

Artículo original

Desarrollo y evaluación de celdas fotovoltaicas orgánicas nanoestructuradas

Development and evaluation of nanostructured organic photovoltaic cells

✉ Jonathan Romero-Atencio^{1,*}, ✉ Andrea Carolina Ramos-Hernández¹,
✉ Mario Alberto Romero-Colange¹, ✉ Jean Christian Guy-Bernede²,
✉ Linda Cattin Guenadez², ✉ Guy Louarn², ✉ Gean Carlos Arteaga-Arroyo³

¹ Grupo de Investigación de Química Supramolecular Aplicada, Universidad del Atlántico, Puerto Colombia, Colombia

² Departamento de Física, Facultad Ciencias Exactas, Universidad de Nantes, Nantes, Francia

³ Grupo de Investigaciones Biomédicas y Biología Molecular, Universidad del Sinú, Montería, Colombia

Resumen

En este trabajo se explora la optimización y caracterización de celdas fotovoltaicas orgánicas que utilizan colectores de electrones nanoestructurados. Como material colector se utilizaron nanovarillas de óxido de zinc (ZnO), un material que ha sido ampliamente estudiado en este campo. Las nanovarillas de ZnO se sintetizaron mediante una técnica de deposición electroquímica en sustratos de vidrio recubierto de óxido de indio y estaño (ITO). Para el proceso de síntesis de las nanovarillas de ZnO se ajustó la temperatura de síntesis electroquímica a 70 °C durante una hora y el potencial de reducción fue de -1,0 V. Las películas obtenidas se caracterizaron utilizando difracción de rayos X (DRX), microscopio electrónico de barrido (SEM) y espectroscopía fotoelectrónica de rayos X (XPS). Se emplearon películas de ZnO/ITO como cátodo en las celdas fotovoltaicas fabricadas. Se construyeron siete dispositivos en los cuales se evaluó la influencia del ZnO, del polímero conjugado P3HT y del derivado del fullereno PCBM como materiales activos, así como de las configuraciones de estructura clásica e inversa de la celda. Se registraron las curvas características J-V para los dispositivos construidos y se encontró que aquellos que no tenían las nanovarillas de ZnO presentaron un mejor comportamiento. Los mejores resultados se dieron con la configuración clásica PHJ-OPVs Vidrio/ITO/MoO₃ (5 nm) /P3HT:PCBM/LiF (1 nm) /Al (100 nm), para la cual los valores obtenidos fueron J_{sc} = 4,9 mA/cm², Voc = 0,4 V y FF = 34,9 bajo iluminación, en tanto que la eficiencia de conversión de energía (η) fue del 0,7 %.

Palabras clave: Celdas fotovoltaicas orgánicas; Nanovarillas de ZnO; Depósito electroquímico; P3HT; Configuración clásica; Eficiencia de conversión de energía.

Abstract

Here we explore the optimization and characterization of organic photovoltaic cells using nanostructured electron collectors. We used ZnO nanorods, a widely studied material in this field, as the collector material, and we synthesized them through an electrochemical deposition technique on ITO glass substrates. We adjusted the electrochemical synthesis temperature to 70°C for one (1) hour using a reduction potential of -1.0 V for the ZnO nanorod synthesis process. We characterized the resulting films by XRD, SEM, and XPS and used the ZnO/ITO films as the cathode in the fabricated photovoltaic cells. We constructed seven devices and evaluated the influence of ZnO, the conjugated polymer P3HT, and the fullerene derivative PCBM as active materials, as well as the classic and inverted cell structure configurations. We recorded J-V characteristic curves for the constructed devices and we found that those without ZnO nanorods had a better performance. The best results were obtained with the classic PHJ-OPV Glass/ITO/MoO₃ (5 nm) /P3HT:PCBM/LiF (1 nm) /Al (100 nm) configuration where J_{sc} = 4.9 mA/cm², Voc = 0.4 V, and FF = 34.9 under illumination; the power conversion efficiency (η) was 0.7 %.

