



SEP
SECRETARÍA DE
EDUCACIÓN PÚBLICA



TECNOLÓGICO NACIONAL DE MÉXICO
Instituto Tecnológico de Tuxtla Gutiérrez

INSTITUTO TECNOLÓGICO DE TUXTLA GUTIÉRREZ **INGENIERÍA ELECTRÓNICA**

INFORME FINAL DEL PROYECTO DE RESIDENCIA PROFESIONAL

**“EFECTO DE PARTICULAS NANOESTRUCTURADAS EN
CELDAS FOTOVOLTAICAS ORGANICAS”**

**LUGAR DONDE SE REALIZA EL PROYECTO: CENTRO DE
INVESTIGACIONES EN ÓPTICA, A.C.**

**DESARROLLADO POR:
“LUIS FRANCISCO AMORES TAPIA”
“No. DE CONTROL 10270471”**

**Asesor interno: M.C. Raúl Moreno Rincón
Asesor externo: J. Oracio Cuauhtemoc Barbosa Garcia**

Tuxtla Gutiérrez, Chis. Enero – Junio 2015

<i>ABSTRACT</i>	¡Error! Marcador no definido.
CAPÍTULO I GENERALIDADES	¡Error! Marcador no definido.
1.1 Introducción	¡Error! Marcador no definido.
1.2 Problemática	¡Error! Marcador no definido.
1.3 Justificación	¡Error! Marcador no definido.
1.4 Objetivos	¡Error! Marcador no definido.
1.4.1 Objetivo general	¡Error! Marcador no definido.
1.4.2 Objetivos particulares	¡Error! Marcador no definido.
1.5 Alcances y limitaciones	9
1.6 Caracterización del área en que se participó....	¡Error! Marcador no definido.
1.6.1 Antecedentes de la empresa	¡Error! Marcador no definido.
1.6.2 Organigrama de la empresa	¡Error! Marcador no definido.
1.6.3 Misión, Visión y Valores	¡Error! Marcador no definido.
1.6.4 Descripción del área donde se realizó el proyecto	¡Error! Marcador no definido.
CAPITULO II	¡Error! Marcador no definido.
2.1 Antecedentes	¡Error! Marcador no definido.
CAPÍTULO III MARCO TEÓRICO	18
3.1 Fundamento teórico	18
3.1.1 Síntesis y caracterización de celdas solares orgánicas con P3HT: PCBM	21
3.1.2 Celdas solares de polímero basadas con P3HT: PC71BM dopadas a diferentes concentraciones con grafeno tratado con isocianato	22
3.1.3 Celdas solares inorgánicas	21
3.1.4 Principio de funcionamiento de una celda solar de silicio	¡Error! Marcador no definido.
3.1.5 Estructura y funcionamiento de una celda solar orgánica	28
3.1.6 Fabricación y caracterización de celdas solares orgánicas	¡Error! Marcador no definido.



3.1.7 Estabilidad de masa heterounión en células solares orgánicas con diferentes proporciones de mezcla de P3HT: PCBM	26
3.1.8 Caracterización optoelectrónica de celdas solares	28
3.1.9 Nanoparticulas	29
3.2 Equipos y metodos para la fabricación de celdas solares poliméricas.....	34
CAPÍTULO IV DESARROLLO DE LA INVESTIGACION	41
4.1 Desarrollo experimental	41
4.1.1 Fabricación de celdas solares orgánicas con arquitectura heterounión en masa configuración directa	41
4.1.2 Metodología aplicada	46
4.1.3 Calcular las eficiencias de las celdas solares orgánicas	47
4.2 Implementación	50
CAPÍTULO V RESULTADOS.....	51
5.1 Gráficas obtenidas.....	51
5.1.1 Curvas I-V de celdas solares orgánicas con arquitectura heterounión en masa configuración directa	54
5.1.2 Curvas I-V obtenidas de celdas solares orgánicas con arquitectura heterounión en masa configuración directa con P3HT-C71 adicionando nanopartículas de oro de 10 nm	57
Conclusiones y recomendaciones	
Competencias desarrolladas y/o aplicadas	
Anexo I. Conceptos Basicos	
REFERENCIAS	

ABSTRACT

In the world of solar energy, organic photovoltaic cells have great future are a little different in terms of its construction and its system of converting sunlight into energy, to the traditional. Although less expensive, for now they do not have the same performance as conventional photovoltaic cells. It has been found that organic solar cells can improve performance by supplying gold nanoparticles. The research shows that these new photovoltaic cells have improved their performance by up to 20%.

This manuscript presents the methodology, compounds, instruments and equipment to fabricate organic solar cells with gold nanoparticles. It describes theory to fabricate organic solar cells in bulk heterojunction architecture, the polymers and materials such as P3HT and fullerene PC71BM, methods and procedures used for manufacturing and performing characterization measurements using measuring equipment is described. The main objective of the project was to observe the effect of nanoparticles on organic photovoltaics cells.

This work was done in the laboratories of Spectroscopy and Materials of the Group of Optical Properties of Matter of the Research Center in Optics, GPOM-CIO (Grupo de Propiedades Ópticas de la Materia del Centro de Investigaciones en Óptica).

CAPÍTULO I GENERALIDADES

1.1 INTRODUCCIÓN

La energía solar es un recurso renovable sub-aprovechado en México en la generación de electricidad a pesar de que nuestro país cuenta con altos niveles de irradiación solar anual. A diferencia de otros países donde la irradiación solar anual es muy pequeña, en México, la riqueza solar pudiera ser captada y aprovechada mediante el uso de dispositivos fotovoltaicos incluso no tan eficientes. **[1]**

Desde el descubrimiento de los semiconductores orgánicos, ha existido un notable esfuerzo para que estos materiales puedan emular el comportamiento de dispositivos basados en materiales inorgánicos. Ejemplos de estos dispositivos son las celdas solares, transistores de efecto de campo (FETs) y los diodos emisores de luz (LEDs) orgánicos.

Las celdas solares orgánicas (OPVs) han tenido una evolución de la eficiencia de conversión lograda desde la década de los 70's: en 1975 fue del 0.001 %; en 1986 del 1 %; en 2006 fue del 5.5 %; en 2009 fue del 6.1 % y actualmente (2011-2012) se han reportado eficiencias superiores al 9 %. Sin embargo es de importancia señalar que en los grupos de investigación y en la literatura la mayoría de las investigaciones reportan eficiencias típicas entre 3 y 5 %. **[2]**

Las celdas solares orgánicas son aquellas que tienen por material activo una mezcla entre un polímero semiconductor y un derivado del fullereno. La investigación realizada sobre este tipo de dispositivos demuestra que son una

prometedora fuente de energía alterna, debido a que su costo de producción es menor al de las celdas de silicio. Estas celdas pueden ser fabricadas sin necesitar condiciones especiales, ya que se utilizan técnicas sencillas para el depósito de películas de polímeros tales como el Spin-Coating, Dr. Blade, Roll to Roll, entre otras. Otra ventaja que poseen es su capacidad de ser fabricadas sobre diversos sustratos por ejemplo vidrio, plástico flexible y materiales de uso textil. A pesar de que las eficiencias logradas con este tipo de celdas no son del orden de las celdas de silicio, actualmente se llevan a cabo estudios, investigaciones y pruebas de laboratorio que permitan fabricar celdas cada vez más eficientes y con mayor tiempo de vida. Para lograr esto, se han dedicado esfuerzos para desarrollar diferentes arquitecturas en la estructura de una celda orgánica entre las que podemos nombrar a las celdas bicapa, heterounión en masa de configuración directa o invertida, arquitectura tándem, etc.

En el Grupo de Propiedades Ópticas de Materia del Centro de Investigaciones en Óptica (GPOM-CIO), ha trabajado en el estudio y fabricación de dispositivos electrónicos orgánicos OLEDs y celdas solares desde hace más de 8 años, utilizando diversos materiales poliméricos y compuestos de bajo peso molecular fluorescentes, estos materiales pueden ser comerciales o sintetizados en el grupo o alguno de los grupos con los que colabora.

1.2 PROBLEMÁTICA

Los mayores retos en la fabricación de celdas solares orgánicas consisten en generar celdas con altas eficiencias y mayor estabilidad. Para ello, es importante conocer las propiedades fisicoquímicas de los compuestos y polímeros que se utilizan para su fabricación. Actualmente, para desarrollar mejores celdas fotovoltaicas con materiales orgánicos el Grupo de Propiedades Ópticas de la Materia (GPOM) del Centro de Investigaciones en Óptica (CIO), realiza investigación sobre celdas solares orgánicas para obtener mejores eficiencias de

conversión y es líder en el país en este tema. Las celdas que se han desarrollado en el GPOM tienen una eficiencia del 6%; se busca lograr que esas celdas tengan una mejor estabilidad. [2] Sin embargo no hay antecedentes de que se hayan estudiado, fabricación y/o caracterizado celdas solares orgánicas con nanopartículas de oro.

El proceso de fabricación de estos dispositivos es muy similar a una celda solar orgánica con arquitectura heterounión en masa, tal que cualquier variación en el espesor o método de depósito de cada una de las capas que componen el dispositivo, influye significativamente en su funcionamiento, por lo que se debe conocer los efectos de las nanopartículas en la variación de diferentes espesores, concentraciones y formas de aplicar dichas capas que lo componen. Por ello, es importante también conocer y controlar el ambiente en el cuál se fabrican estos dispositivos fotovoltaicos.

1.3 JUSTIFICACIÓN

Las celdas solares orgánicas con nanopartículas de oro han demostrado que se incrementaba la conversión de la luz solar hasta en un 20 por ciento en comparación de un dispositivo que no las contenga, por eso es importante desarrollar y optimizar una metodología adecuada para la fabricación de este tipo de celdas, así como conocer y controlar las condiciones de su fabricación. Además, la importancia de los materiales orgánicos radica en su estructura y propiedades que permite que los dispositivos fabricados sean, delgados, ligeros y sobre todo flexibles abriendo una gran gama de posibles aplicaciones. Sin embargo la tecnología sobre electrónica orgánica en México es escasa, incluso en el GPOM-CIO que tiene años trabajando con este tipo de materiales y dispositivos tales como celdas solares y leds orgánicos, no cuenta con antecedentes respecto a la fabricación de dispositivos OPV's con nanopartículas de oro, por lo que con este proyecto se pretende comenzar a trabajar con este tipo de dispositivos. Con el propósito de optimizar este tipo de dispositivos, se

probarán trabajar polímeros como P3HT y fullerenos PC71BM por lo que se necesita llegar a una metodología sobre la estructura a emplear, parámetros de depósito y concentración de los materiales poliméricos a emplear, así como conocer el proceso de medición para caracterizar estos dispositivos. Con lo que se empleará los conocimientos sobre materiales poliméricos y compuestos de bajo peso molecular que posee el GPOM-CIO así como con la literatura con la que se cuenta.

1.4 OBJETIVOS

1.4.1 OBJETIVO GENERAL

Fabricar celdas fotovoltaicas con material orgánico adicionando nanopartículas. El efecto de las nanopartículas quedará manifestado en la eficiencia de conversión del dispositivo, celda fotovoltaica. Para ello determinar la densidad de corriente, voltaje de corto circuito y el factor de llenado. Con el presente trabajo se busca incrementar la captura de fotones dentro del dispositivo, y de esta forma incrementar la eficiencia.

1.4.2 OBJETIVOS ESPECÍFICOS

- Diseñar e implementar de una celda solar a base de polímeros semiconductores.
- Fabricar de celdas solares orgánicas con arquitectura heterounión en masa configuración directa y obtener eficiencias cercanas o mayores al 3%.
- Insertar nanopartículas de oro a las celdas solares orgánicas.
- Estandarizar y estabilizar parámetros de fabricación de celdas solares poliméricas con nanopartículas de oro.

- Comparar la eficiencia y estabilidad de celdas solares poliméricas con y sin nanopartículas; así como observar los efectos adicionales que presenten las celdas solares que contengan las nanopartículas.

1.5 ALCANCES Y LIMITACIONES

Este proyecto se enfoca en el estudio y desarrollo de celdas solares orgánicas con arquitectura heterounión en masa configuración directa con la adición de nanopartículas de oro.

Se establecerá una metodología para la fabricación de prototipos de celdas solares a nivel laboratorio, los parámetros de depósito, concentración, materiales adecuados que permitan obtener una mayor eficiencia de conversión y la forma en la que se realizarán las mediciones de caracterización del dispositivo. Y a través de un estudio comparativo observar y estudiar los efectos en la conversión solar de los dispositivos en cuestión, sentando bases para un futuro seguimiento del proyecto en el GPOM-CIO.

El mayor reto de este proyecto es la incapacidad en el control y manejo de nanoestructuras antes y durante la fabricación de los dispositivos fotovoltaicos, por lo tanto, el objetivo principal es establecer una metodología y condiciones apropiadas para el correcto funcionamiento, así como la obtención de eficiencias aceptables que justifiquen el empleo de nanopartículas de oro.

1.6 CARACTERIZACIÓN DEL ÁREA EN QUE SE PARTICIPÓ

1.6.1 ANTECEDENTES DE LA EMPRESA

Acorde con el objetivo que el CONACYT estableció desde sus inicios, de fomentar una cultura competitiva basada en el desarrollo científico y tecnológico, enmarcando sus acciones en las políticas y objetivos del Plan Indicativo de Ciencia y Tecnología 1976-1982, el Consejo tuteló la fundación del Centro de Investigaciones en Óptica, Asociación Civil, (CIO), en la ciudad de León Gto.

Dicho proceso de creación tuvo su inicio legal el 18 de Abril de 1980, en un acto protocolario en el que se levantó el acta constitutiva de la nueva institución, donde aparecen como firmantes quienes en la época eran autoridad en niveles de gobierno y dependencias oficiales: el Dr. Edmundo Flores, Director General del CONACYT, el Dr. Guillermo Soberón Acevedo, Rector de la UNAM, el Lic. Enrique Velasco Ibarra, Gobernador Constitucional del Estado de Guanajuato y el Lic. Harold Gabriel Appetl, Presidente del Ayuntamiento Constitucional de la Ciudad de León Gto.

La firma del acta constitutiva fue el corolario de múltiples afanes, retos, trabajo y logros previos que fueron encabezados por Dr. Daniel Malacara Hernández, primer científico mexicano en obtener un Doctorado en Óptica en la Universidad de Rochester en 1965, y actual Investigador Emérito del S.N.I., quien es referencia obligada en el desarrollo de la Óptica en todo el mundo. Es esa época y desde diversos encargos y puestos científicos y académicos tanto en la UNAM (en la Facultad de Ciencias primero y más adelante en el Instituto de Astronomía) y después en el INAOE (en donde colaboró en el proyecto para fundarlo a partir del antiguo Observatorio Astrofísico de Tonantzintla), trabajó convencido de la necesidad impostergable de crear en México una institución científica del más alto nivel dedicada en exclusiva al desarrollo de la Óptica, rama del conocimiento que tal como fue previsto por él mismo, es actualmente pieza fundamental y base estratégica de importantes y valiosos desarrollos en ciencia y tecnología.

En el esfuerzo por llevar a la realidad lo que entonces era una idea visionaria participaron desde múltiples frentes, personalidades que son ampliamente reconocidos por su trabajo académico, como el Dr. Arcadio Poveda Ricalde, quien impulsó primero la vocación científica del entonces joven estudiante Malacara, como su profesor en varios cursos en la UNAM y lo incorporó después al Instituto de Astronomía, siendo además su tutor de tesis de la licenciatura en física y alentando y apoyando sus posteriores pasos en el INAOE y en la fundación del CIO. Igualmente recibió apoyo en muchas etapas de su desarrollo

profesional de parte del Dr. Guillermo Haro Barraza quien en su momento lo incluyó en el ya mencionado proyecto de transformación del Observatorio Astrofísico en Instituto Nacional y más adelante lo alentó en la constitución del CIO. Similar importancia tuvieron además los titulares de los niveles de gobierno estatal y municipal que ocupaban los cargos en el periodo previo al de quienes firmaron el acta constitutiva, pues fueron los primeros los que acogieron la idea, alentaron el impulso y otorgaron las facilidades necesarias, nunca sencillas ni desdeñables, para que la fundación del CIO llegara a buen término en el estado de Guanajuato y en la ciudad de León más concretamente, en un escenario que tuvo como ingredientes adicionales la oferta y competencia de otros estados de la república para recibir al CIO, en el marco de descentralización impulsada fuertemente en ese momento por el gobierno federal. Esas personas que con sus decisiones y apoyo concretaron el destino del Centro fueron el Lic. Luis H. Ducoing Gamba como titular del gobierno del estado y el C. Roberto Plascencia Saldaña como máxima autoridad del Consejo Municipal que regía a la ciudad de León en la época en que el CIO se gestaba.

