the charge build-up time was shorter for the 113 kDa device, suggesting a higher carrier mobility.

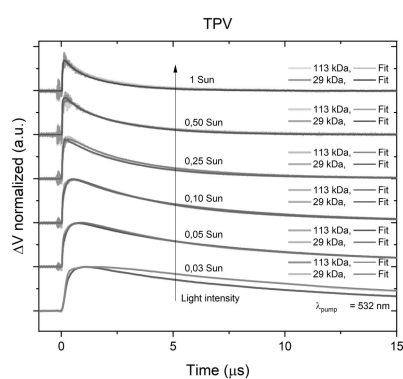


Figure 2: Photovoltage transient

From the comparison between TPV and TA (Figs. 2 and 3), the charge fractions in the slow recombination indicated a lower recombination probability for the higher Mw polymer, which suggests a better ordering of the active layer.

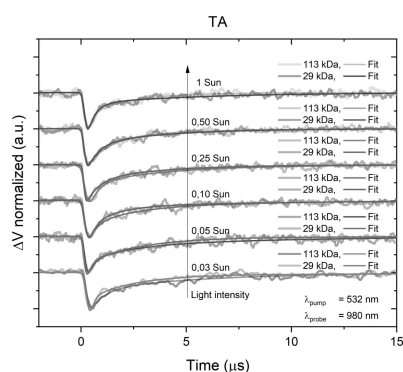


Figure 3: Transient absorption

The AFM images (Fig. 4) revealed significant differences in the morphology of the blends. The active layer with 113 kDa PM6 presented a more homogeneous surface, with lower roughness

(1.46 nm versus 2.24 nm), which may explain the superior FF. The phase images showed the presence of elongated domains and larger fibrillar structures for the higher Mw sample, suggesting a more defined phase separation between the donor and acceptor, favoring charge transport. In contrast, the 29 kDa sample presented smaller domains and a more homogeneous phase contrast, which can facilitate exciton dissociation but also make the charges more susceptible to recombination.

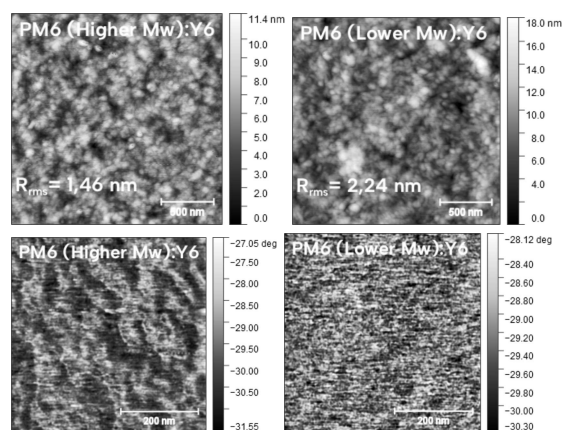


Figure 4: AFM, topography and phase separation.

Conclusions

We observed that the molecular weight of the donor polymer PM6 has a strong influence on the charge dynamics in BHJ-OSCs, as reported in the literature [1]. For the PM6:Y6 blend, the devices with the higher molecular weight PM6 (113 kDa) achieved a superior efficiency (14.1%) compared to those with lower molecular weight (12.6%). This can be explained by a more favorable morphology, which leads to more efficient charge extraction and lower charge recombination. Thus, we have obtained insights into the mechanisms for the performance improvement of the higher molecular weight devices.

References

- [1] SAQIB, M. I. et al. The effects of polymer molecular weight on morphology and the device efficiency: Progress and prospects for organic solar cells. **Macromolecular Chemistry and Physics**, 2025.