Citación: Romero-Atencio J, *et al.* Desarrollo y evaluación de celdas fotovoltaicas orgánicas nanoestructuradas. Revista de la Academia Colombiana de Ciencias Exactas, Físicas y Naturales. 48(189):752-767, octubre-diciembre de 2024. doi: <https://doi.org/10.18257/raccefyn.2665>

Editor: Diógenes Campos

***Correspondencia:**

Jonathan Romero Atencio;
jonathanromero@mail.uniatlantico.edu.co

Recibido: 4 de junio de 2024

Aceptado: 9 de octubre de 2024

Publicado en línea: 8 de noviembre de 2024



Este artículo está bajo una licencia de Creative Commons Reconocimiento-NoComercial-Compartir Igual 4.0 Internacional

Keywords: Organic photovoltaic cells; ZnO nanorods; Electrochemical deposition; P3HT; Classic configuration; Power conversion efficiency.

Introducción

Hace más de cinco décadas comenzó la investigación en torno a las celdas fotovoltaicas orgánicas (OPVCs). En los últimos 20 años, han suscitado un creciente interés científico gracias a su capacidad para generar energía a bajo costo, y su rendimiento sigue mejorando. Se han reportado en otras investigaciones, como la eficiencia de conversión de energía (PCE), en laboratorio para las OPVCs que superan el 19.05% (**Chong *et al.*, 2022**). Este tipo de celdas presentan varias ventajas, como ser respetuosas con el medio ambiente, ligeras, flexibles y fáciles de implementar. Sin embargo, sus principales limitaciones para su comercialización han sido su corta vida útil, su estabilidad y una eficiencia de conversión de energía relativamente baja en comparación con las celdas solares inorgánicas. A pesar de estas limitaciones, son ampliamente utilizadas en dispositivos electrónicos portátiles y en algunos sistemas fotovoltaicos integrados en edificios. Además, se emplean en diseños de celdas solares multiunión de alta eficiencia en sistemas fotovoltaicos espaciales. Las celdas solares de triple unión, que constituyen un tipo especial de OPVCs son capaces de combinar tres tipos diferentes de materiales semiconductores para capturar una gama más amplia del espectro solar. En la actualidad, la fabricación de las OPVCs puede ser por heterounión a granel (BHJ) o heterounión planar (PHJ). El BHJ implica la incorporación de dos tipos distintos de materiales semiconductores. Uno permite el desplazamiento de los huecos (donante de electrones), el otro de los electrones (aceptor de electrones), mientras que en la interfaz (la heterounión) produce la separación de las cargas de los excitones. El PHJ es una estructura en la que se superponen capas de moléculas donantes de electrones (ED) yceptoras de electrones (EA). Estas capas se encuentran entre dos electrodos, siendo uno de ellos transparente para facilitar la absorción de la luz. Para optimizar el rendimiento de estas celdas, es posible incorporar capas tampón delgadas entre los electrodos y el material orgánico. Por lo general, en estas celdas se utiliza como aceptor de electrones (EA) el fullereno (C60) o un derivado del fullereno, como el Poli (3,4-etilendioxitiofeno) (PCBM). Los fullerenos poseen una excelente capacidad para capturar electrones y exhiben una alta movilidad de electrones. A pesar de estas propiedades ventajosas, los fullerenos presentan ciertas limitaciones. En primer lugar, no absorben significativamente en la región visible del espectro solar. Además, su modificación química no es sencilla, lo que resulta en una baja flexibilidad estructural y dificulta la adaptación de las propiedades electrónicas y ópticas para complementar la absorción de luz en relación con los donantes de electrones. En este trabajo, se abordó estas limitaciones mediante el siguiente enfoque: se analizó la influencia del tamaño de los cristalitas y las propiedades morfológicas en el mecanismo de síntesis electroquímica de una capa amortiguadora de ZnO. Se ajustaron las propiedades de esta capa para utilizarlas como capas colectoras de electrones en la celda fotovoltaica. Además, se fabricaron celdas fotovoltaicas orgánicas en la configuración con una heterounión BHJ convencional, utilizando el polímero P3HT el cual tiene la capacidad de absorber luz y generar electrones y un derivado del fullereno PCBM, los cuales se emplearon como capa activa y aceptor de electrones, respectivamente.