1.6.2 ORGANIGRAMA DE LA EMPRESA

El organigrama del Centro de Investigaciones en Óptica (**Figura 1.1**) está integrado por el Dr. Elder de la Rosa Cruz (Director General), el Dr. Luis Armando

Díaz Torres
Formación
Dr. Gabriel
(Director de

(Director de
Académica),
Ramos Ortiz



Investigación), Dr. Gonzalo Paéz Padilla (Director de Tecnología e Innovación) y el C. Gerardo Sánchez (Director Administrativo).

Fig. 1.1 Organigrama del Centro de Investigaciones en Óptica.

1.6.3 MISIÓN, VISIÓN Y VALORES

Misión: El Centro de Investigaciones en Óptica, A.C. es un centro público cuyo propósito es desarrollar investigación básica y aplicada en el campo de la óptica, que contribuya a los esfuerzos de la comunidad científica para impulsar las fronteras del conocimiento y su aplicación en el sector productivo y social del país, además de la formación de recursos humanos de alto nivel, el desarrollo y la transferencia de tecnología, y la contribución de una cultura científica y tecnológica en la sociedad mexicana.

Con base en la Misión, son objetivos estratégicos del Centro: Contribuir al conocimiento científico, a través de la investigación teórica y experimental en óptica y disciplinas afines, Fortalecer la capacidad científica y tecnológica del país, a través de programas de especialidad y postgrados de calidad internacional, Contribuir al crecimiento tecnológico del país, a través del desarrollo y la transferencia de tecnología, y Contribuir al desarrollo de una cultura científica y tecnológica en la sociedad mexicana, a través de la divulgación y difusión del conocimiento científico.

Visión: Ser un Centro de investigación de excelencia, con liderazgo nacional y reconocimiento internacional creciente en el campo de la óptica, ocupando un lugar central en el desarrollo de la ciencia y la tecnología de nuestro país.

Valores: Conocimiento, observancia y aplicación del marco jurídico que rige la actuación del servicio público: Conocer, respetar, cumplir y hacer cumplir la normatividad aplicable al servicio público (leyes, reglamentos, acuerdos, lineamientos, etcétera).

Uso del cargo público: Todos los empleados del CIO, estamos sujetos en el desempeño del empleo, cargo o comisión, a las obligaciones previstas en la Ley Federal de Responsabilidades Administrativas de los Servidores Públicos, a fin de salvaguardar los principios de legalidad, honradez, lealtad, imparcialidad y eficiencia que rigen en el servicio público.

Uso Transparente de la Información: Dar cumplimiento a la Ley Federal de Transparencia y Acceso a la Información Pública Gubernamental (LFTAIPIG).

Uso y asignación de recursos: Los bienes, instalaciones, tiempo laboral, recursos humanos y financieros del Centro, deben ser utilizados únicamente para cumplir con sus objetivos, adoptando siempre criterios de racionalidad y ahorro.

Conflicto de intereses: Los funcionarios deberán informar a quien corresponda el hecho de encontrarse ante un conflicto de intereses en el que se pueda obtener beneficios personales a costa de los intereses del CIO.

Relaciones entre servidores públicos: Todos los trabajadores del CIO deberán conducirse con dignidad y respeto hacia sus compañeros de trabajo, no importando la edad, religión, preferencia sexual, lugar de nacimiento o nivel jerárquico.

Equidad de Género: Los funcionarios del Centro debemos atender compromisos para que se generen las condiciones que hagan posible la igualdad de oportunidades entre mujeres y hombres.

Actitud Profesional: Salud, higiene, seguridad y mejoramiento ecológico: Colaborar para crear un adecuado ambiente de trabajo que sea seguro y saludable, con el fin de evitar poner en riesgo la salud e integridad del personal del CIO, observando el cuidado y la protección del medio ambiente.

Consideraciones éticas en las actividades sustantivas del Centro: En la búsqueda de la excelencia y el mantener la credibilidad institucional, es necesario ratificar nuestro apego al Código de Conducta, así como la observancia de principios éticos señalados en el mismo.

1.6.4 DESCRIPCIÓN DEL ÁREA DONDE SE REALIZÓ EL TRABAJO

El Grupo de Propiedades Ópticas de la Materia (GPOM) pertenece a la División de Fotónica del Centro de Investigaciones en Óptica, CIO. Es un grupo de investigación que realiza trabajo de forma interdisciplinaria e interinstitucional el grupo se encuentra conformado por físicos, químicos e ingenieros con diversas especialidades y, tiene colaboraciones con académicos de diversas instituciones nacionales e internacionales.

Fue fundado por el Dr. Oracio Barbosa García en 1998 e inicialmente eran un total de tres investigadores, dos de ellos jóvenes académicos recientemente graduados, uno graduado en el país y otro en el extranjero; no se contaba con laboratorios. Para el año 2000 se integran otros dos jóvenes investigadores nacionales y en el 2001 un investigador de la India como posdoctoral. En ese año se logra apoyo económico institucional y de CONACyT; con el primer apoyo se obtienen espacios para los laboratorios de Espectroscopia y de Materiales y, con el segundo, se adquiere equipo inicial para ambos laboratorios. El proyecto de CONACyT fue de Grupo y en su tiempo fue el de mayor monto económico (\$ 3

800,000 M.N.) otorgado al centro siendo el responsable el Dr. Barbosa. El título de este proyecto era “Estudio de los procesos microscópicos que afectan el desempeño de materiales láser y no-lineales, su caracterización óptica y síntesis”.

En el periodo 2002-2015 se integraron nuevos investigadores aunque algunos otros se han separado.

Desde su fundación se han logrado proyectos con un monto superior a 35 millones de pesos y han sido principalmente institucionales, de CONCyTEG y de CONACyT. Con estos proyectos se han dado mantenimiento al equipo mayor y comprado varios equipos adicionales para realizar los programas de investigación en los dos laboratorios del Grupo. En particular, el grupo ha enfocado esfuerzos sobre el problema energético y prueba de ello ha sido el haber logrado el apoyo de dos proyectos importantes; uno en el año 2011 mediante el proyecto CONACyT-SENER “Diseño y desarrollo de celdas solares orgánicas (OPVs) eficientes para la generación de energía eléctrica limpia” con un monto económico de \$ 8 542 500 M.N. y otro en el año 2013 por 3 400 000 M.N. mediante las convocatorias de la Secretaría de Energía y el CONACyT; en ambos proyectos el investigador responsable es el Dr. Maldonado Rivera. Estos dos proyectos en particular han sido motivadores para extender el ámbito de trabajo a dispositivos optoelectrónicos con materiales orgánicos [3].

Actualmente el trabajo de investigación del GPOM está enfocado básicamente en:

- Desarrollo, caracterización y estudio de materiales fotónicos inorgánicos y orgánicos, atendiendo sus propiedades ópticas lineales y no-lineales tanto en forma de bulto como en nano-estructuras así como su implementación en dispositivos opto-electrónicos (celdas solares orgánicas) y sensores.

- Desarrollo de la instrumentación y la aplicación de técnicas espectroscópicas en diversos campos como la bio-fotónica, alimentos, fármacos, arqueología, industria del calzado y pintura.

CAPÍTULO II

2.1 ANTECEDENTES

En el año de 1883, el inventor Charles Fritts construye la primera celda solar hecha de silicio con una delgada capa de oro, alcanzando una eficiencia del 1%.

Para 1940, el inventor Rusell Ohl fabrica la celda de silicio y la patenta en 1946 bajo el nombre de “Light sensitive device”. Fue en 1953 cuando en los laboratorios Bells, experimentando con semiconductores, accidentalmente se encontraron que el silicio (**Si**) con ciertas impurezas es muy sensible a la luz. De esa forma los científicos Daryl Chapin, Calvin Fuller y Gerald Pearson de los laboratorios Bells Telephone desarrollaron la primera celda solar con una eficiencia ya del 5% de su funcionamiento.

La primera célula delgada se desarrolla en 1967 y está constituida por sulfuro de cadmio (**CdS**). Además de que se descubren otros materiales con propiedades fotovoltaicos como el arseniuro de galio (**GaAs**), arseniuro de indio (**InAs**) y el telurio de cadmio (**CdTe**). Así como también se empiezan a implementar las celdas multiunión y la tipo tándem.

La tecnología fotovoltaica inorgánica ha tenido grandes avances a lo largo del siglo pasado y parte de este, logrando que sus eficiencias alcancen más de un 20% convirtiéndose una alternativa para el uso de combustibles fósiles al momento de la producción de energía eléctrica. Sin embargo el costo de producción de dicha tecnología se dispara por los procedimientos tan complejos que conlleva, lo que provoca una limitación en algunas aplicaciones, además de que durante su fabricación se liberan cantidades de contaminantes, entre ellos dióxido de carbono (**CO₂**).

En 1978 por otro lado, tres científicos al oxidar una película de poliacetileno con vapor de Yodo (**I**), demostraron su conductividad eléctrica aumentaba un millar de veces, incluso llegándose a comparar con el cobre (**Cu**) y la plata (**Ag**). Incluso sus propiedades ópticas eran modificables, ya que también comprobaron su respectiva emisión de luz. Por dicho descubrimiento Hideko Shirakawa, Alan Heeger y Alan MacDimarmi fueron galardonados con el premio nobel en química en el año 2000. Aunque la eficiencia de las celdas inorgánicas sigue estando a la punta, la evolución que han tenido las celdas orgánicas (OPD) ha sido notable. En la década de los setentas la eficiencia fue de 0.001%; en 1986 se registró ya 1%; en 2006 ha sido del 5.5%; en 2009 del 6.1% y en la actualidad se han reportado eficiencias por arriba del 9% [4].

La producción de dichas celdas no requiere procedimientos muy especializados y por lo tanto su fabricación es de más bajo costo que el de las celdas inorgánicas ya que estas últimas requieren de un cuarto limpio para su construcción [5].



En este trabajo se pretende contribuir al rendimiento de la tecnología fotovoltaica orgánica, estudiando algunos materiales para que sean descartados o agregados al momento de la construcción de celdas OPV.

CAPÍTULO III MARCO TEÓRICO

3.1 FUNDAMENTO TEÓRICO Y CONCEPTOS BASICOS

3.1.1 Síntesis y caracterización de celdas solares orgánicas con P3HT: PCBM

Conscientes sobre el calentamiento global y la disminución de las reservas de combustibles fósiles se han acelerado las investigaciones para encontrar fuentes de energía renovable de bajo costo. Las celdas fotovoltaicas orgánicas u OPV's (**Fig. 3.1**) podrían ser una fuente; sin embargo, poseen una lista de desventajas, incluyendo bajas eficiencias, tiempos de vida cortos y electrodos conductores caros. Reemplazar el óxido de indio y óxido de estaño (*ITO*) con *CVD* grafeno se puede eliminar uno de los inconvenientes asociados con celdas fotovoltaicas orgánicas. En este trabajo se llevaron a cabo los primeros pasos hacia la meta de desarrollar un proceso para sintetizar y caracterizar celdas solares invertidas y normales utilizando *poly(3-hexylthiophene) (P3HT)*, *[6,6]-phenyl-C61 butyric acid methyl ester (PCBM)*. El rendimiento y la estabilidad fueron evaluadas para cada tipo de celda solar. La celda solar normal más eficiente alcanzó una eficiencia de conversión de potencia de 2.9%, un fill factor de 0.35 y un voltaje en circuito abierto de 0.49 V. Los intentos para sintetizar celdas invertidas fueron exitosos, y las eficiencias fueron tan altas como 0.61%, con un fill factor de 0.26 y un voltaje en circuito abierto de 0.35V [6].



Fig.3.1 Celdas solares orgánicas fabricadas sobre sustrato de ITO.

3.1.2 Celdas solares de polímero basadas con P3HT: PC71BM dopadas a diferentes concentraciones con grafeno tratado con isocianato.

Las celdas solares a base de polímeros resultan una buena alternativa para la conversión de energía solar y uno de sus beneficios es su bajo costo de producción, además de que los métodos de fabricación se tornan más simples en comparación a las celdas hechas de silicio.

La eficiencia de los dispositivos con **P3TH:PC71BM** esta reportada de entre 2 a 6% y en este trabajo se busca aumentar las propiedades de las celdas dopando con SPFGrafeno a con distintas relaciones: 0, 3, 6, 9, 12 y 15% del peso.

El grafeno muestra excelentes propiedades electrónicas y por su alta movilidad, se convierte en un buen candidato como aceptor para celdas solares orgánicas.

El grafeno presenta la propiedad de transportar mejor los electrones que los fullerenos **PCBM**, sin embargo, por algunos factores como la insolubilidad o impurezas complican el uso de este material para la fabricación de dispositivos por solución. La **fig. 3.2** muestra la estructura básica empleada en celdas solares orgánicas en configuración directa.

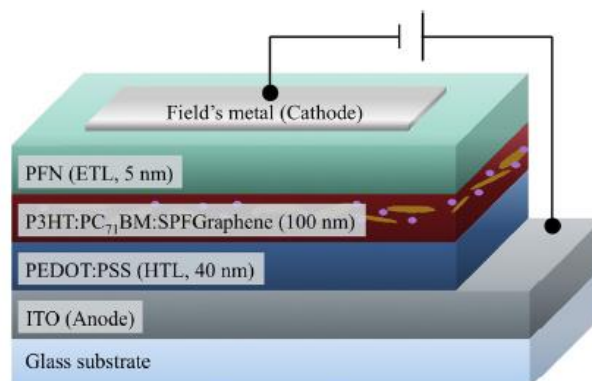


Fig.3.2 Estructura de la celda.

Ya realizadas las celdas con los diferentes parámetros se caracterizaron para observar la curva de densidad de corriente (J) con el voltaje (V) y los resultados se muestran en la **Fig.3.3**.

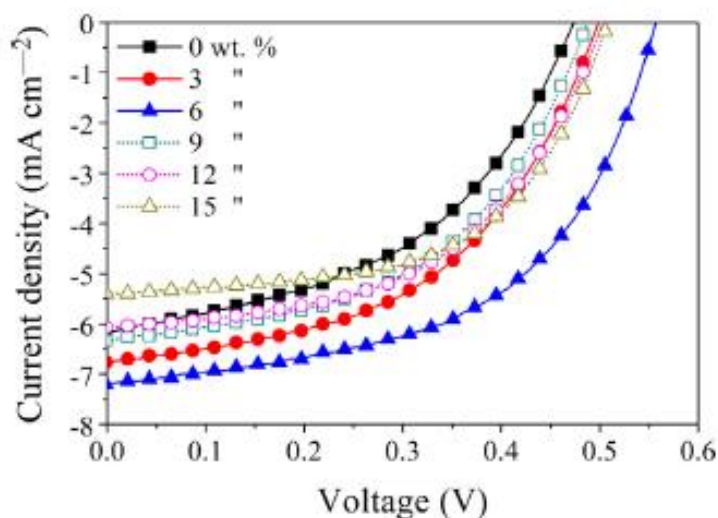


Fig.3.3 Resultados de la curva JV

Como se puede observar, la curva de 6" es la que tiene mejor respuesta y que además a simple vista tiene un mayor FF. En la **Tabla 3.1** que se muestra en seguida, se pueden observar los valores de los parámetros que se contemplan para apreciar las eficiencias de las celdas.

Tabla 3.1 Comparación entre las distintas relaciones.

SPFGraphene (x=wt%)	Roughness (nm)	Jsc(mA cm ⁻²)	Voc (V)	FF	PCE (%)
0	6	6.17	0.472	0.46	1.35
3	7	6.77	0.494	0.50	1.67
6	6	7.20	0.560	0.53	2.15
9	9	6.33	0.483	0.51	1.55
12	11	6.07	0.505	0.52	1.58
15	21	5.40	0.505	0.58	1.57

En la tabla anterior, se confirma el comportamiento de la gráfica con respecto al 6% del peso, teniendo una JSC = 7.20 mA cm⁻² (densidad de corriente), un VOC = 0.560 V (voltaje de circuito abierto), un FF= 0.53 y alcanzando una eficiencia del 2.15%.

Estos dispositivos tienen contactos de FM, lo cual permite la medición de forma más fácil y rápida el rendimiento de las celdas, sin equipos sofisticados o

ambientes especializados, cumpliendo con una eficiencia mejor que la de otros trabajos reportados [7].

