



Rendiconti
Accademia Nazionale delle Scienze detta dei XL
*Memorie e Rendiconti di Chimica, Fisica,
Matematica e Scienze Naturali*
139° (2021), Vol. II, fasc. 3, pp. 173-177
ISSN 0392-4130 • ISBN 978-88-98075-48-5

Sfida energetica e solare innovativo: materiali e tecnologie del futuro*

GIULIA GRANCINI

Dipartimento di Chimica, Università di Pavia
E.mail: giulia.grancini@unipv.it

La transizione verso l'economia verde entro il 2050 è una delle maggiori sfide al giorno d'oggi in Europa. Entro il 2050 le energie rinnovabili saranno una tecnologia mainstream che coprirà fino al 50% della produzione netta mondiale di elettricità. Tra le energie rinnovabili, l'IEA prevede che la quota di generazione di Solare crescerà più rapidamente, risorsa energetica primaria che soddisferà fino al 20% della domanda globale di energia entro il 2050.

Oggi le celle solari al silicio dominano il mercato. Tuttavia, sono altamente energivore richiedendo una produzione ad alto consumo energetico. Inoltre, è una tecnologia ingombrante e con dei forti limiti estetici, la stessa tecnologia che nella forma è quella di 70 anni fa.

Al giorno d'oggi, con l'obiettivo di ridurre l'impronta di carbonio e di disporre di una fonte di energia portatile, le moderne esigenze di energia sono cambiate. La società ha bisogno di un fotovoltaico a basso costo, adattabile, portatile, facilmente integrabile nella vita di tutti i giorni (flessibile, bello, colorato) da implementare nelle finestre intelligenti e nell'IoT.

Come possono la scienza e la tecnologia guidare un tale cambio di paradigma? Sostenendo lo sviluppo di soluzioni radicalmente nuove nel fotovoltaico stabili, efficienti ea basso costo, con un basso impatto ambientale. Questo è lo scopo della mia ricerca.

Per affrontare questa sfida è necessario un approccio scientifico multidisciplinare che abbracci lo sviluppo intelligente di nuovi materiali, la caratterizzazione fisico-chimica dei processi fondamentali e l'ingegnerizzazione e test avanzati dei dispositivi.

Lavorare all'interfaccia tra questi domini consentirà di avanzare in modo tempestivo. Durante la mia carriera ho infatti sviluppato una vasta conoscenza nella fisica dei materiali e una profonda esperienza nell'ingegneria dei dispositivi attraversando diversi campi delle tecnologie fotovoltaiche di nuova genera-

* Prolusione tenuta in occasione dell'Inaugurazione del 240° Anno Accademico dell'Accademia Nazionale delle Scienze detta dei XL, tenutasi il 19 maggio 2022 presso la biblioteca dell'Accademia.

zione, lavorando in particolare presso l'Università di Oxford sulla tecnologia solare organica e ibrida e per 4 anni presso l'EPFL, dove il mio gruppo ha contribuito a creare un pioniere della tecnologia Hybrid Perovskite.

In UniPV negli ultimi due anni, ho trasferito le mie conoscenze e ho creato un gruppo di ricerca multidisciplinare di oggi 15 persone dove ho sviluppato da zero un laboratorio di ricerca all'avanguardia costituito da una linea pilota per la fabbricazione di celle solari e un set unico- ups per la caratterizzazione optoelettronica di materiali e dispositivi.

Nel quadro dell'evoluzione delle tecnologie solari come rappresentato nel grafico NREL, il fotovoltaico emergente ha avuto un ruolo dirompente sin dagli anni '90. Più di recente, è emersa una nuova tecnologia che è andata alle stelle nel campo, con un'efficienza superiore al 25% dopo solo un decennio di ricerca, che è qualcosa che non ha precedenti rispetto allo sviluppo di qualsiasi altra tecnologia solare esistente.

Tale tecnologia si basa su semiconduttori ibridi di perovskite, elencati per il loro incredibile impatto come una delle prime dieci tecnologie dal forum economico mondiale nel 2016.

Qual è la struttura della perovskite ibrida?

Le perovskiti ibride sono semiconduttori 3D che formano una struttura ABX_3 dove A è il materiale organico, B il metallo e X l'alogeno. Lo ioduro di piombo di metilammonio è stato il pioniere di questa classe di materiali. Il suo forte assorbimento pancromatico è una delle principali caratteristiche fisiche responsabili dell'esplosione di questi materiali nel fotovoltaico, insieme al loro basso costo, grazie ai loro metodi di fabbricazione basati su soluzioni facili.