Materiales y métodos

Reactivos y materiales

Para la síntesis de las nanovarillas de ZnO y la fabricación de las celdas se emplearon los siguientes reactivos sin purificación previa: Acetato de Zinc dihidratado (Sigma-Aldrich, $\geq 98\%$), acetato de sodio trihidratado (Merck, $\geq 99\%$), ácido acético glacial (Merck, 100%), P3HT (Sigma-Aldrich, regioregularidad $\geq 98.5\%$), PCBM (Sigma-Aldrich, regioregularidad $\geq 99.5\%$), Cloruro de boro subftalocianina (SubPc, CODEX, $\geq 99\%$), fluoruro de litio (LiF, Merck, $\geq 99.9\%$), Ioduro de cobre (CODEX, $\geq 98\%$), Fullerenos (C60 CODEX, $\geq 99.5\%$), Tris(8-hidroxiquinolinato) de aluminio (Alq3 CODEX, $\geq 98\%$), Trióxido de Molibdeno (CODEX, $\geq 85\%$), agua milli-Q, acetona (Merck, $\geq 99.8\%$), Isopropanol (Merck, $\geq 99.5\%$). Como sustrato se emplearon láminas de vidrio recubiertas por ITO (2.5x2.5 cm).

Fabricación de celdas fotovoltaicas

Para este estudio se construyó una celda de referencia con una configuración basada en la reportada por (Emad et al. 2020). En esta celda, el sustrato de vidrio/ITO funciona como ánodo, la capa activa está compuesta del par C60/SubPc, y una capa de MoO₃ como transportador de huecos, figura 1a. Se construyeron otras 2 celdas con configuración inversa en las cuales se estudió el efecto de la inserción de las nanovarillas de ZnO en la estructura de la celda y la composición de la capa activa, figura 1b y 1c. En estos sistemas, el sustrato vidrio/ITO funciona como cátodo, y las nanovarillas ZnO se emplearon como colectores de carga, y la mezcla P3HT:PCBM como capa activa. Por último, basado en los resultados obtenidos de las pruebas con nanovarillas de ZnO, se construyó una celda con configuración clásica sin nanovarillas de ZnO, figura 1d. A continuación, se describen los procedimientos empleados para la construcción de las celdas.

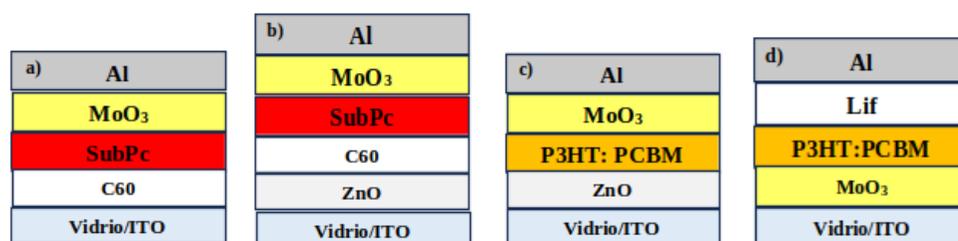


Figura 1. Esquema de celdas construidas (a) celda de referencia y (b-c) estructura inversa, (d) estructura clásica

Síntesis de nanovarillas de ZnO sobre vidrio ITO

Antes de realizar el proceso de síntesis de las nanovarillas de ZnO, se realizó un proceso de preparación de la superficie del sustrato de vidrio ITO. Este proceso consistió en lavados sucesivos del vidrio con agua milli-Q, seguido por acetona e iso-propanol. En cada etapa de lavado, se aplicaron 15 minutos de sonicación para asegurar la eliminación completa de cualquier impureza presente en la superficie. Paralelamente, se preparó la solución electrolítica consistente en acetato de sodio 0.1 M, y acetato de Zinc 0.01 M. El pH de esta solución fue ajustado a 6.5 agregando gotas de ácido acético, y fue sometida a burbujeo con oxígeno de alta pureza durante 30 minutos, a una temperatura de 70 °C la cual se mantuvo en este valor durante el proceso de síntesis. La perturbación potenciostática se realizó en una celda electroquímica típica de tres electrodos: el vidrio ITO se empleó como electrodo

de trabajo sobre el cual tuvo lugar el crecimiento de las nanovarillas de ZnO, una lámina de zinc como contraelectrodo y un electrodo de calomel saturado como electrodo de referencia. El potencial de reducción se mantuvo en -1.0 V durante el proceso de síntesis, para el cual se estableció un tiempo de reacción de 1 hora.