3.1.3 Celdas solares inorgánicas

La principal función de cualquier dispositivo fotovoltaico, o celda solar, es la conversión de energía luminosa en energía eléctrica, que puede ser almacenada en baterías o utilizarse directamente. Actualmente las principales celdas solares están basadas en semiconductores inorgánicos y las más generalizadas son a base de silicio (**Si**); **Fig. 3.4**, en ellas se han logrado relativamente altas eficiencias, aunque los costos son bastante altos. El 95% de las celdas solares actuales son de Si, pero la tecnología para su fabricación demanda instalaciones con requerimientos que están al alcance de pocos países.

Las celdas solares de silicio disponibles comercialmente en la actualidad tienen una eficiencia de conversión de cerca del 18%. En la actualidad existen una gran variedad de materiales para la producción de celdas solares de silicio (amorpho, monocristalino o policristalino). De igual manera existen otros materiales semiconductores inorgánicos que han sido empleados para la fabricación de celdas solares, entre ellos podemos mencionar el selenuro de cobre e indio, telurio de cadmio, arseniuro de galio, etc.



Fig. 3.4 Celdas solares fabricadas con Silicio.

3.1.4 Principio de funcionamiento de una celda solar de silicio

Las celdas solares a base de silicio están constituidas por material dopado con exceso de cargas positivas (**silicio tipo p**) y con exceso de electrones (**silicio tipo n**). La luz de ciertas longitudes de onda puede ionizar los átomos en el silicio que se encuentran en la unión entre el **materia tipo n y p** y generar así cargas libres (electrones y huecos) dentro del dispositivo fotovoltaico. Los huecos se mueven hacia la **capa tipo p** y los electrones hacia **capa tipo n**. Aunque estas cargas opuestas se atraen mutuamente, la mayoría de ellas solamente se pueden recombinar pasando a través de un circuito externo fuera del material debido a la barrera de potencial interno. Por lo tanto si se hace un circuito se puede producir una corriente a partir de las celdas iluminadas, puesto que los electrones libres tienen que pasar a través del circuito para recombinarse con los huecos positivos, la **Fig. 3.5** ejemplifica el funcionamiento de una celda solar de silicio.

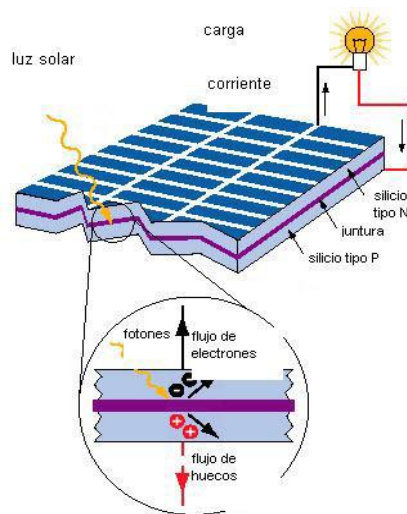


Fig. 3.5 Funcionamiento de una celda fotovoltaica.

3.1.5 Estructura y funcionamiento de una celda solar orgánica

La celda solar orgánica más simple está constituida por una capa activa depositada entre dos electrodos metálicos, un ánodo y un cátodo, con diferentes funciones de trabajo (energía para sacar un electrón de un material). Uno de los electrodos (generalmente el ánodo) debe ser transparente para permitir la entrada de la luz solar hasta la capa activa. El ánodo habitualmente es un óxido conductor se deposita sobre sustrato de vidrio o bien polímero flexible. El cátodo debe ser un metal como por ejemplo **calcio, aluminio o plata**.

La capa activa por su parte es una mezcla de un material electrodonador y uno electroaceptor, emulando a las celdas inorgánicas. Los procesos básicos que tienen lugar en las celdas solares orgánicas pueden describirse en cinco pasos: absorción de la luz solar o excitación, formación de un par electrón-hueco conocido como excitón, difusión del excitón a la interfaz del material donador y aceptor, disociación del excitón (separación del electrón y hueco) y recolección de cargas en los electrodos, lo anterior se ilustra en la **Fig. 3.6**. Si el excitón, después de formarse, demora en disociarse por tener que moverse hasta la interfaz donador-aceptor, las cargas se recombinan y disminuye la eficiencia de la celda, (**Fig. 3.8** ejemplifica el proceso de fotogeneración). Para reducir esa recombinación, y además aumentar la absorción de la luz, se han creado estructuras con dos o más capas de semiconductores orgánicos. Estas capas se denominan capa transportadora de huecos y capa transportadora de electrones y que se depositan cerca del ánodo y cátodo respectivamente, la estructura de una celda orgánica se ilustra en la **Fig. 3.7**. En la **Tabla 1.2** se realiza una comparación de algunas de las principales características de las celdas orgánicas e inorgánicas.

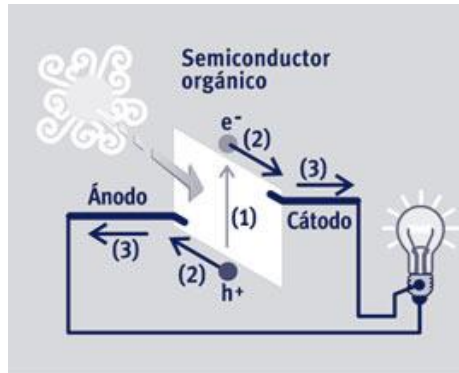


Fig. 3.6 Procesos básicos en una celda solar polimérica.

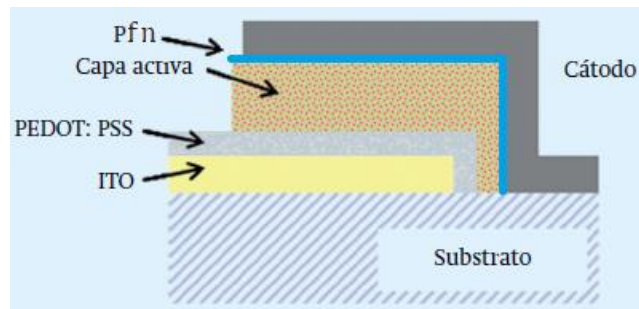


Fig. 3.7 Estructura de una celda solar orgánica.

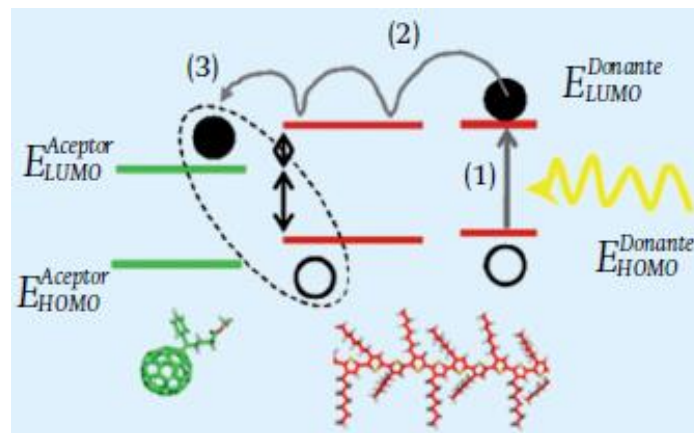


Fig. 3.8 Esquema del proceso de fotogeneración de carga según los niveles energéticos de la combinación donante/aceptor: (1) absorción de luz; (2) difusión excitónica; y (3) transferencia de carga.

3.1.6 Fabricación y caracterización de celdas solares orgánicas

En este trabajo se presenta el desarrollo de celdas solares flexibles y de bajo costo y además medioambientalmente más sostenibles, volviéndose una alternativa en cuanto a los tipos de dispositivos ya existentes, así ampliando la gama de aplicaciones.

Esta tecnología tiene eficiencias menores a diferencia de las celdas de silicio que están más consolidadas, Pero uno de los objetivos de la investigación con los polímeros conductores, es alcanzar una estabilidad óptima que permita dispositivos con tiempo de vida más larga.

A pesar de lo dicho anteriormente, en los últimos años esta tecnología ha tenido grandes avances, llegando hasta alcanzar hasta un 11.1%.

Tabla 3.2 Diferencias entre celdas solares poliméricas e inorgánicas

Características	Celdas solares inorgánicas	Celdas solares poliméricas
Complejidad en su fabricación	Alto	Reducido
Costo del equipo para su fabricación	Elevado	Medio
Eficiencia de conversión energética	>20%	~ 10%
Tiempo de vida promedio	15 a 20 años	Semanas a meses
Flexibilidad en su forma	Limitada, por su rigidez	Buena flexibilidad y rigidez
Impacto ambiental	Significativo	Mínimo
Adaptabilidad de sus propiedades físicas y químicas	Limitada	Elevada
Costo	Elevado	Medio
Peso	Medio	Ligero

En el caso de estos dispositivos tienen la composición de **Vidrio/ITO/PEDOT: PSS/P3HT: PC₆₁BM (1.1:1)/Aluminio.**

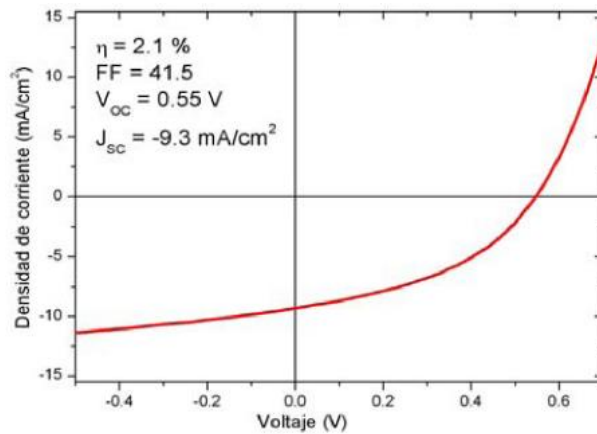


Fig. 3.9 Curva JV

Los dispositivos son de 9 mm^2 con una eficiencia del 2.1% un FF de 0.41, un $V_{OC} = 0.55$ y una $J_{SC} = 9.2\text{ mA/cm}^2$ (curva de resultado en **Fig. 3.9**). La fabricación de estas celdas se llevó a cabo en condiciones de medio ambiente de un laboratorio, sin atmosferas controladas, o una sala blanca. Esto es con el fin de simular un proceso industrial más económico.

Como conclusión, es importante estudiar los factores que intervienen en la degradación de los dispositivos, de esta manera se puede tener un mayor control en la estabilidad de las celdas y así amplificar su tiempo de aplicación [8].

3.1.7 Estabilidad de masa heterounión en células solares orgánicas con diferentes proporciones de mezcla de P3HT: PCBM

Se ha estudiado la estabilidad de las células fotovoltaicas orgánicas en términos de **P3HT: PCBM-71** relación de mezcla como una función del tiempo de almacenamiento. En este estudio, se observa que cuanto más **P3HT: PCBM** aumenta dentro de la capa activa, más la eficiencia de las células disminuye a medida que aumenta el tiempo de almacenamiento. Como resultado, la relación de mezcla mejor optimizado fue la proporción de 1: 0,6 de **P3HT: PCBM-71**, y eficiencia de las células del dispositivo con la proporción de 1: 0,6 mezcla era

4,49%. El equipo con la mejor eficiencia de las células mostraron una buena estabilidad.

En particular, un **poli (3-hexiltiofeno) (P3HT)** y **[6,6]-C71-butírico fenil éster metílico del ácido (PCBM)** sistema de mezcla ha atraído la mayor atención. Recientemente, **P3HT: PCBM** mezclar células solares que alcanzan una eficiencia de conversión de energía (PCE) cercano al 5% se han comunicado.

Se fabricó células solares orgánicas que tienen **P3HT: PCBM-71** como una capa activa y con dióxido de titanio (**TiOx**) como una capa de transporte de electrones, y optimizado la relación de mezcla de la capa activa para mejorar el rendimiento de la célula. La estabilidad de dispositivos con diferentes proporciones de mezcla como una función del tiempo de almacenamiento de hasta 60 días en las condiciones de iluminación oscuridad y bajo en 100 mW / cm² (AM1.5).

En cuanto más la relación **P3HT** comparación con **PCBM** en los pliegues dentro de la capa activa, la eficiencia disminuye. La relación de mezcla que indica el mejor rendimiento de la célula era la proporción de 1: 0,6 de P3HT: PCBM-71, con JSC, VOC, FF, y los valores de PCE de 13.5 mA / cm², 0,64 V, 51,8% y 4,5%, respectivamente (ilustrada en la **Tabla 3.3**). Como resultado, encuentro que el dispositivo con una relación de mezcla optimizada muestra la mejor eficiencia de la célula, y conduce a una buena estabilidad de la célula [9].

Tabla 3.3 Comparación de resultados

Storega Time	Blend Ratio (P3HT:PCBM)	JSC (mA/cm ²)	VOC (V)	FF (%)	PCE (%)
Initial	4 : 1	9.38	0.63	40.29	2.38
	1 : 0.6	13.51	0.64	51.87	4.49
	1 : 0.8	11.61	0.64	50.81	3.72
	1 : 4	9.48	0.80	35.54	2.7
After 60 days	4 : 1	1.00	0.62	29.36	0.18
	1 : 0.6	12.03	0.61	53.40	3.92
	1 : 0.8	10.29	0.61	51.20	3.21
	1 : 4	8.27	0.77	36.78	2.34

3.1.8 Caracterización optoelectrónica de celdas solares

La caracterización optoelectrónica de una celda solar se realiza al medir la eficiencia de conversión (n) (Ec.3.1) bajo la condición de iluminación AM 1.5 (estándar de intensidad de iluminación sobre la superficie de la Tierra cuando el ángulo cenit del Sol es de 48° y corresponde entre $800 \frac{W}{m^2}$ y $1\ 000 \frac{W}{m^2}$). Los parámetros útiles para lo anterior son: el voltaje de circuito abierto (V_{oc}), la densidad de corriente de corto circuito (J_{sc}), el máximo voltaje de potencia (V_m), la máxima densidad de corriente de potencia (J_m) y el factor de llenado (FF) (Ec.3.2). En la Fig.3.10 se describe gráficamente el factor de llenado o Fill Factor (FF).

$$n = FF \cdot \frac{V_{oc} \cdot J_{sc}}{P_{in}} \quad \text{Ec. 3.1}$$

$$FF = \frac{J_m \cdot V_m}{J_{sc} \cdot V_{oc}} \quad \text{Ec. 3.2}$$

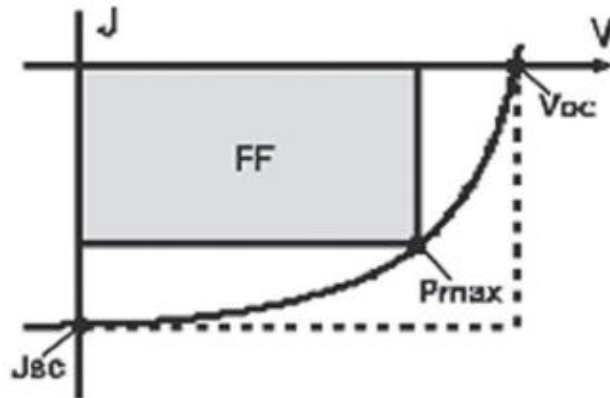


Fig 3.10 Factor de llenado o Fill Factor (FF) de una celda solar.

3.1.9 Nanopartículas

Las nanopartículas son aquellas partículas que están en el rango de 1-100nm. A estas escalas los materiales comienzan a exhibir propiedades diferentes que las de materiales en masa, que afectan a su comportamiento químico y físico. Estas propiedades hacen **NP's** muy atractivas para innumerables aplicaciones, principalmente en la biomedicina, la óptica y campos electrónicos.

Generalmente, los **NP's** pueden ser clasificados en función de su composición en orgánica e inorgánica, o más específicamente en los fullerenos y nanotubos de carbono, metales, cerámicas, semiconductores o puntos cuánticos, y polímeros. Entre ellos, existe un interés especial en **NPs** de metales nobles ya que presentan una fuerte superficie de resonancia de plasmón localizada en la superficie (LSPR), que es una propiedad característica de **NPs** de metal que se convierten en candidatos ideales para muchas aplicaciones.

Propiedades de nanopartículas

Cuando los materiales se reducen de volumen a un tamaño nanométrico, propiedades interesantes emergen, como óptico, electrónico, magnético, y estructural. Las **NPs** que presentan propiedades ópticas, tales como LSPR, se han investigado principalmente ya que son muy prometedores para muchas aplicaciones, principalmente en el área biomédica.

La propiedad óptica de LSPR se atribuye sólo a las nanopartículas de metal, y es importante debido a que mejoran fuertemente el campo electromagnético en la superficie de la NP. Como consecuencia, todas las propiedades radiactivas y no radiantes de **NPs** de metal, tales como la absorción y la dispersión, también se han mejorado; y la luz fuertemente absorbida se convierte en calor rápidamente por una serie de procesos no radiantes.

El interés en **NPs** de metal también reside en que se pueden fabricar fácilmente y sintonizadas para una aplicación específica con sólo modificar su forma y tamaño.