Tuttavia, le celle solari a perovskite 3D non sono stabili. Dopo l'esposizione all'acqua, la struttura 3D collassa, portando a un degrado irreversibile del materiale. E, di conseguenza, vi è un possibile rilascio di elementi tossici nell'ambiente: enormi barriere per la futura diffusione del mercato.

Sono a conoscenza dei recenti sforzi di ricerca che cercano di stabilizzare la perovskite 3D; tuttavia, non sono ancora sufficienti, richiedendo una soluzione radicalmente nuova.

La ricerca si sta spostando su una classe diversa di perovskiti disposte in una struttura a strati 2D. In questo caso vengono utilizzati grandi cationi organici idrofobici che sezionano la struttura 3D formando barriere organiche che isolano i singoli fogli inorganici.

Le perovskiti 2D hanno un enorme potenziale per risolvere il problema della stabilità poiché possiedono nuove interessanti proprietà fisiche e strutturali.

In particolare, la presenza di cationi idrofobici esalta il carattere idrorepellente del materiale, risultando in nessun degrado per esposizione all'acqua, contrariamente al 3D.

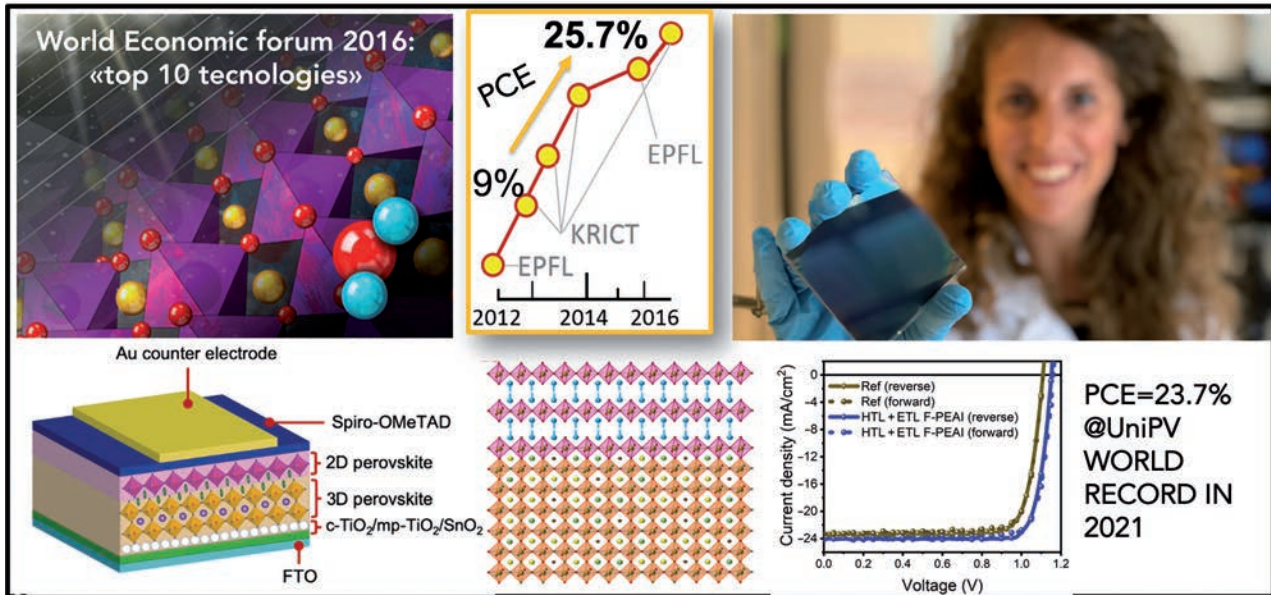
Usando le perovskiti 2D ho recentemente sperimentato le celle solari 2D stabili per un anno, che è l'attuale record mondiale per la tecnologia della perovskite, prova della fattibilità del mio nuovo concetto. Tuttavia, l'efficienza delle celle solari è troppo bassa, principalmente a causa dell'assorbimento più stretto della perovskite 2D rispetto alla perovskite 3D. Pertanto, è necessario un grande salto di efficienza.