Síntesis de P3HT:PCBM

El composite P3HT:PCBM, que es la capa activa de la estructura clásica e inversa, se obtuvo siguiendo el siguiente procedimiento de síntesis: en 5 mL de diclorobenceno se disolvieron 0.1 g de P3HT, posteriormente fue agregado el PC61BM asegurando una relación másica P3HT:PC61BM igual a 1:1. La mezcla resultante se mantuvo en agitación vigorosa en ausencia de luz durante 20 horas, y después fue guardada en frasco ámbar hasta su uso.

Descripción de la fabricación de las capas de la celda y caracterización

La técnica utilizada para la fabricación de la celda fue la deposición por sublimación o evaporación de películas delgadas. Primero, dado que el sustrato de vidrio estaba completamente recubierto de ITO, fue necesario grabar $\frac{1}{4}$ de la superficie para evitar cualquier efecto de cortocircuito al construir la celda. Para realizar este grabado, se utiliza una pequeña cantidad de polvo de aluminio y una gota de ácido clorhídrico. A continuación, el sustrato se lava durante 10 segundos con un jabón neutro, se enjuaga con agua desionizada y se seca con una propipeta para eliminar el agua y dejar la superficie completamente limpia. Posteriormente, los sustratos se calientan durante 10 minutos a 100 °C y se introducen en una cámara de vacío equipada con una microbalanza de cuarzo. Para alcanzar un vacío de 10^{-4} Pa, las capas de la celda se subliman, dejando la muestra lista para ser colocada en el porta muestras del equipo figura 2. Es importante mencionar que las capas de ZnO y P3HT descritas anteriormente fueron depositadas mediante otras técnicas. Para el procedimiento se utilizaron tres muestras.



(a) Equipo de sublimación y evaporación



(b) Porta muestra del equipo

Figura 2. Esquema del equipo de sublimación y evaporación de alto vacío.

Resultados y Discusión

En la figura 3, se presentan los difractogramas obtenidos para las nanovarillas de ZnO sintetizadas. La muestra ZnO-A corresponde aquella a la cual se sometió a calentamiento a 150°C durante 30 min, mientras que la muestra ZnO-B es la muestra a la cual no se realizó este tratamiento. Los patrones de difracción obtenidos fueron comparados con las cartas cristalográficas reportadas para las fases cristalinas del ZnO. Adicionalmente, estos difractogramas fueron comparados con la carta cristalográfica del SiO₂ para detectar la posible contaminación de las muestras generada en el proceso de recolección desde los vidrios/ITO.

En ambas muestras analizadas se identifican picos de alta intensidad en las posiciones 2θ cercanas a 31°, 34°, 36°, 47° y 56°, estos picos corresponden a los planos de Miller de (010), (002), (011), (012) y (110), respectivamente. Al hacer la comparación con las cartas cristalográficas de referencia se determinó que estos picos corresponden a la fase cristalina wurtzita ICSD 67454 (ICSD release 1989). Esta fase cristalina se caracteriza por una geometría hexagonal con grupo espacial 186 (P63mc). En estos difractogramas el pico más intenso (002) se genera por la orientación preferencial de la estructura cristalina a lo largo de su eje *c*, este comportamiento es típico en la obtención de nanovarillas de ZnO, y se explica por el crecimiento perpendicular de las nanoestructuras sobre el sustrato en el cual son sintetizadas. (Romero, Henriquez, & Dalchiele, 2016). Los picos ubicados en las posiciones 2θ cercanas a 30° y 37° corresponden a los generados por el SiO₂ proveniente del vidrio/ITO.