Plasmones de superficie son excitados electromagnéticamente por los electrones libres en la interface entre un metal y un medio dieléctrico, y se describen por las ondas electromagnéticas evanescentes. Si la oscilación colectiva de los electrones libres se limita a un volumen finito como con un NP metal, el plasmón correspondiente se llama de plasmón de superficie localizada.

Resonancia de plasmón superficial (SPR) es un fenómeno óptico que surge de la oscilación colectiva coherente de los electrones libres en la superficie de un metal, que resuena a una frecuencia específica, cuando son perturbados por una onda electromagnética de su posición de equilibrio.

Cuando una partícula esférica de metal interactúa con un campo de luz y su tamaño es mucho menor que la longitud de onda de la luz, el campo electromagnético de la luz puede causar la oscilación colectiva de los electrones libres en el movimiento de superficie lejos de la partícula en una dirección y la creación de un dipolo que puede cambiar de dirección con el cambio en el campo eléctrico. Cuando la frecuencia de la plasmón es aproximadamente la misma que la luz incidente se alcanza una condición de resonancia, dando lugar a la interferencia constructiva y la señal más fuerte para el plasmón, es la intensidad del campo electromagnético se ha mejorado en la superficie de la partícula. Este efecto se conoce como LSPR.

En pocas palabras LSPR ocurre cuando un campo electromagnético impulsa la oscilación colectiva de los electrones libres de un NP en resonancia. Las interacciones de una onda electromagnética con un NP se pueden describir mediante la resolución de las ecuaciones de Maxwell. Soluciones exactas son posibles sólo para casos especiales, como la teoría de Mie; donde las ecuaciones de Maxwell, donde resueltos para una esfera cuando una onda plana incidente en la esfera y está rodeado por un medio dieléctrico, dada la función dieléctrica

de la esfera de metal. Soluciones exactas se han encontrado también una cáscara esférica concéntrica, un esferoide y un cilindro infinito. Para otras partículas con formas geométricas arbitrarias, es necesario proceder por cálculos numéricos con algunas aproximaciones para resolver las ecuaciones de Maxwell.

LSPR depende principalmente de la propiedad dieléctrica intrínseca del metal, el medio dieléctrico, y el patrón de polarización superficie. Por lo tanto, cualquier variación en la forma o tamaño de la partícula que produce un cambio en la polarización superficie induce un cambio en la resonancia de plasmones. Teniendo esto en cuenta, es posible adaptar el LSPR de NPs de metal mediante la modificación de su tamaño y forma. Además, la banda LSPR es mucho más fuerte para **NPs** de metales nobles, especialmente **Au** y **Ag**, que otros metales.

El LSPR induce una fuerte absorción de la luz incidente, que se puede medir usando un espectrómetro de absorción UV-Vis. En el espectro de absorción UV-visible para **NPs** de metal más grandes que 2 nm se observa una banda fuerte y amplia. Esto se llama la banda de plasmón de superficie (SPB).

Nanopartículas Cóncavas

Las nanopartículas con formas geométricas típicas tales como esferas, discos, copas, se han fabricado y utilizado en una gran variedad de aplicaciones, el proceso de fabricación es ampliamente conocido también cómo sintonizar su banda de plasmón de acuerdo con una aplicación específica. Generalmente, estos tipos de **NPs** muestran una banda de plasmón en el rango visible del espectro electromagnético. Sin embargo, algunas aplicaciones como comunicaciones ópticas, o biomédica requieren propiedades en la región NIR mejoradas. En diferentes estudios, se ha demostrado cómo las propiedades ópticas, tales como la absorción y dispersión de la **NPs** dependen en gran medida de su tamaño y forma. Por ejemplo, El Sayed y otros demostraron que para partículas esféricas **Au** de 20 **nm**, la absorción es dominante. Para partículas de 40 nm la dispersión comienza a aparecer, por su parte para **NPs** 80nm la

absorción y la dispersión contribuyen por igual a la extinción, y para partículas de 100 *nm* y el más grande es el efecto de la dispersión es dominante. Por lo tanto, la dispersión en relación de absorción aumenta dramáticamente para partículas de tamaño más grande. Por lo tanto, en aplicaciones fototérmicos se prefieren partículas pequeñas ya que absorben casi toda la luz incidente y luego se convierte de manera eficiente al calor para ir destruyendo las células y tejidos. Por otro lado, se prefieren las partículas más grandes para aplicaciones de formación de imágenes, ya que dispersan principalmente la luz incidente. Estos efectos se reflejan en la banda de plasmón, ya que como aumenta el tamaño de un desplazamiento hacia el rojo en la banda de plasmón se da, pero al tamaño de NP de 100 *nm* o mayor, el desplazamiento hacia el rojo casi desaparecen, en lugar aparece una ampliación en la banda de plasmón; Para superar esto, y sintonizar SPB a NIR e IR regiones un cambio en la forma de NP necesita ser hecho. Diferentes estudios han demostrado la influencia de NP en forma de LSPR. Por ejemplo, para las barras, se observó que la longitud de onda de absorción depende linealmente de la relación de aspecto, que es, cuando la relación de aspecto aumenta la eficiencia de dispersión de luz. Muchas otras formas se han fabricado y usado que mejoran las propiedades ópticas y que pueden ser sintonizado a NIR e IR regiones, como nanocápsulas, triángulos, prismas, etc.

Últimos años, un nuevo tipo de **NPs** se ha investigado activamente, su fabricación, sus propiedades y aplicaciones. Estos son los NP con superficies cóncavas o de facetas de alto índice; **Fig. 3.11** muestra algunos de los NP en esta categoría. Dentro de esta categoría es el grupo de la conocida como ramificada o estrella PN, que comprenden desde monopie, trípode bípode, tetrápodo, a los **NPs** hiper, etc. [10].

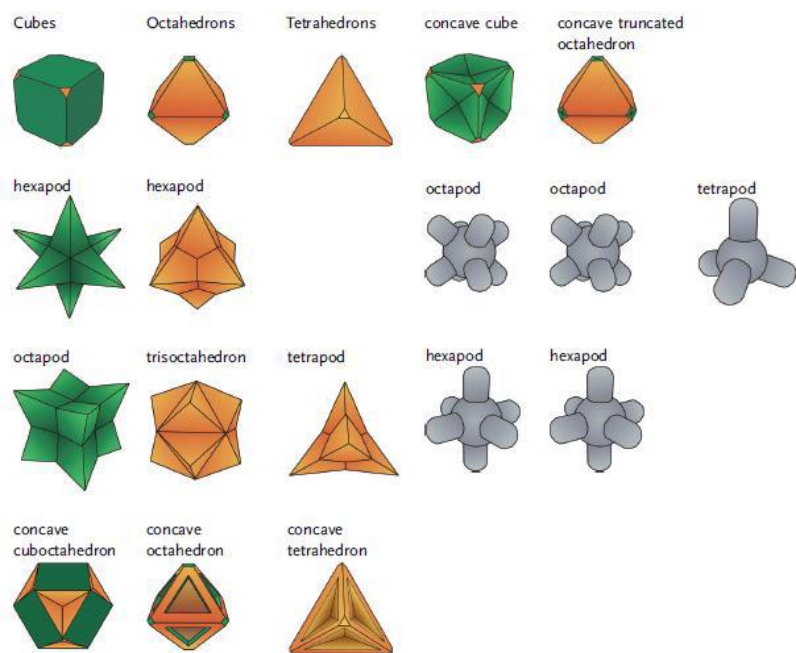


Fig. 3.11 Tipos de nanopartículas.

3.2 EQUIPOS Y METODOS PARA LA FABRICACIÓN DE CELDAS SOLARES POLIMÉRICAS

- **Balanza analítica Discovery**

La balanza empleada en el laboratorio es usada para pesar los materiales que se emplean para las disoluciones con capacidades de 110 a 310 gramos, tales como fullerenos (*PC₆₁BM* (fig. A2), *PC₇₁BM* (fig. A3)) y polímeros (*P3HT* (Fig. A5)). En la Fig. 3.12 se muestra el equipo con el que se trabajó.



Fig. 3.12 Balanza del laboratorio del GPOM-CIO.

- **Spin coating**

El spin coating es un procedimiento utilizado para depositar películas delgadas de material polimérico el cual se encuentra en forma de disolución. Una pequeña cantidad de la disolución es aplicada sobre un sustrato que posteriormente rota de manera controlada, a alta o baja velocidad con el propósito de esparcir la disolución mediante fuerza centrífuga. Las máquinas utilizadas para llevar a cabo spin coating se llaman spin coaters o simplemente spinners.

El espesor final de la película depositada y otras propiedades dependerán de la naturaleza de la disolución y a su vez del disolvente empleado (viscosidad, presión de vapor, tensión superficial, etc.). De igual forma dependen de los

parámetros elegidos para el proceso de spin, esto es, el tiempo de giro, la velocidad rotacional, aceleración (900-8000 rpm). En la **Fig. 3.13** se ilustra el proceso de deposición de películas con esta técnica y en la **Fig. 3.14** se muestra el equipo con el que se trabajó.

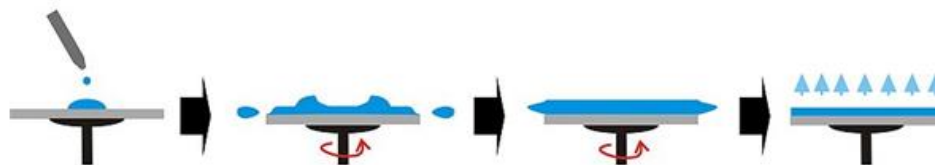


Fig. 3.13 Proceso de depósito de películas mediante spin coating.



Fig. 3.14 Spin-Coating del laboratorio del GPOM-CIO.

- **Parrilla eléctrica**

Las parrillas empleadas en el laboratorio (**Fig. 3.15**), además del sistema de calentamiento, cuentan con sistema de agitación magnético y se utilizan para agitar y calentar las disoluciones de polímero. La solubilidad de los polímeros en los disolventes orgánicos aumenta con la temperatura, es por ello que es conveniente la agitación en presencia de calor. Adicionalmente el control preciso de la temperatura sirvió para dar un tratamiento térmico a las películas depositadas. El tratamiento térmico ayuda a la evaporación de los disolventes empleados en las disoluciones. De igual manera se usan para fundir el **Fields metal** empleado como cátodo en las celdas solares orgánicas.



Fig. 3.15 Parrilla eléctrica del laboratorio del GPOM-CIO

- **Caja de guantes**

Este aparato ha resultado ser de gran importancia en el proceso de fabricación de celdas solares poliméricas, debido a que permite realizar el proceso en una atmósfera aislada de oxígeno, evitando así que los polímeros, compuestos y metales se oxiden. De igual manera se puede utilizar para almacenar las celdas terminadas, evitando que entren en contacto directo con el oxígeno y alargando su tiempo.

Una caja de guantes es un contenedor sellado el cual está diseñado para permitir a una persona manipular objetos dentro de una atmósfera separada. Montados frente a la caja se encuentran unos guantes dispuestos de tal forma que el usuario pueda colocar sus manos dentro de ellos y realizar tareas sin romper o atravesar la contención. Una caja de guantes usualmente posee una contención transparente para permitir al usuario observar lo que está manipulando.

El gas dentro de una caja de guantes es bombeado a través de una serie de tratamientos con dispositivos que remueven solventes, agua y oxígeno del gas. En el laboratorio de materiales del GPOM se cuenta con dos cajas de guantes, las cuales se ilustran en la **Fig. 3.16**



Fig. 3.16 Cámara de guantes del laboratorio del GPOM-CIO

- **Baño Ultrasonico**

La sonicación es la aplicación de la energía de ondas mecánicas en el rango del ultrasonido (ondas ultrasónicas) para agitar las partículas de una muestra. Una corriente eléctrica es aplicada a un sistema piezoeléctrico (sistema mecánico) que genera vibraciones ultrasónicas. El equipo puede ser programado con diferentes tiempos de funcionamiento e igualmente puede regularse la temperatura de trabajo. . En el laboratorio se utiliza la sonicación para remover partículas orgánicas o impurezas que puedan estar presentes en los sustratos utilizados para fabricar las celdas. **Fig. 3.17** se muestra la cuba de ultrasonido utilizada en el laboratorio de materiales del GPOM.



Fig. 3.17 Equipo para realizar baño sónico utilizado en el laboratorio de materiales del GPOM, marca Cole-Parmer 8892.

- **Tratamiento de Plasma**

El plasma es un gas parcialmente ionizado compuesto de iones, radicales, metaestables, y moléculas neutras. Realiza el trabajo de pulido de la superficie de un sustrato, es decir, remueve impurezas y restos de residuos orgánicos, además de que activa una capa hidrofóbica para volverla hidrofílica (que puedan ser depositados sobre ella algunos compuestos diluidos en agua) o bien cuando se requieren superficies completamente limpias (**Fig. 3.18**). Se puede utilizar tratamiento de plasma con oxígeno (efectivo para eliminar grasas y aceites de las superficies), nitrógeno o hidrogeno (poderoso agente reductor, elimina películas de óxido de los metales). El plasma reacciona con las moléculas depositadas sobre la superficie de la pieza de trabajo, las rompe y las convierte en compuestos volátiles. El tiempo de la muestra a exposición del tratamiento de plasma depende principalmente del tiempo de vida del equipo. Las muestras pueden ser expuestas desde unos cuantos segundos hasta horas de 0 – 100W de potencia. En la **Fig. 3.19** se muestra el equipo que se utilizó en el laboratorio.

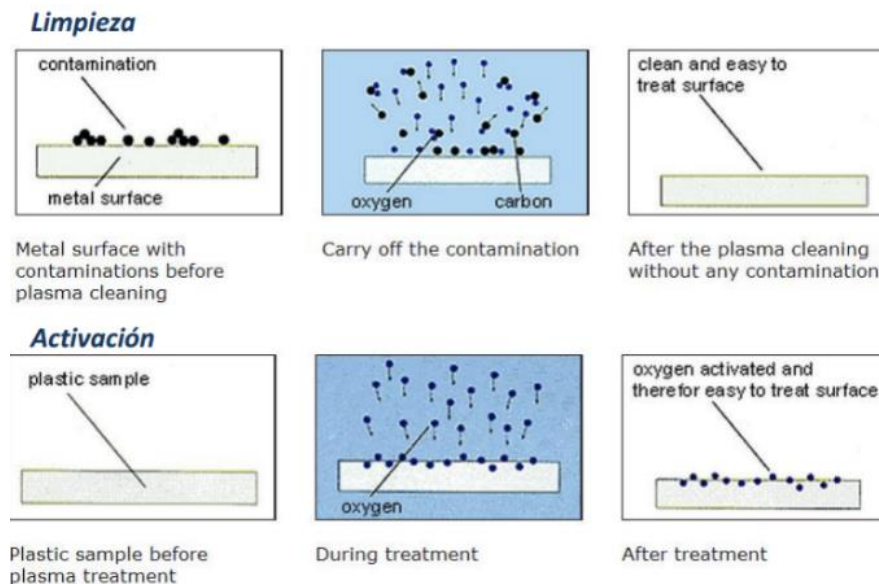


Fig. 3.18 Efectos producidos por el tratamiento de plasma



Fig. 3.19 Equipo del laboratorio de materiales.

- **Equipos para caracterizar celdas solares orgánicas**

La potencia incidente sobre celdas solares orgánicas para su caracterización debe ser de 100 mW/cm^2 (1 sol). Cuando se lleva a cabo la caracterización de una celda, debe calibrarse la fuente de excitación a esta potencia. Para ello se utiliza un medidor de potencia de la marca Newport, haciendo incidir la luz de una lámpara de xenón sobre la superficie de una fotocelda calibrada y conectada a este equipo. **Fig. 3.20** Lámpara de xenón y **Fig. 3.21** Medidor de potencia Newport.



Fig. 3.20 Lámpara de xenón

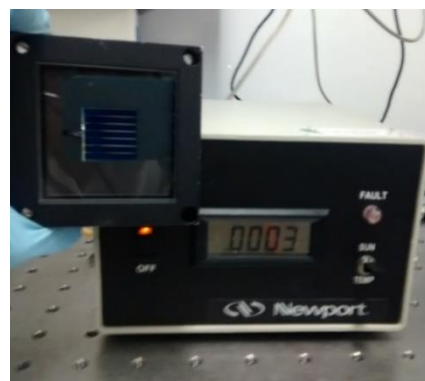


Fig. 3.21 Medidor de potencia Newport.