Da questo risultato iniziale ho sviluppato un'idea innovativa: quella di creare nuove interfacce ibride 2D/3D multidimensionali, cuore del mio progetto Europeo ERC HYNANO. Mediante una nuova sinergia tra la comprensione fondamentale della struttura del materiale e la fisica dell'interfaccia ho creato una nuova struttura ibrida che combina la stabilità del 2D con l'efficienza del 3D. Lo strato 2D stabile funge da strato idrorepellente preservando il funzionamento della 3D sottostante. Da questo risultato iniziale ho creato nuove interfacce ibride 2D/3D multidimensionali, cuore del mio progetto ERC HYNANO. Ho sviluppato una nuova sinergia tra la comprensione fondamentale della struttura del materiale e la fisica dell'interfaccia per creare una nuova struttura ibrida che combina la stabilità del 2D con l'efficienza del 3D. Il 2D stabile funge da strato idrorepellente preservando il funzionamento 3D. Le interfacce 2D/3D sono il cuore del dispositivo a sandwich di perovskite.

All'interfaccia emergono nuove funzioni e proprietà fisiche. Grazie alla mia esperienza nell'ingegneria dell'interfaccia e nella fisica, è possibile controllare il loro design per adattare le loro proprietà per creare un sistema ibrido efficiente e stabile che supererà le prestazioni dei singoli componenti.

Per ottenere l'interazione sinergica alle interfacce è necessaria una nuova comprensione fondamentale. Devono essere prese di mira questioni scientifiche fondamentali come prolungare la durata del dispositivo, garantire la separazione della carica limitando la ricombinazione e, in definitiva, guidare un trasporto efficiente della carica nel dispositivo.

Dal punto di vista del progetto, affrontare contemporaneamente queste domande è impegnativo ma essenziale. Affronterò questa sfida testando direttamente i nuovi materiali in dispositivi funzionanti. Il recente lavoro pub-



blicato a dicembre 2021 su Science Advance dimostra il potenziale di questo approccio. Abbiamo combinato una serie di cationi 2D come passivazione in un dispositivo a sandwich di perovskite basato su un'architettura a pin. Utilizzando tali modificatori di superficie, abbiamo raggiunto un'efficienza record mondiale che si avvicina al 24% grazie alla combinazione sinergica di una migliore qualità del film, una ridotta ricombinazione non radiativa (poiché i cationi 2D passivano la superficie) e una migliore stabilità – vedere Degani et al Sci.Advances 2021 [1]. Lavorare in stretto legame tra la fabbricazione di device e la caratterizzazione dell'interfaccia è la chiave che

consente di riconoscere i buoni materiali rilevanti per l'applicazione pratica con l'obiettivo finale di realizzare un dispositivo 2D/3D multidimensionale efficiente e stabile, un punto di svolta per le celle solari di perovskite, come dimostrato da nostri recenti studi apparsi in Cacovich et al Nature Comm 2022 [2].

BIBLIOGRAFIA

- [1] M. Degani et al. *Sci. Adv.* 7, 49, 7, DOI: 10.1126/sciadv.abj79302021, 2021
 [2] Cacovich S. et al Nature Comm. 2022 13:286, 2022

Innovative solar energy and challenge behind: materials and technologies of the future

Transition to green economy by 2050 is one the biggest challenges nowadays in Europe. By that time renewables will be a mainstream technology covering up to 50% of the world net electricity generation. Among renewables, IEA expects Solar's share of generation to grow the fastest being a key player meeting up to 20% of the global energy demand by 2050.

Nowadays silicon solar cells dominate the market. However, they are too technologically intensive requiring high energy consuming manufacturing. In addition,

it is a bulky technology which in shape is the same since 70 years ago.

Nowadays, with the aim of reducing the carbon footprint and having a portable energy source, the modern needs of energy have changed. Society needs low cost photovoltaics, adaptable, portable, easily integrated in everyday life (flexible, nice, colored) to be implemented in smart windows and IoT.

How can science and technology lead such a paradigm shift? Sustaining the development of radically

new solutions in photovoltaics which should be stable, efficient and low cost, with a low environmental impact.

This is the aim of my research.

To address the challenge a multidisciplinary scientific approach is needed which embraces Smart Development of New Materials, Fundamental Physico-chemical Characterization and Advanced Device Engineering and testing.