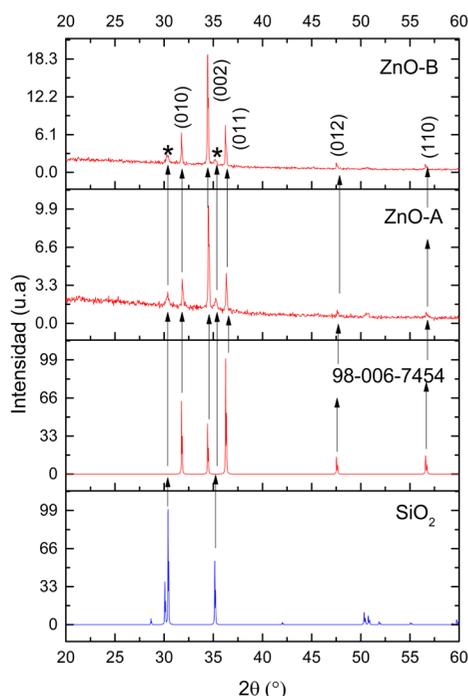


Figura 3. Patrones de difracción de rayos X de muestras de nanovarillas de ZnO que fueron sintetizadas electroquímicamente en nanotubos de ZnO en sustratos de vidrio recubiertos con una capa de ITO

En la figura 4 se muestran las imágenes SEM de las nanoestructuras de ZnO obtenidas. A primera vista, no se observan diferencias morfológicas entre las películas ZnO-A y ZnO-B,

este resultado se complementa con los obtenidos por DRX, y se corrobora que el calentamiento aplicado a 150°C a la muestra ZnO-A no causa modificaciones estructurales. Por otro lado, se evidencia la formación de estructuras hexagonales características de la fase cristalina wurtzita en las nanovarillas de ZnO.

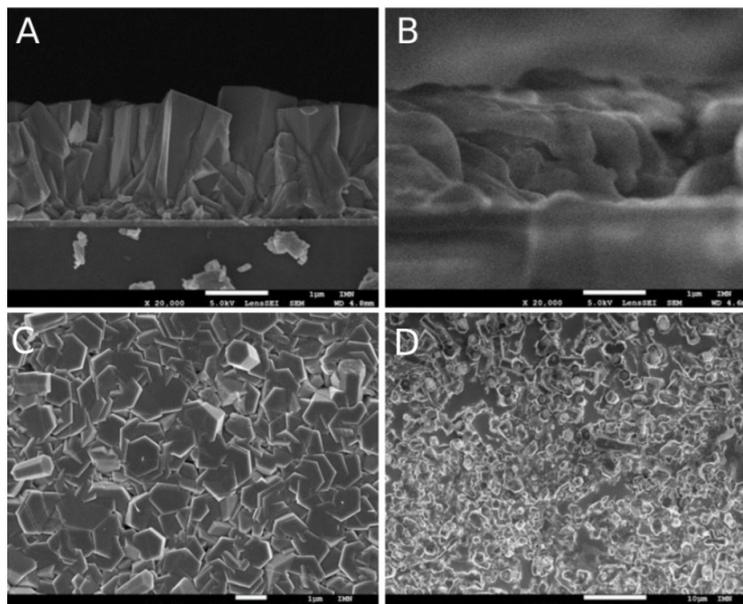
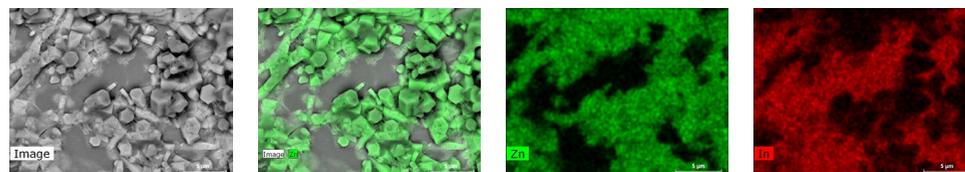


Figura 4. Imágenes de Microscopía electrónica para el material ZnO-A (A y C) y ZnO-B (B y D).