Para llevar a cabo la medición de las características I-V (relación corriente-voltaje) de las celdas se utilizan fuentes de voltaje y medición Keithley, modelos

2400 (**Figura 3.22**) .Las puntas de este equipo se conectan a las terminales correspondientes de la celda (polarización directa). Los equipos mandan datos de manera serial a una computadora con un software de interface de Labview que grafica el voltaje y la corriente generados por la celda al ser expuesta a la luz de la lámpara de xenón (**Figura 3.23**). Las gráficas generadas son guardadas para examinar el comportamiento de las celdas y calcular sus valores como fill factor (factor de llenado) y eficiencia.



Fig. 3.22 Equipo de medición Keithley 2400.

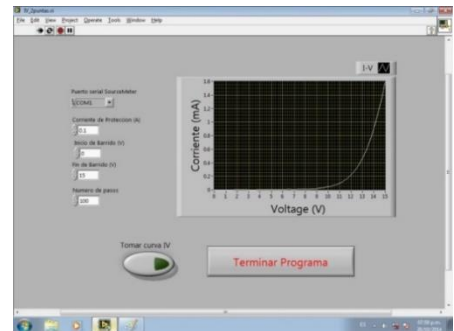


Fig. 3.23 Software de Labview.

CAPÍTULO IV DESARROLLO DE LA INVESTIGACIÓN

4.1 DESARROLLO EXPERIMENTAL

4.1.1 Fabricación de celdas solares orgánicas con arquitectura heterounión en masa configuración directa

Para la construcción de las celdas solares orgánicas con arquitectura heterounión en masa (BHJ) configuración directa se utiliza la estructura que consta de una base de vidrio con recubrimiento de **ITO** (ánodo), seguido por una película de **PEDOT: PSS**, una película de **Capa Activa**, una última película de **PFN** y por último los contactos de **Field's Metal** (cátodo) se ilustra en la **Fig. 3.7**

Primeramente preparamos la disolución de la capa activa pesado con la balanza analítica Discovery (**Fig. 3.12**): (relación de 1:0.8 respectivamente) que contiene:

- **P3HT** (polímero semiconductor donador) = 4mg
- **PC71** (polímero semiconductor aceptor) = 3.2mg
- **Clorobenceno** (disolvente) = 0.5ml.
- **Diodooctano** = 15 μ L

Todo dentro de un vial se deja agitando en una parrilla (**Fig.3.15**) durante 4 horas como mínimo; este debe tornarse rojizo (**Fig. 4.1**)



Fig. 4.1 Disolución P3HT-PC71

Se utiliza el **PEDOT: PSS PVPAI4083** (**Fig. 4.2**) previamente filtrado 3 veces, como capa buffer.

- Algunas de las celdas que se fabricaron usaron **nanopartículas de oro** (10nm nanoComposix PVP NanoXact Gold ECP1029, 0.05mg/mL) contenidas en el **PEDOT** con una proporción de 1 mL de **PEDOT** + 200 μ L de **NP's Au** todo se realiza dentro de la caja de guantes. La solución obtenida se debe agitar vigorosamente para que este se mezcle exitosamente y, tiene que reposar al menos un día conservado en refrigeración y antes de usarse se recomienda darle 15 minutos en lavado ultrasónico.

El PFN (**Fig. 4.3**) consta de:

- 2mg de **PFN**
 - 7ml de **alcohol metílico**
 - 10 μ L de **ácido acético glacial**
- Inicialmente se consideraron celdas con **nanopartículas de oro** de 10nm contenidas en el **PFN** con una proporción de 1 mL de **PFN** + 200 μ L de **NP's Au**; sin embargo al no obtener buenos resultados se descartó este tipo de celdas.

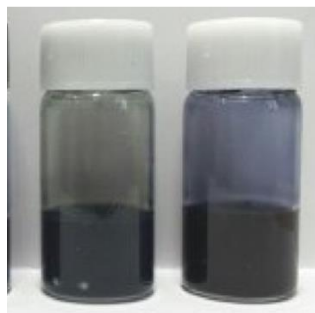


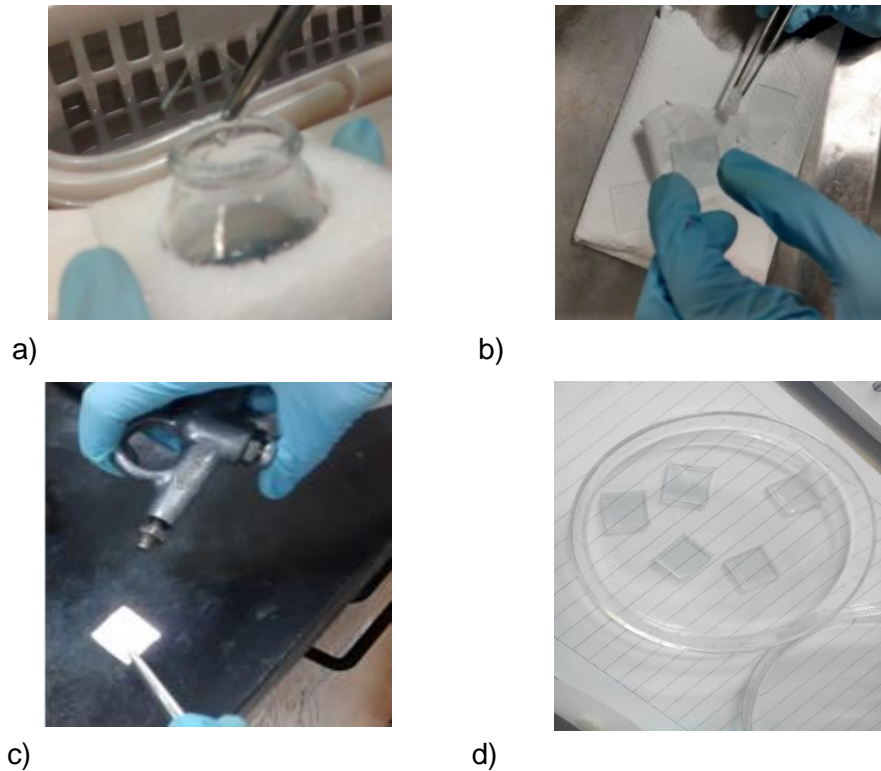
Fig. 4.2 PEDOT: PSS PVPAl4083



Fig. 4.3 PFN

Se usa como base un sustrato de vidrio (3x3 cm) con **ito (Indio-Óxido de Estaño)** que actuara como ánodo, se procede a un lavado ultrasónico (**Fig. 3.17**) con periodos de 15 minutos, primero con agua destilada y jabón se tapa con papel aluminio el vaso de precipitado y se deja durante 15 minutos posteriormente se retira el agua destilada con jabón y se enjuaga cuidadosamente los sustratos, de igual manera se repite el proceso de lavado ultrasónico con agua destilada,

después usando acetona el cual posteriormente de usarse se mantiene en contenedor de residuos, así continuando con **alcohol isopropílico** y finalmente con etanol repitiendo el proceso de verterlos en el contenedor de residuos, tras cada lavado todos los sustratos deben ser tallados con un cotonete y en el último lavado deben ser secados con aire . En la **Figura 4.4** se muestra el proceso de limpiado.



Figs. 4.4 Proceso de limpieza de sustratos. a) Lavado de sustratos, b) Tallado de sustratos, c) Secado de sustratos, d) Sustratos limpios

Y por último se pasan los sustratos en una caja de Petri se prueba la continuidad del **ito (óxido de indio y óxido de estaño)** dejando ese lado mirando hacia arriba después de secarse tras haber sido lavados, se pasa a dejar en una mufla (**Fig. 4.5**) para secarse al menos como mínimo 4 horas, una vez pasado esto se necesita darles un tratamiento de plasma (**Fig. 3.18 - 3.19**), proceso que se lleva durante un estimado de entre 5 a 15 minutos terminado este proceso los sustratos están listos para poder depositar las películas.



a)



b)

Figs. 4.5 Secado. **a)** Secado de sustratos dentro de la mufla, **b)** Mufla usada en el laboratorio

Se procede a depositar las películas para las celdas solares orgánicas con el spinner (**Fig. 3.14**) **PEDOT: PSS** a una velocidad de 4000 rpm durante 40s y 45s; finalmente un tratamiento térmico a una temperatura de 80°C durante 10 minutos con la mufla (**Fig. 4.5**).

- Con el **PEDOT+NP's Au** mencionada anteriormente se deposita a una velocidad de 4000 rpm durante 30s por cada sustrato se usó 80 μ L y finalmente un tratamiento térmico de 80°C durante 10 minutos.

Con la capa activa (**Fig. 4.1**) se necesita realizar dos etapas de velocidades la primera a 500 rpm durante 1 minuto y la segunda a 1400 rpm durante 1:30s y de igual manera se introducen a la mufla a 80°C por 10 minutos. Una observación cuando se aplicaba la capa activa a los sustratos con **PEDOT+NP's Au** se presentaba una figura de estrella el cual hace varias en gran medida los espesores de las películas que se traducen en eficiencias variadas.

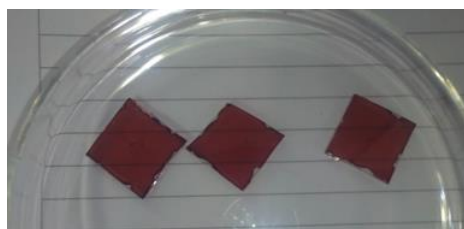
El **PFN** se deposita a 4000 rpm durante 30s posteriormente pasan a un horno a 80°C durante 10 minutos, finalmente se dejan enfriar para poder manipularlas. Proceso ilustrado en la **Fig. 4.6**.

El área activa de la celda es de 0.03cm^2 se delimita y enmascara con cinta mágica para aplicar el **fields metal** (cátodo) fundido a 85°C en las parrillas del laboratorio (**Fig. 3.15**); se descubren los bordes para el contacto del ito, se limpian con etanol para retirar **PFN**, **Capa activa** y **PEDOT** (**Fig. 4.7**). Por cada lote de celdas fabricadas se tienen una celda de control (PEDOT regular) y las celdas de prueba (**PEDOT+NP's Au**).

Se procede a caracterizar las celdas con ayuda de los equipos de laboratorio de espectroscopia (**Fig. 3.20-3.21-3.22-3.23**) y realizando los cálculos convenientes para obtener la densidad de corriente y el voltaje para finalmente calcular el fill factor (ff) de las celdas.

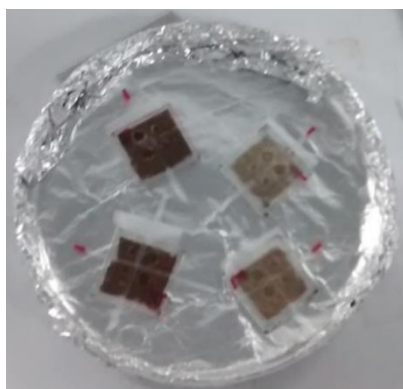


a)

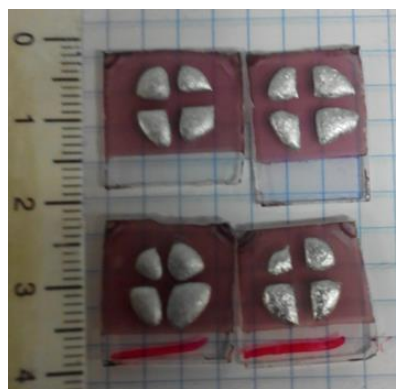


b)

Fig. 4.6 Deposito de películas. **a)** Proceso de depósito, **b)** Resultado final.



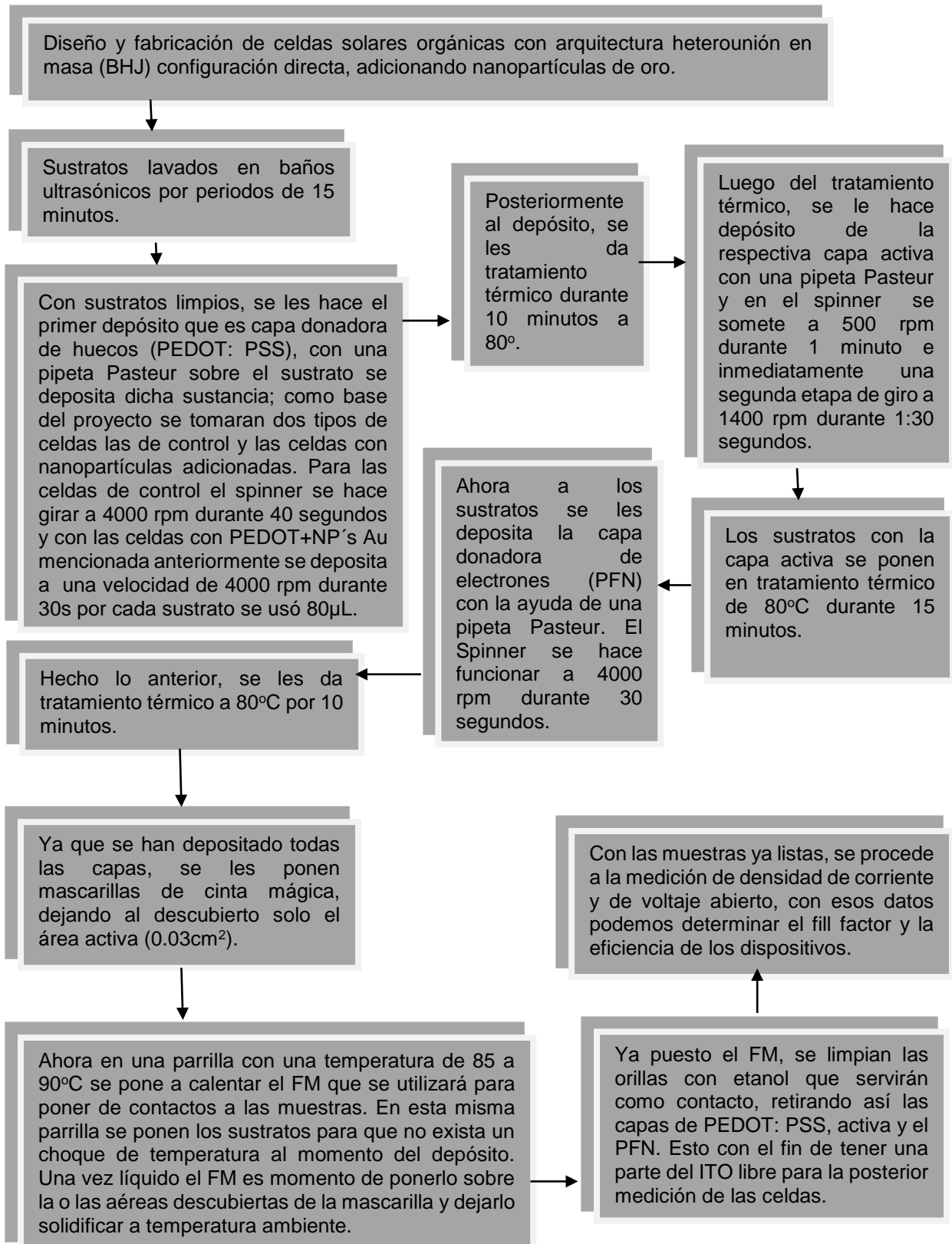
a)



b)

Figs. 4.7 Proceso final. **a)** Proceso de enmascarado, **b)** Celdas con fields metal.

4.1.2 Metodología aplicada



4.1.3 Calcular las eficiencias de las celdas solares orgánicas

Para conocer el comportamiento de las celdas que se fabrican es importante tomar en cuenta algunas variables, como la potencia en que se manejan, **Voc** (**V**), el **Jsc** ($\frac{mA}{cm^2}$), el **(Vp . Jp)máx**, el **FF** (Fill Factor) y la **n** % (eficiencia). Todos estos valores y cálculos se deben organizar en una tabla.

Después de hacer la caracterización para encontrar la curva **JV**, con los datos obtenidos, se puede calcular lo anterior. Los parámetros que se usan para la medición se realizan mediante una fuente de voltaje, junto con una interface en un entorno programado de Labview y una PC de escritorio, son los siguientes:

- Barrera de protección: 0.001.
- Inicio de barrido: -0.01.
- Fin de barrido: 1.
- Numero de pasos: 100 (Secuencia de valores que obtendremos).

Una vez definido los parámetros de medición y realizado la misma automáticamente contamos con los datos de Voltaje (**V**) y Corriente (**mA**) en base a estos se procede a calcular la Densidad de corriente ($\frac{mA}{cm^2}$) que poseen los dispositivos: **Corriente (mA) / Área activa (0.03 cm², 0.07 cm², 0.28 cm²)**

Entre los 100 valores obtenidos de la Densidad de corriente ($\frac{mA}{cm^2}$) nos interesa el más cercano al +1 del cual tomaremos el valor que este a línea con la del Voltaje (**V**) el cual será directamente proporcional a **Voc** (**V**) (Ejemplo en la **Tabla 4.1**).