Working at the interface between these domains will enable me to advance in a timely manner. During my career I indeed developed a vast knowledge in Material and Interface Physics and a deep expertise in Device Engineering crossing different fields of new generation PV technologies, in particularly working Oxford University on Organic and Hybrid Solar Technology and for 4 years at EPFL, where my group contributed to pioneer Hybrid Perovskite Technology.

At UniPV for the last two years, I transferred my knowledge and create a multidisciplinary research group of nowadays 15 people where I developed from scratch a state-of-the-art research Lab consisting of a pilot line for solar cell fabrication and unique set-ups for material and device optoelectronic characterization.

In the frame of solar technologies evolution as represented in the NREL chart, emerging Photovoltaics had a disruptive role since back to the 90's. More recently, a new technology emerged which has been skyrocketing the field, with efficiency beyond 25% upon only a decade of research, which is something that's unprecedented compared to the development of any other existing solar technologies.

They are based on hybrid perovskite semiconductors, listed for their incredible impact on solar as one of the top ten technology by the world economic forum in 2016.

What is the structure of hybrid perovskite?

Hybrid perovskites are 3D semiconductors forming an ABX₃ structure where A is the organic material, B the metal and X the halogen. Methylammonium lead iodide has been the pioneer for this class of materials. Its strong and panchromatic absorption is one of the main physical characteristics responsible for the explosion of this materials in photovoltaics, along with their low cost, due to their easy solution-based fabrication methods.

However, 3D perovskites solar cells are not stable. Upon exposure to water, the 3D structure collapses, leading to irreversible material degradation. And, consequently, possible release of toxic elements in the environment. Huge barriers for future market uptake.

I am aware of the recent research efforts trying to stabilize the 3D perovskite; however, they are still not sufficient, requesting a radically new solution.

Research is moving to a different class of perovskites arranging in a 2D layered structure. In this case, large hydrophobic organic cations are used section the 3D structure forming organic barriers which isolate single inorganic sheets.

2D perovskites have huge potential to solve the stability issue since they possess new exciting physical and structural properties.

In particular, the presence of hydrophobic cations enhances the water repellent character of the material, resulting in no degradation upon water exposure, in contrast to the 3D.

Using 2D perovskites I have recently pioneered 2D solar cells stable for 1 year, which is the actual world record for perovskite technology, evidence of the feasibility of my new concept.

However, solar cell efficiency is too low, mainly due to the narrower absorption of the 2D compared to the 3D perovskite. Thus, a big jump in the efficiency is needed.

From this initial result I moved towards my innovative idea to create new multi-dimensional 2D/3D hybrid interfaces, core of my ERC project HYNANO. I developed a new synergy between fundamental understanding of material structure and interface physics to create a new hybrid framework combining the stability of the 2D with the efficiency of the 3D. The stable 2D acts as water-repellent layer preserving the 3D functioning. The 2D/3D interfaces is the core of the perovskite sandwiched device.

At the interface new functions and physical properties emerge. Thanks to my experience in interface engineering and physics, I am controlling their design to tailor their properties to create an efficient and stable hybrid system which will outperform the single components.

To obtain the synergistic interaction at the interfaces new fundamental understanding is needed. Fundamental scientific questions such as how to extend the carrier lifetime, ensure charge separation limiting the recombination, ultimately driving efficient charge transport in the device must be targeted.

From a project point of view, simultaneously addressing these questions is challenging but highly rewarding.

I will meet this challenge by directly testing the new materials into working devices.

The recent work published in December 2021 in *Science Advance* demonstrates the potential of this approach. We combined a series of 2D cations as bottom and surface passivation in a sandwiched perovskite device based on a pin architecture. Using such surface modifiers, we reached world record efficiency approaching 24% thanks to the synergistic combination of improved film quality, reduced non radiative recombination (since the 2D cations passivate the surface) and improved stability – see Degani et al *Sci. Advances* 2021 [1]. Working in close loop between device fabrication

and interface characterization is the key enabling one to recognize the good materials relevant for practical application with the final aim to realize efficient and stable multi-dimensional 2D/3D device a game changer for perovskite solar cells. as demonstrated by our recent studies appeared in Cacovich et al *Nature Comm* 2022 [2].

BIBLIOGRAPHY

- [1] M. Degani et al. **Sci. Adv.** 7, 49, 7, DOI: 10.1126/sciadv.abj79302021, 2021
- [2] Cacovich S. et al *Nature Comm.* 2022 13:286, 2022