En las imágenes presentadas en la **figura 5** se muestra el análisis elemental realizado por EDS acoplado al SEM. Las **figuras 5b** y **5c** corresponden al mapa elemental generado para el Zn proveniente del ZnO; en estas se observan zonas oscuras que indican ausencia de este elemento, y al superponer estas imágenes con la **figura 5d** se encontró que estas zonas son ocupadas por el In, el cual es uno de los elementos encontrados en el ITO. Este hallazgo indica que la distribución de las nanovarillas de ZnO en el vidrio ITO no fue uniforme, generando zonas de aglomeración y ausencia de este material.



(a) Micrografía SEM de Zn. **(b)** Distribución de Zn en mapeo EDS **(c)** Mapa EDS mostrando Zn en la muestra **(d)** Mapa EDS mostrando In en la muestra

Figura 5. Micrografías SEM y mapeos EDS que muestran la distribución de Zn e In en la muestra de nanovarillas de ZnO.

ZnO: XPS

Los espectros de las nanovarillas de ZnO de las muestras depositadas en ITO como sustratos están representados en las Figuras 6-9, que se obtuvieron de muestras tratadas a 150 °C durante 30 minutos y muestras no tratadas calentadas. El análisis de los espectros anteriores proporciona información sobre la composición química y los enlaces formados en

las películas de ZnO y, por lo tanto, da una idea de que el calentamiento cambia un poco las características. Los espectros de alta resolución adquiridos para el O1s se muestran en las Figuras 7 y 8 para las muestras no calentadas y calentadas a 150 °C, respectivamente. La forma de la curva y los picos gaussianos resultantes de estos espectros se han desconvolucionado utilizando un software de procesamiento. Los subpicos representan los diferentes estados de enlace del oxígeno en la muestra. Las energías de enlace, los FWHM y los porcentajes atómicos de los diferentes componentes se muestran en la Tabla 1.

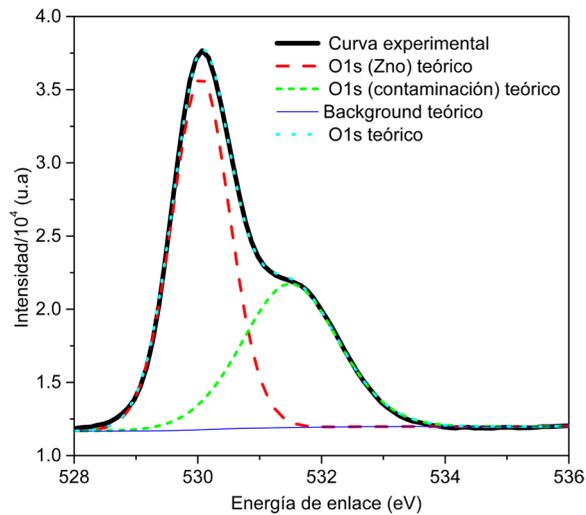


Figura 6. Espectro XPS para ZnO con tratamiento térmico a una temperatura de 150 °C durante 30 minutos O1s.

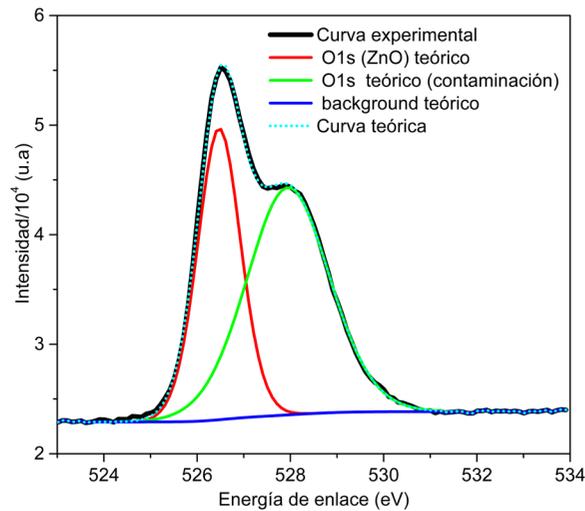


Figura 7. Espectro XPS para ZnO sin tratamiento O1s.