Tabla 4.1 Valor cercano a +1

VOLTAJE V	CORRIENTE mA	DENSIDAD DE CORRIENTE mA/cm ²
0.63	-0.31	-10.37
0.64	-0.28	-9.38
0.65	-0.25	-8.42
0.66	-0.22	-7.37
0.68	-0.19	-6.24
0.69	-0.15	-5.08
0.70	-0.12	-3.93
0.71	-0.08	-2.68
0.73	-0.04	-1.41
0.74	0.00	-0.11
0.75	0.07	2.18
0.76	0.14	4.74
0.78	0.22	7.47
0.79	0.31	10.34
0.80	0.40	13.39
0.81	0.50	16.56

De manera similar, dentro de los 100 valores obtenidos del Voltaje (**V**) nos interesa el 0 del cual tomaremos el valor que este en línea con el de la Densidad de corriente ($\frac{mA}{cm^2}$) el cual será directamente proporcional a **Jsc** ($\frac{mA}{cm^2}$) (Ejemplo en la **Tabla 4.2**).

Tabla 4.2 Valor 0

VOLTAJE V	CORRIENTE mA	DENSIDAD DE CORRIENTE mA/cm ²
-0.14	-0.75	-25.13
-0.13	-0.75	-25.10
-0.11	-0.75	-25.10
-0.10	-0.75	-25.06
-0.09	-0.75	-24.98
-0.08	-0.75	-24.86
-0.06	-0.74	-24.80
-0.05	-0.75	-24.87
-0.04	-0.74	-24.75
-0.03	-0.74	-24.62
-0.01	-0.74	-24.56
0.00	-0.74	-24.62
0.01	-0.74	-24.50
0.03	-0.73	-24.38
0.04	-0.73	-24.21
0.05	-0.72	-24.17
0.06	-0.72	-24.01

Teniendo Voltaje (**V**), Corriente (**mA**) y Densidad de corriente ($\frac{mA}{cm^2}$) calculamos la Potencia ($(mA \times V) / cm^2$) mediante:

$$\text{Densidad de corriente } \left(\frac{mA}{cm^2}\right) \times \text{Voltaje (V)}$$

Dentro los 100 valores que se obtienen de la Potencia $((mA \times V) / cm^2)$ se busca el mínimo de todos estos el cual es directamente proporcional a $(V_{PJ})_{Max}$.

Por último calcular el **FF** (Fill Factor) y la **n%** (eficiencia), para ello se empleando dos fórmulas:

$$FF = \frac{(V_p \cdot J_p)_{m\acute{a}x}}{V_{oc} \cdot J_{sc}} \quad \text{Ejemplo. } FF = -8.63 / (0.75 \times -24.62) = 0.47$$

Y

$$n = \left(\frac{V_{oc} \cdot J_{sc} \cdot FF}{I_{inc}} \right) \cdot 100, \quad I_{inc} = 100 \frac{mV}{cm^2}$$

$$\rightarrow n = \left(\frac{V_{oc} \cdot J_{sc} \cdot FF}{I_{inc}} \right) \cdot 100 \quad \therefore \quad n = | V_{oc} \cdot J_{sc} \cdot FF |$$

$$\text{Ejemplo. } n = | 0.75 \times (-24.62) \times 0.47 | = 8.63$$

Finalmente obtenemos una tabla de resultados con las variables que se contemplan para las celdas fabricadas **Tabla 4.3**.

Tabla 4.3 Resultados de ejemplo.

Voc (V)	Jsc ($\frac{mA}{cm^2}$)	$(V_p \cdot J_p)_{m\acute{a}x}$	FF	n (%)
0.75	-24.62	-8.63	0.47	8.63

4.2 IMPLEMENTACIÓN

Como se mencionó inicialmente, el propósito de este trabajo es fabricar celdas fotovoltaicas con material orgánico adicionando nanopartículas, hasta el momento los resultados obtenidos son pruebas para seguir trabajando y estudiando el efecto que tiene las nanopartículas de oro al interactuar con estos dispositivos, de igual manera observar la funcionalidad y estabilidad, así como buscar obtener los mejores parámetros óptimos, por lo que su implementación como tal aún no se puede llevar a cabo.

Una vez que se encuentre los espesores, concentraciones y formas de aplicar dichas capas que componen este dispositivo y se defina una estabilidad se podrá aplicar a línea de investigación distinta.

CAPÍTULO V RESULTADOS

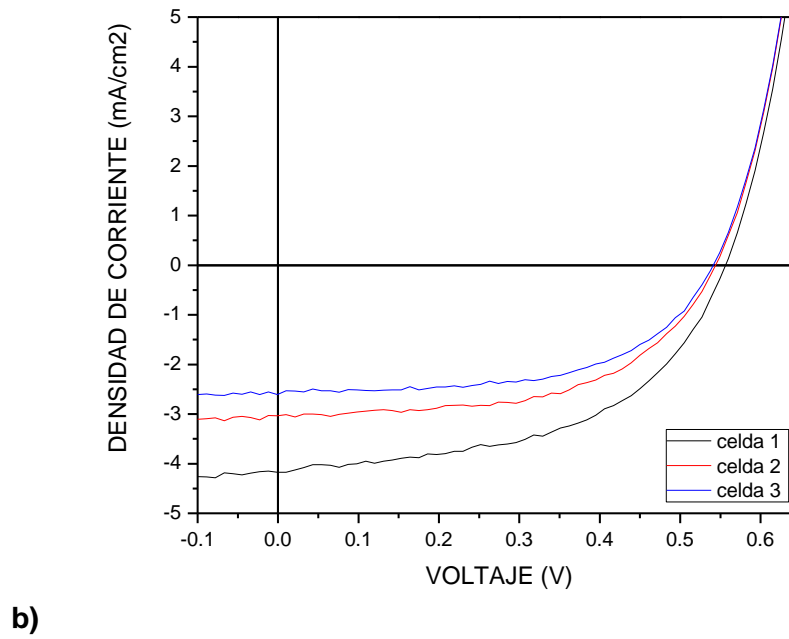
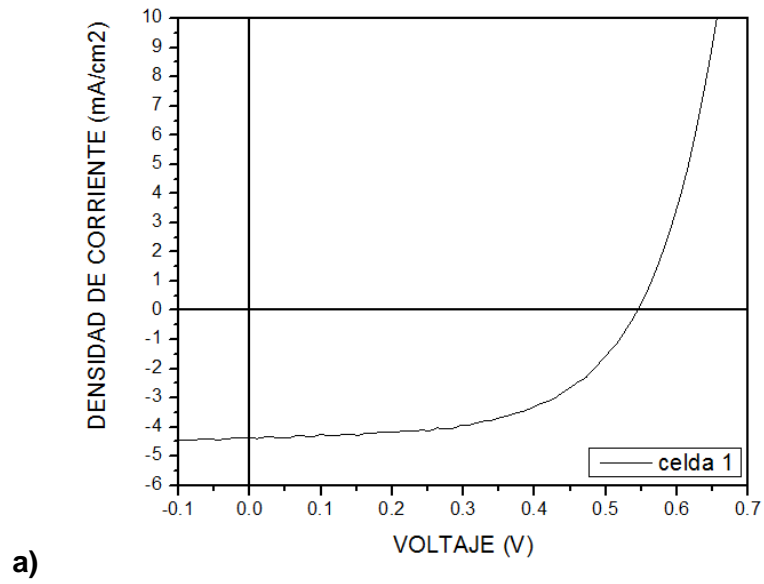
5.1 GRÁFICAS OBTENIDAS

5.1.1 Curvas I-V de celdas solares orgánicas con arquitectura heterounión en masa configuración directa con P3HT-C71

En las gráficas de la **Figs. 5.1** y la **Tabla 5.1** se muestran las curvas I-V (relación corriente-voltaje) y resultados calculados obtenidos del primer lote de celdas con **P3HT-C71**, con una estructura que consta de una base de vidrio con recubrimiento de **ITO** (ánodo), seguido por una película de **PEDOT: PSS**, una película de **Capa Activa (P3HT-C71)**, una última película de **PFN** y por último los contactos de **Field's Metal** (cátodo) se ilustra en la **Fig. 3.7** y los procedimientos de fabricación anteriormente mencionados sin embargo, en cada paso del procedimiento pueden existir diferentes variables que afecten la calidad de las películas y por ende el funcionamiento de la celda. Cualquier defecto o mala limpieza en el sustrato, inhomogeneidad o suciedad al momento de aplicar en la película o mal contacto del electrodo metálico afectan principalmente la corriente que entrega la celda y en ciertos casos al voltaje.

Todas las gráficas representadas se obtuvieron mediante el procedimiento de caracterización de celdas solares descrito en la sección 4.1.3, utilizando los instrumentos con los que cuenta el laboratorio en el GPOM. Para visualizar las gráficas se utiliza el software Origin Pro 8.

En la **Fig. 5.4** se muestra el espectro absorción de la disolución de la capa activa **P3HT-C71**, así como también de ambos materiales por separado.



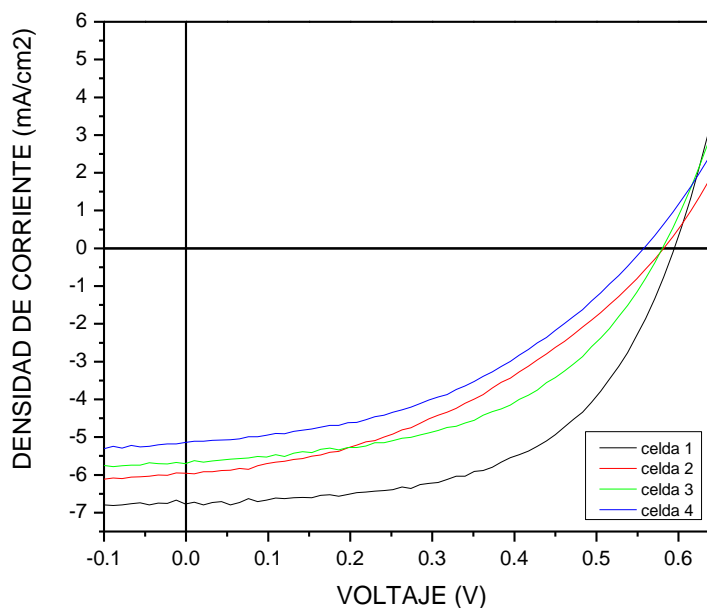
Figs. 5.1 Curvas I-V (relación corriente-voltaje) de las celdas fabricadas del primer lote. **a)** Sustrato 1, **b)** Sustrato 2

Tabla 5.1 Resultados obtenidos del primer lote de celdas visualizando V_{oc} (V), el J_{sc} (mA / cm^2), el $(V_p \cdot J_p)_{\text{MÁX}}$, el FF (Fill Factor) y la η (eficiencia).

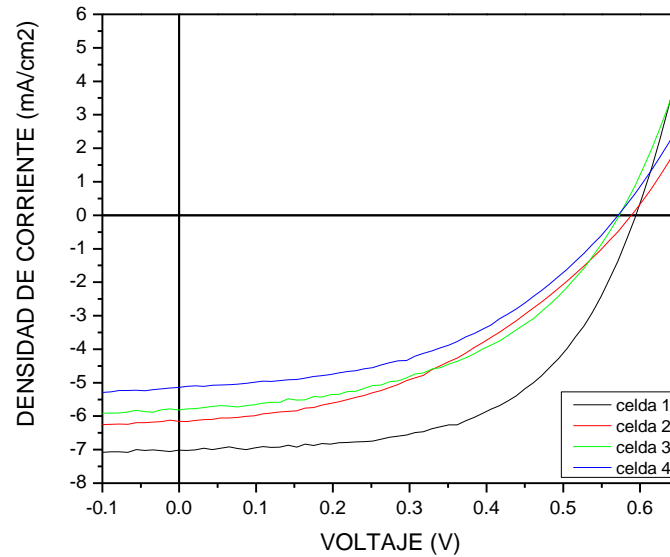
Sustrato 1						
	área	V_{oc} (V)	J_{sc} ($\frac{\text{mA}}{\text{cm}^2}$)	$(V_p \cdot J_p)_{\text{MÁX}}$	FF	η (%)
Celda 1	0.03 cm^2	0.55	-4.35	-1.33	0.56	1.33
Sustrato 2						
	área	V_{oc} (V)	J_{sc} ($\frac{\text{mA}}{\text{cm}^2}$)	$(V_p \cdot J_p)_{\text{MÁX}}$	FF	η (%)
Celda 1	0.03 cm^2	0.56	-4.17	-1.20	0.51	1.20
Celda 2	0.03 cm^2	0.55	-3.04	-0.91	0.55	0.91
Celda 3	0.03 cm^2	0.55	-2.61	-0.79	0.55	0.79

Durante el desarrollo del trabajo se siguieron fabricando más celdas de **P3HT-C71** para tomarlas de base de comparación, a continuación de muestran los resultados de un segundo (Figs. 5.2 y Tabla 5.2) y tercer lote (Figs. 5.3 y Tabla 5.3).

Segundo Lote de Celdas solares orgánicas.



a)



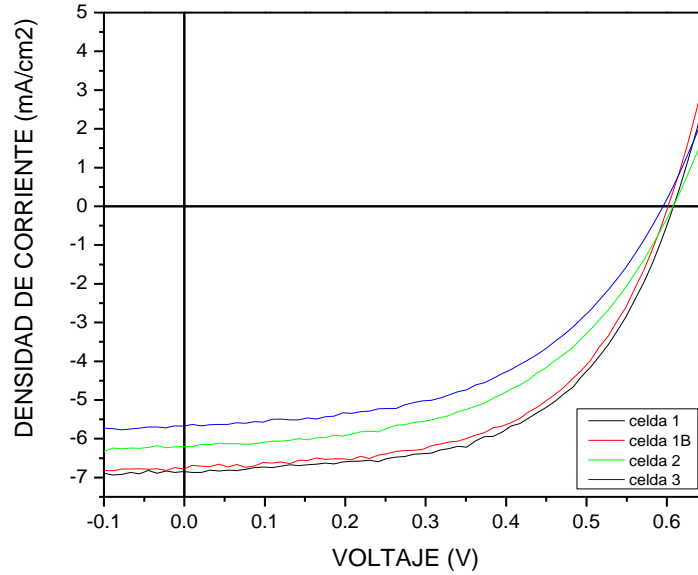
b)

Figs. 5.2 Curvas I-V (relación corriente-voltaje) de las celdas fabricadas del segundo lote. **a)** Sustrato 1, **b)** Sustrato 2

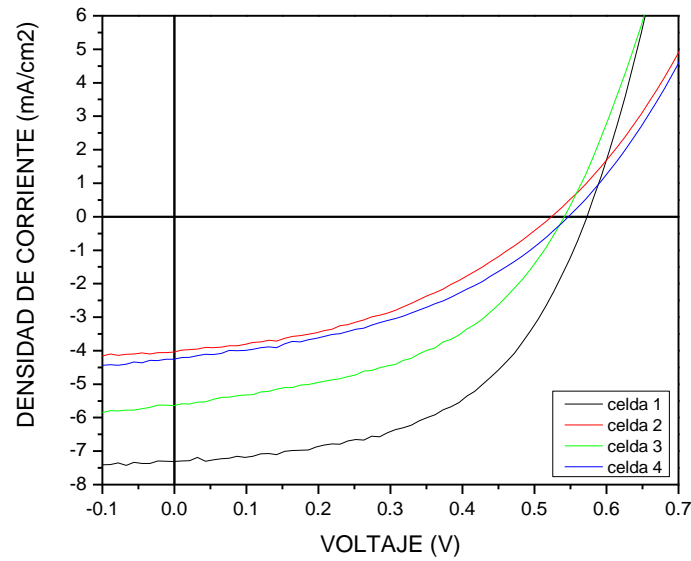
Tabla 5.2 Resultados del segundo lote de celdas visualizando V_{oc} (V), el J_{sc} (mA / cm^2), el $(V_{p} \cdot J_{p})_{max}$, el FF (Fill Factor) y la η % (eficiencia).

Sustrato 1						
	área	V_{oc} (V)	J_{sc} ($\frac{mA}{cm^2}$)	$(V_p \cdot J_p)_{máx}$	FF	η (%)
Celda 1	0.03 cm^2	0.60	-6.77	-2.24	0.55	2.24
Celda 2	0.03 cm^2	0.59	-5.95	-1.40	0.40	1.40
Celda 3	0.03 cm^2	0.58	-5.70	-1.64	0.49	1.64
Celda 4	0.03 cm^2	0.56	-5.14	-1.24	0.43	1.24
Sustrato 2						
	área	V_{oc} (V)	J_{sc} ($\frac{mA}{cm^2}$)	$(V_p \cdot J_p)_{máx}$	FF	η (%)
Celda 1	0.03 cm^2	0.60	-7.01	-2.37	0.56	2.37
Celda 2	0.03 cm^2	0.59	-6.15	-1.54	0.42	1.54
Celda 3	0.03 cm^2	0.58	-5.82	-1.59	0.47	1.59
Celda 4	0.03 cm^2	0.58	-5.14	-1.36	0.46	1.36

Tercer Lote de Celdas solares orgánicas.



a)



b)

Figs. 5.3 Curvas I-V (relación corriente-voltaje) de las celdas fabricadas del segundo lote. **a)** Sustrato 1, **b)** Sustrato 2

Tabla 5.3 Resultados del tercer lote de celdas visualizando V_{oc} (V), el J_{sc} (mA / cm^2), el $(V_{pJp})_{\text{MAX}}$, el FF (Fill Factor) y la $\eta\%$ (eficiencia).

Sustrato 1						
	área	V_{oc} (V)	J_{sc} ($\frac{\text{mA}}{\text{cm}^2}$)	$(V_p \cdot J_p)_{\text{máx}}$	FF	η (%)
Celda 1	0.03 cm^2	0.62	-6.85	-2.34	0.56	2.34
Celda 2	0.03 cm^2	0.60	-6.78	-2.28	0.56	2.28
Celda 3	0.03 cm^2	0.62	-6.20	-1.92	0.50	1.92
Celda 4	0.03 cm^2	0.60	-5.67	-1.71	0.50	1.71
Sustrato 2						
	área	V_{oc} (V)	J_{sc} ($\frac{\text{mA}}{\text{cm}^2}$)	$(V_p \cdot J_p)_{\text{máx}}$	FF	η (%)
Celda 1	0.03 cm^2	0.58	-7.31	-2.19	0.52	2.19
Celda 2	0.03 cm^2	0.53	-4.04	-0.86	0.40	0.86
Celda 3	0.03 cm^2	0.55	-5.65	-1.42	0.46	1.42
Celda 4	0.03 cm^2	0.55	-4.26	-0.95	0.40	0.95

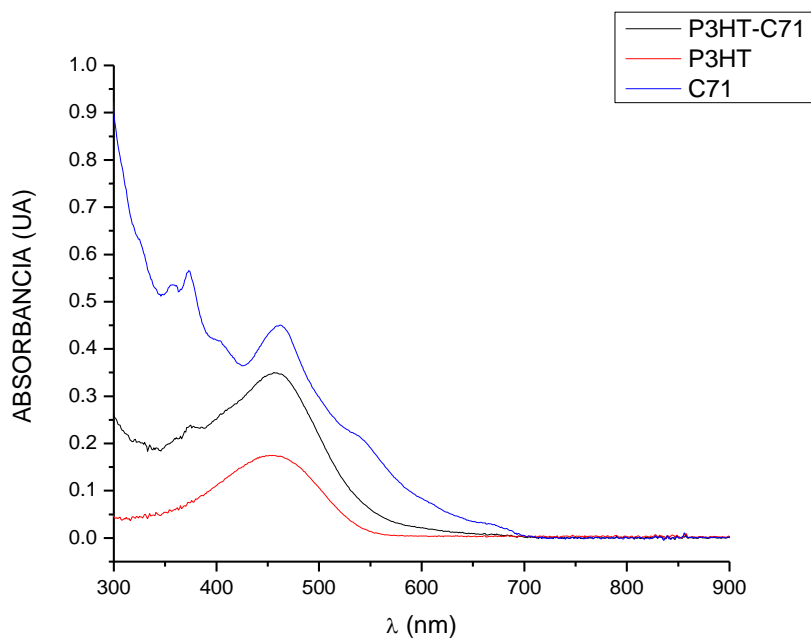


Fig. 5.4 Espectro de absorción obtenido de la disolución P3HT-C71, P3HT y C71

5.1.2 Curvas I-V obtenidas de celdas solares orgánicas con arquitectura heterounión en masa configuración directa con P3HT-C71 adicionando nanopartículas de oro de 10 nm

En las gráficas de las **Fig. 5.5** se muestra la curva I-V (relación corriente-voltaje) de una celda de control (**P3HT-C71**) y la **Fig. 5.6** se muestra la curva I-V (relación corriente-voltaje) de una celda con nanopartículas y las **Tablas 5.4** los resultados calculados obtenidas respectivamente de nuevos lotes de celdas ahora fabricadas con nanopartículas de igual manera que las anteriores con una estructura que consta de una base de vidrio con recubrimiento de **ITO** (ánodo), seguido por una película de **PEDOT: PSS**, una película de **Capa Activa (P3HT-C71)**, una última película de **PFN** y por último los contactos de **Field's Metal** (cátodo) se ilustra en la **Fig. 3.7** y los procedimientos de fabricación anteriormente mencionados; de igual manera con las posibles variables durante su fabricación que afectaran proporcionalmente a su corriente que entrega la celda y en ciertos casos al voltaje.

Todas las gráficas representadas se obtuvieron mediante el procedimiento de caracterización de celdas solares descrito en la sección 4.1.3, utilizando los instrumentos con los que cuenta el laboratorio en el GPOM.

En la **Fig. 5.11** se muestra el espectro absorción de la celda terminada de **P3HT-C71** y de una celda terminada de **P3HT-C71** con nanopartículas.

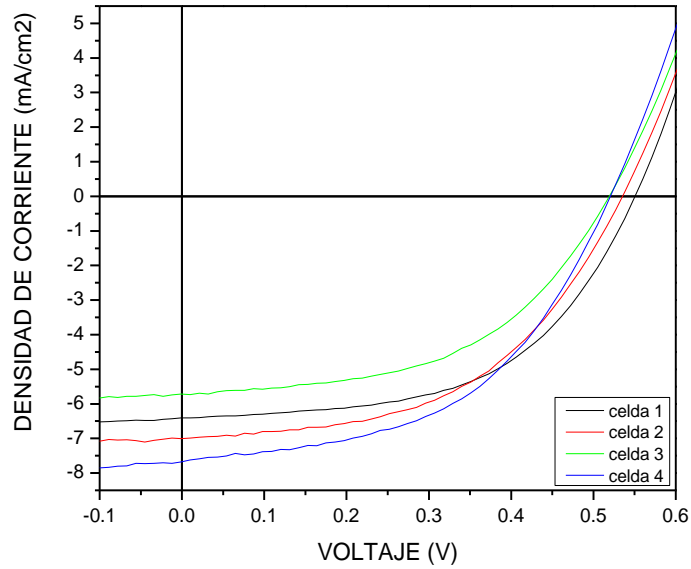


Fig. 5.5 Curvas I-V (relación corriente-voltaje) de las celdas de control primer lote, sustrato 1

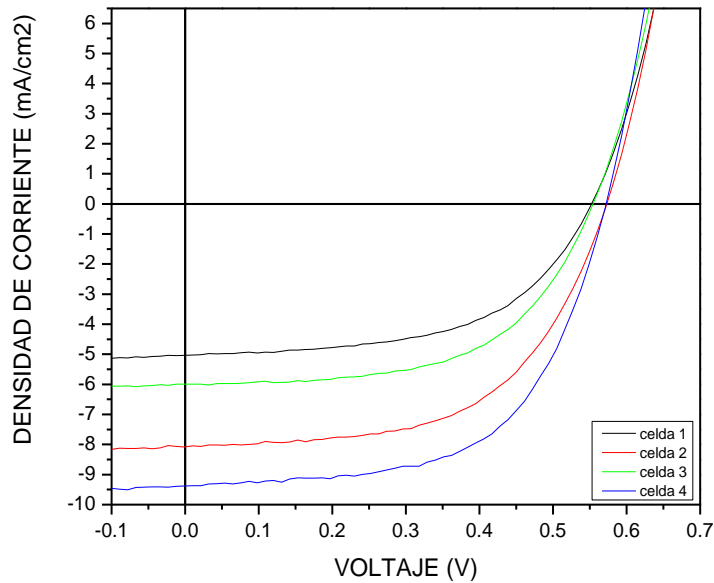


Fig. 5.6 Curvas I-V (relación corriente-voltaje) de las celdas con nanopartículas primer lote, sustrato 2

Tabla 5.4 Primer lote de celdas de control y celdas con nanopartículas, visualizando V_{oc} (V), el J_{sc} (mA / cm²), el $(V_{p} \cdot J_{p})_{máx}$, el FF (Fill Factor) y la η (eficiencia).

Sustrato 1 (De control)						
	área	V_{oc} (V)	J_{sc} ($\frac{mA}{cm^2}$)	$(V_p \cdot J_p)_{máx}$	FF	η (%)
Celda 1	0.03 cm ²	0.56	-6.41	-1.92	0.53	1.92
Celda 2	0.03 cm ²	0.54	-7.01	-1.89	0.50	1.89
Celda 3	0.03 cm ²	0.53	-5.72	-1.51	0.50	1.51
Celda 4	0.03 cm ²	0.53	-7.68	-2.00	0.49	2.00
Sustrato 2 (Con nanopartículas)						
	área	V_{oc} (V)	J_{sc} ($\frac{mA}{cm^2}$)	$(V_p \cdot J_p)_{máx}$	FF	η (%)
Celda 1	0.03 cm ²	0.56	-5.04	-1.54	0.55	-1.54
Celda 2	0.03 cm ²	0.58	-8.08	-2.62	0.56	-2.62
Celda 3	0.03 cm ²	0.56	-5.99	-1.91	0.57	-1.91
Celda 4	0.03 cm ²	0.58	-9.38	-3.19	0.58	-3.19

Da la manera que se llevó la fabricación del primer lote con el cual se contaba con una celda de control, y una celda de experimentación (con nanopartículas) se procedió a reproducir las condiciones de fabricación, en las siguientes gráficas (Fig. 5.7 - 5.8 - 5.9 - 5.10) y tablas (Tabla 5.5 – 5.6) de ilustra los mejores resultados obtenidos.

Segundo Lote de Celdas solares orgánicas.

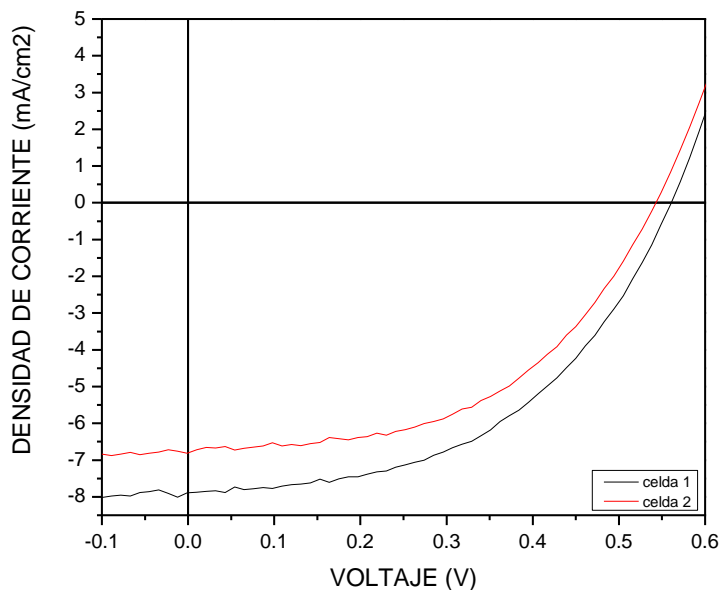


Fig. 5.7 Curvas I-V (relación corriente-voltaje) de las celdas de control segundo lote, sustrato 1

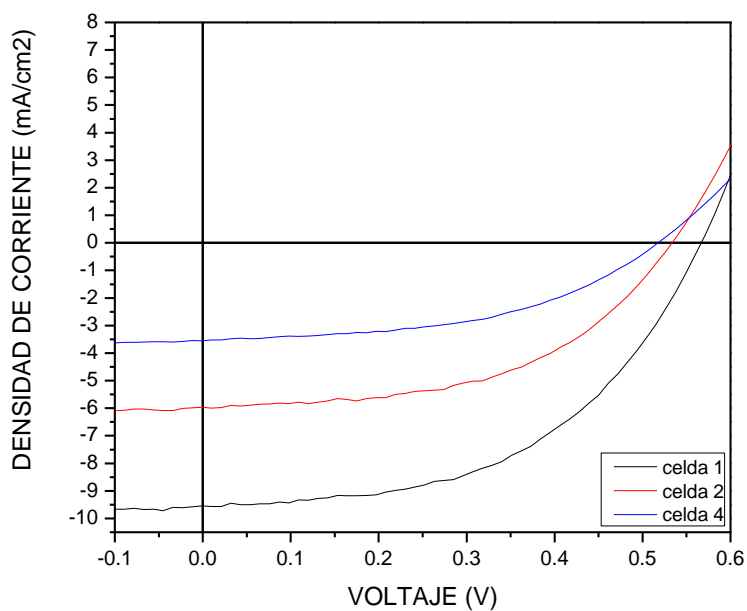


Fig. 5.8 Curvas I-V (relación corriente-voltaje) de las celdas con nanopartículas segundo lote, sustrato 2

Tabla 5.5 Segundo lote de celdas de control y celdas con nanopartículas, visualizando V_{oc} (V), el J_{sc} (mA / cm^2), el $(V_p \cdot J_p)_{\text{máx}}$, el FF (Fill Factor) y la η (%) (eficiencia).

Sustrato 1 (De control)						
	área	V_{oc} (V)	J_{sc} ($\frac{\text{mA}}{\text{cm}^2}$)	$(V_p \cdot J_p)_{\text{máx}}$	FF	η (%)
Celda 1	0.03 cm^2	0.57	-7.89	-2.17	0.48	2.17
Celda 2	0.03 cm^2	0.55	-6.81	-1.86	0.50	1.86
Sustrato 2 (Con nanopartículas)						
	área	V_{oc} (V)	J_{sc} ($\frac{\text{mA}}{\text{cm}^2}$)	$(V_p \cdot J_p)_{\text{máx}}$	FF	η (%)
Celda 1	0.03 cm^2	0.57	-9.54	-2.75	0.51	-2.75
Celda 2	0.03 cm^2	0.54	-5.97	-1.63	0.51	-1.63
Celda 3	0.03 cm^2	0.53	-3.55	-0.89	0.47	-0.89

Tercer Lote de Celdas solares orgánicas.

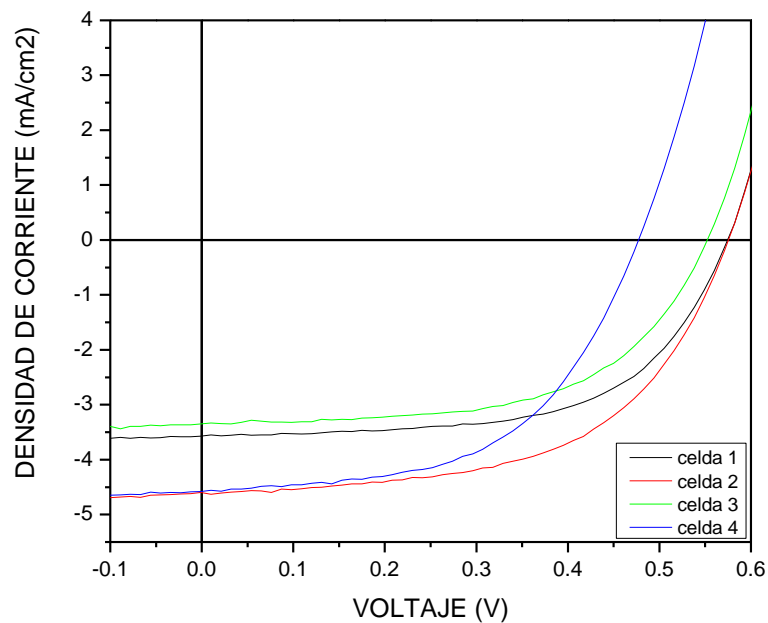


Fig. 5.9 Curvas I-V (relación corriente-voltaje) de las celdas de control tercer lote, sustrato 1

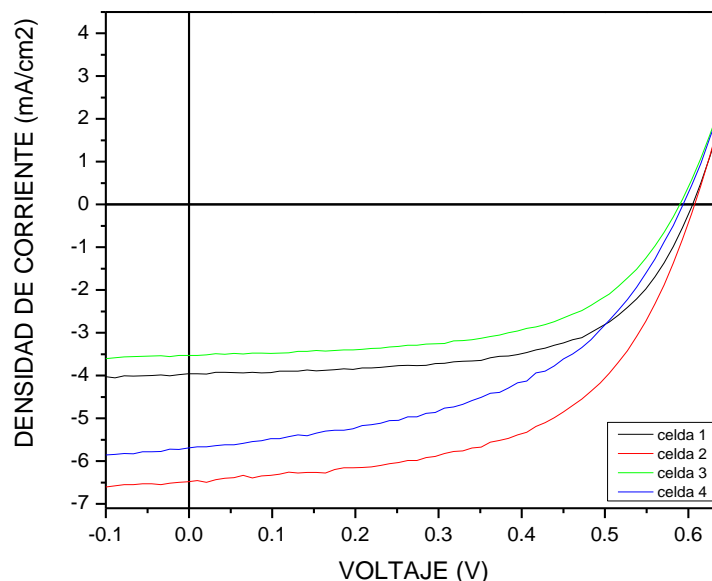


Fig. 5.10 Curvas I-V (relación corriente-voltaje) de las celdas con nanopartículas tercer lote, sustrato 2

Tabla 5.5 Tercer lote de celdas de control y celdas con nanopartículas, visualizando V_{OC} (V), el J_{SC} (mA / cm²), el $(V_{p} \cdot J_{p})_{MAX}$, el FF (Fill Factor) y la n% (eficiencia).