En la figura 6 el pico de la curva experimental corresponde a la emisión de 530.01 eV reflejando un oxígeno predominantemente asociado con la matriz de ZnO, el segundo pico emergió en el análisis con una emisión de 531.59 eV a pesar de su menor intensidad en

comparación con el primer pico, su presencia es significativa, la interpretación de este pico indica la existencia de grupos carbonilo (C=O), sugiriendo una contaminación orgánica en la superficie de la muestra cómo se encuentra en la tabla 1.

Tabla 1. Resultados obtenidos del depósito de ZnO, orbital O1s.

Nombre	Posición	Intensidad Inicial	Área Inicial	Área	% at conc
O s1	530.01	24438	34927.8	14617	69.81 ZnO
O s1	531.59	9129.43	15096.7	63439.6	30.19 C=O contaminación

Por lo tanto, si se hace una comparación entre la figura 6 y 7, se puede observar que después del calentamiento térmico, la contribución de la contaminación superficial disminuye del 60% al 40%, mientras que la contribución del ZnO sin tratamiento aumenta del 40% al 60%. Esto indica que el calentamiento térmico mejora la pureza de la capa de ZnO al eliminar los contaminantes superficiales. Los defectos estructurales en las nanoestructuras de ZnO pueden actuar como centros de recombinación para los portadores fotogenerados, lo que afecta el rendimiento de los dispositivos optoelectrónicos (Upama *et al.*, 2018). La presencia de otros picos en el O1s sugiere una regular cristalinidad de las nanoestructuras de ZnO, lo que también se confirma por los patrones de difracción de rayos X reportados en este estudio.

En la figura 8 y 9 muestran los espectros de Znp corresponde a un doblete $2p_{1/2}$ y $2p_{3/2}$. La teoría indica que es una visión común que el área del $3/2$ sea el doble del $1/2$, El pico de $2p_{1/2}$ aparece a 1044.4 eV y el de $2p_{3/2}$ a 1021.3 eV. Los electrones en cualquier orbital p pueden tener dos orientaciones de espín distintas, usualmente descritas como spin-up ó spin-down. Estas orientaciones de espín son consecuencia de las propiedades cuántica de los electrones y dan lugar a desdoblamientos en las líneas espectrales cuando se observan bajo ciertas técnicas analíticas, como la XPS.

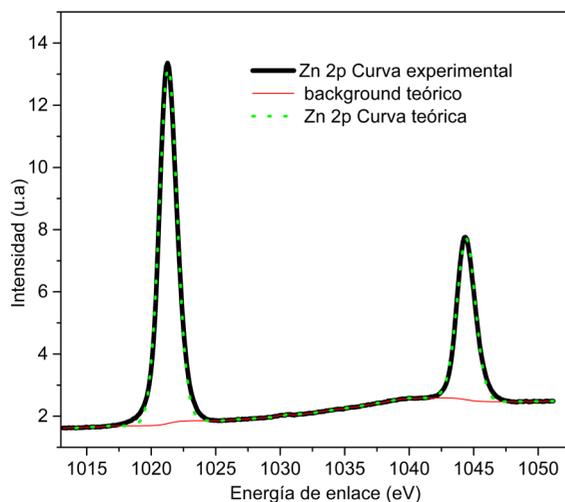


Figura 8. Espectro XPS para ZnO con tratamiento térmico Zn.

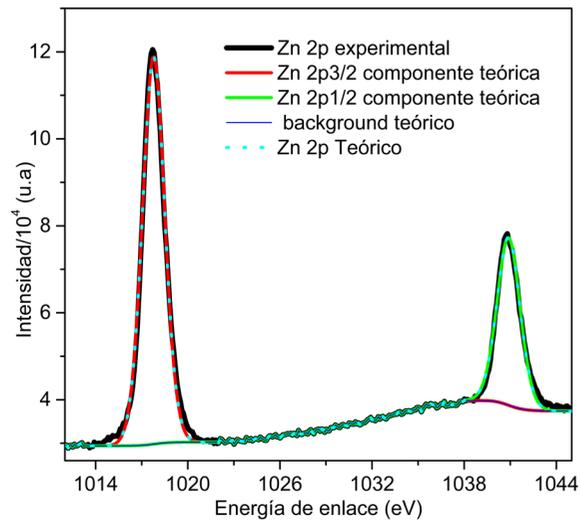


Figura 9. Espectro XPS para ZnO sin tratamiento Zn.