Sustrato 1 (De control)						
	área	V_{oc} (V)	J_{sc} ($\frac{mA}{cm^2}$)	$(V_p \cdot J_p)_{máx}$	FF	n (%)
Celda 1	0.03 cm ²	0.59	-3.57	-1.23	0.58	1.23
Celda 2	0.03 cm ²	0.58	-4.60	-1.49	0.56	1.49
Celda 3	0.03 cm ²	0.56	-3.35	-1.07	0.57	1.07
Celda 4	0.03 cm ²	0.48	-4.58	-1.18	0.53	1.18
Sustrato 2 (Con nanopartículas)						
	área	V_{oc} (V)	J_{sc} ($\frac{mA}{cm^2}$)	$(V_p \cdot J_p)_{máx}$	FF	n (%)
Celda 1	0.03 cm ²	0.62	-3.96	-1.47	0.60	-1.47
Celda 2	0.03 cm ²	0.62	-6.48	-2.19	0.55	-2.19
Celda 3	0.03 cm ²	0.59	-3.53	-1.20	0.57	-1.20
Celda 4	0.03 cm ²	0.60	-5.69	-1.68	0.49	-1.68

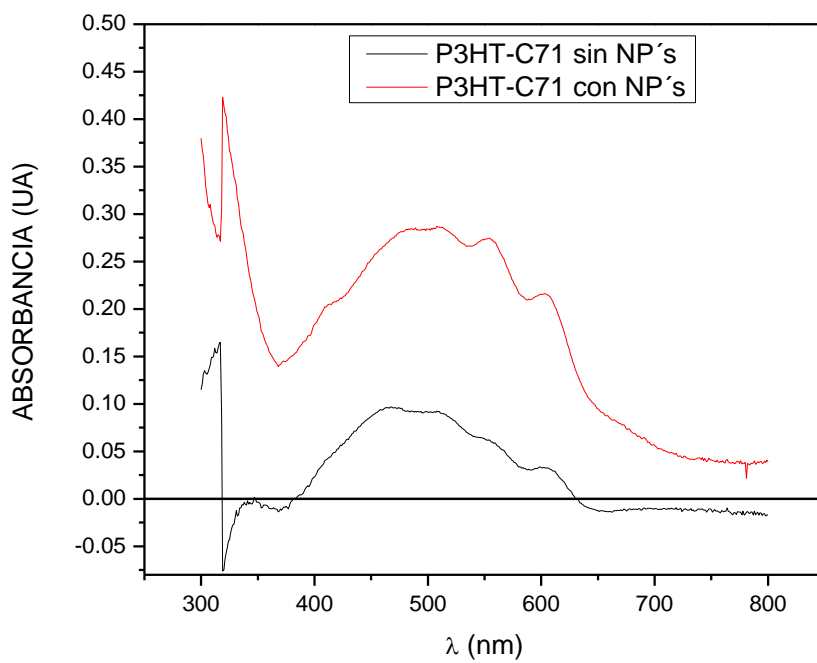


Fig. 5.11 Espectro de absorción obtenido de celdas P3HT-C71 (control), P3HT-C71 con nanopartículas

CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES

En desarrollo de este proyecto se pudo comprobar que los polímeros, disoluciones y compuestos con los que se cuentan en el laboratorio del GPOM permiten realizar una estructura de celda que trabaje adecuadamente como se llegó a comprobar con los primeros resultados de las celdas fabricadas, así como resultados positivos a la adición de nanopartículas de oro a las celdas solares, mostrando buen funcionamiento y estabilidad comparables a las celdas solares orgánicas de las cuales ya se tiene registro en el GPOM. Con ello se obtuvieron también las siguientes conclusiones:

- La fabricación de celdas solares orgánicas con arquitectura heterounión en masa configuración directa se llevó a obtener resultados reproducibles y estables.
- La primera prueba con nanopartículas se efectuó con la interacción en el **PFN** el cual no obtuvo mejoras, se descartó por el momento, más adelante se pueden realizar estudios de sus efectos pero usando nanopartículas de plata.
- La segunda prueba se realizó con las nanopartículas fue en el **PEDOT: PSS** donde en efecto se observaron mejoras en comparación de la celda de control. Se debe tener especial cuidado ya que muchas de las películas que contenían el **PEDOT + NP's Au** mostraron una figura en estrella mencionado anteriormente lo cual provocaba mala homogeneidad en la película es decir en ciertas regiones mostraba mayor cantidad de capa activa y al contrario en otras regiones se observó muy poca.
- Los resultados finales demostraron en efecto la mejora de la eficiencia de conversión solar en las celdas las cuales tenían nanopartículas, cumpliendo con el objetivo del proyecto, sin embargo se pretende que la línea de investigación continúe por parte del GPOM.

COMPETENCIAS DESARROLLADAS Y/O APLICADAS

- Aprendizaje y experiencia en el uso de materiales y equipos especializados de laboratorio realizar disoluciones con polímeros semiconductores y su aplicación.
- Diseño, construcción, conocimiento y aprendizaje sobre métodos de fabricación de dispositivos electrónicos orgánicos (Celdas Solares).
- Conocimiento, aprendizaje y visualización en el uso de equipos de medición a través de interfaces hechos en programación como LabView®.
- Desarrollo de destrezas en el manejo de materiales y equipo de laboratorio (máquina de baño sónico, spiner, uso de compuestos, trabajo en caja de guantes y uso del Microscopio de Fuerza Atómica).
- Caracterización, calibración y mediciones con dispositivos electrónicos orgánicos.
- Conocimiento y aplicación de Electrónica orgánica.
- Experiencia y aprendizaje sobre trabajo en equipo multidisciplinario.
- Adquisición de conocimientos en química y propiedades de los materiales.

ANEXO I. CONCEPTOS BASICOS

Efecto fotovoltaico.- La palabra fotovoltaico se refiere electricidad producida por luz. Los fotones partículas energéticas que conforman la luz. Cuando estos fotones son lo suficientemente energéticos y se pone en contacto con ciertos materiales (llamados fotosensibles), la energía que contienen provoca que los electrones se desprendan de la banda de valencia los átomos y pasen a la de conducción, dejando un hueco. Hecho esto se crea un flujo de corriente.

Electrón.- Partícula subatómica con carga negativa (-) representado por lo general en la forma e^- . Ya que hasta ahora no se le conocen componentes o subestructuras, el electrón es considerado una partícula elemental. Su spin intrínseco es un valor semientero, lo que indica que es un fermión. Cuando colisiona con su antipartícula (Positrón) libera fotones del área del espectro gamma.

Hueco.- Al moverse o saltar de nivel un electrón deja en su lugar un hueco. Podría denominarse como la ausencia del electrón. Es portador de carga positiva y al estar presente, puede ser ocupado por el mismo u otro electrón, así facilitando el flujo de corriente.

Excitón.- Es una cuasipartícula conformada por el par de un electrón-hueco.

Nivel HOMO (Highest Occupied Molecular Orbital).- Este es el último nivel energético ocupado con los electrones. El HOMO es a los semiconductores orgánicos y a los puntos cuánticos lo que la banda de valencia es para los semiconductores inorgánicos.

Nivel LUMO (Lowest Unoccupied Molecular Orbital).- Corresponde al primer nivel energético vacío de electrones. El LUMO es a los semiconductores orgánicos lo que la banda de conducción a los semiconductores inorgánicos.

PEDOT: PSS *poly(3,4-ethylenedioxythiophene) polystyrene sulfonate.*- Es un polímero conjugado con cargas positivas. Se deposita sobre el sustrato con **ITO** para la fabricación de celdas solares orgánicas, actuando la capa donadora de huecos (cargas positivas). **Fig A1**

Fullereno.- Es la tercera forma más estable del carbono después del grafito y el diamante. Su aplicación en la fabricación de celdas orgánicas se debe a que son

los aceptores de electrones en el proceso de la generación de corriente eléctrica. El hallazgo de estas moléculas, ocurrió al irradiar un disco de grafito con un láser y mezclar el vapor de carbono resultante mediante una corriente de helio. Al analizar el residuo obtenido, se observaron moléculas formadas por 60 átomos de carbono teniendo una forma similar a la de una cúpula. Este descubrimiento se llevó a cabo en el año de 1985. En este trabajo se manejan 2 tipos de Fullerenos que son el ***PC₆₁BM*** (Fig. A2), el ***PC₇₁BM*** (Fig.A3)

Polímero.- Son macromoléculas compuestas por uno o varios monómeros que se repiten a lo largo de una cadena. Se clasifican en homopolimeros y copolimeros. Los primeros son los que están formados por un mismo monómero a lo largo de toda la cadena. Por otro lado los copolimeros son aquellos que al menos tienen 2 monómeros diferentes a lo largo de la cadena.

Radiación solar.- Es la radiación que emitida por el sol y se propaga en todas direcciones a través del espacio mediante ondas electromagnéticas.

Onda electromagnética.- Es un tipo de onda que a diferencia de la mecánica no necesita un medio material para propagarse. Entre ellas está la luz visible, los rayos x, las señales de radio televisión y telefonía.

Espectro electromagnético.- Es la clasificación de la radiación de acuerdo a su longitud de onda.

Nanómetro.- Es una unidad de medida que equivale a una millonésima parte de un metro (nm). Se usa para medir longitudes de onda o materiales del orden nanométrico.

Sustrato.- Se le llama así a la placa en el cual se depositan capas de otras sustancias que se adhieren entre sí. Sirven como base para dispositivos electrónicos tales como transistores, diodos y, en especial, los circuitos integrados.

ITO.- Es una película transparente conductora con sus propiedades únicas de alta conductividad eléctrica ($\sim 10^4$ S/cm) y alta transmitancia óptica ($\sim 90\%$) en el rango de longitud de onda visible. Está conformada por óxido de indio y estaño y su aplicación en celdas solares es actuar como cátodo.

Field's metal.- Es una aleación fusible que se vuelve líquido a los 62 °C. Es una aleación de **bismuto** 32.5%, **indio** 51% y **estaño** 16.5. Durante este trabajo usaremos la abreviación FM para referirnos a esta sustancia. Funciona como el cátodo de los dispositivos en este trabajo.

PFN.- Es la capa donadora de electrones y la última capa en depositarse. En esta es donde llegan los fotones que con su respectiva energía comienzan a mover electrones, generando así un flujo de corriente. **Fig. A4**

P3HT.- Poly(3-hexylthiophene-2,5-diyl). Es un polímero donador de electrones que se utiliza en combinación con algún fullereno en la capa activa de las celdas solares orgánicas. **Fig. A5**

Nanopartículas de oro nanoComposix.- No aglomeradas y monodispersas, la media de diámetro 10 nm \pm 3 nm, PVP NanoXact Gold ECP1029, 0.05mg/mL, Partículas de citrato NanoXact están en una solución de citrato de sodio 2 mM; otros están en el agua. **Fig. A6**

Fill factor (FF).- Es el cociente de potencial real ($V_{pmax} \times I_{pmax}$) de las celdas solares frente a la salida de potencia en corto circuito ($V_{oc} \times I_{sc}$). Con este parámetro se puede determinar la eficiencia de los dispositivos.

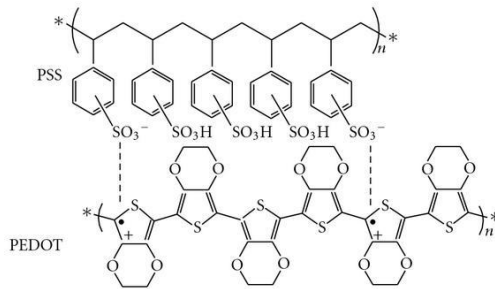


Fig. A1 PEDOT: PSS

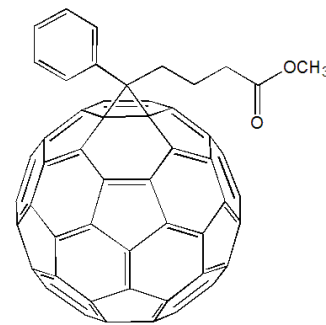


Fig. A2 PC₆₁BM

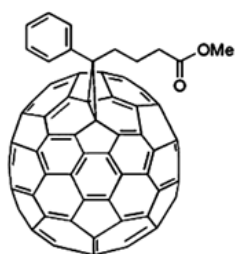


Fig. A3 PC₇₁BM

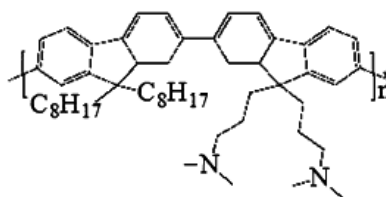


Fig. A4 PFN

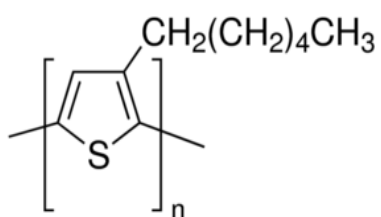


Fig. A5 P3HT

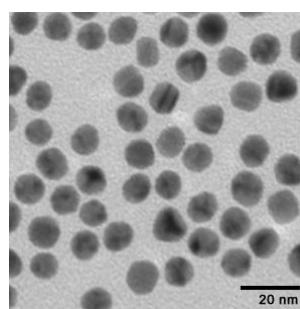


Fig. A6 Nanopartículas de oro nanoComposix

REFERENCIAS

1. http://www.academia.edu/7436774/Construcci%C3%B3n_de_celdas_solares_fotovoltaicas_empleando_nanopart%C3%ADculas_de_Ag_como_una_aplicaci%C3%B3n_potencial_de_los_recursos_mineros_de_Guanajuato.
2. Celdas solares orgánicas como fuente de energía sustentable. Barbosa-García Oracio, Acta Universitaria vol. 22 núm. 5 julio-agosto 2012, Universidad de Guanajuato, Guanajuato, México.
3. http://www.cio.mx/invest_13/gpom/sobregpom.html
4. J.L. Solís, Física de Celdas Fotovoltaicas, cap. III: Celdas solares, 2012.
5. E. Pérez Gutiérrez, J. Maldonado Rivera, Fuente alterna de energía renovable: Celdas solares orgánicas, 2013.
6. Synthesis and Characterization of P3HT: PCBM Organic Solar Cells. Jenna deBoisblanc, Senior Thesis, May 4, 2010.
7. D. Romero-Borja, J-L Maldonado Rivera, O. Barbosa García, M. Rodríguez, E. Pérez Gutiérrez, R. Fuentes Ramírez, G. De la Rosa, **Polymer solar cells based on P3HT:PC71BM doped at different concentrations of isocyanate-treated graphene, 2014.**
8. L.Córcoles, N. Espinoza, J.Padilla, J. Abad, A. Urbina, Laboratorio de Nanotecnología y Electrónica Molecular, **Fabricación y caracterización de Células Solares Orgánicas, 2013.**
9. Bright Walker, Arnold B. Tamayo, Xuan-Dung Dang, Peter Zalar, Jung Hwa Seo, Andres Garcia, Mananya Tantiwivat, and Thuc-Quyen Nguyen, **Nanoscale Phase Separation and High Photovoltaic Efficiency in Solution-Processed, Small-Molecule Bulk Heterojunction Solar Cells, 2009.**
10. Yenisey del Rocío Ponce de León Villanueva, Dr. Juan Luis Pichardo Molina, Dr. Noé Alcalá Ochoa; **Thesis: Submitted in partial fulfillment of the requirements for the degree of Doctor in Science (optics) at the Centro de investigaciones en Óptica, A.C.**