Las características típicas de corriente-voltaje (J-V) observadas para este tipo de dispositivos se presentan a continuación en la Figura 10: Características J-V de la configuración clásica de OPV_s con heterounión de fases (PHJ) Vidrio/ITO/C60/SubPc/MoO₃/Al.

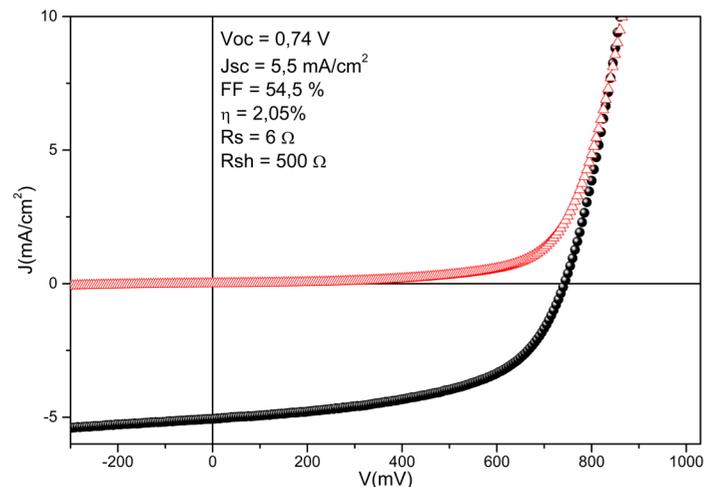


Figura 10. Características de J-V de la configuración inversa PHJ-OPV_s Vidrio/ITO/C60/SubPc/MoO₃/Al.

La figura 10 muestra el comportamiento de una celda fotovoltaica orgánica de heterounión plana bajo dos condiciones de operación distintas, analizando dos curvas que representan diferentes escenarios de operación. La curva negra con esferas ilustra el rendimiento de la celda cuando está expuesta a la luz, comenzando en el origen y aumentando de manera exponencial con el voltaje, lo que es típico en dispositivos fotovoltaicos, ya que refleja la generación de corriente en respuesta a la iluminación (Fengler & Dittrich, 2015; Upama *et al.*, 2018). Por otro lado, la curva roja con triángulos muestra la respuesta de la celda en oscuridad, permaneciendo casi plana cerca del eje Y. La curva negra proporciona información sobre el rendimiento bajo iluminación, mientras que la curva roja permite evaluar

la calidad de la unión donador/aceptor. Bajo iluminación, se registró un voltaje de circuito abierto (V_{oc}) de 0.74 V y una corriente de cortocircuito (J_{sc}) de 5.55 mA/cm², indicando un potencial de conversión de energía del 2.05 %, que es un valor representativo aunque con margen de mejora (Cattin *et al.*, 2010). Las resistencias serie (R_s) y en derivación (R_{sh}), con valores de 6 Ω y 500 Ω respectivamente, son indicadores clave de las pérdidas internas y la eficiencia del transporte de carga, siendo fundamentales para la optimización del rendimiento de la celda (Aatif & Tiwari, 2020). V_{oc} y J_{sc} reflejan la eficiencia potencial bajo condiciones ideales, mientras que el factor de llenado (FF) y la eficiencia (η) evalúan la calidad y capacidad de conversión del dispositivo. La ausencia de una curva en el cuarto cuadrante indica que no se consideró la operación bajo carga en este análisis. Este gráfico J-V proporciona un mapa detallado del comportamiento eléctrico de la celda fotovoltaica bajo iluminación, permitiendo identificar parámetros críticos como el factor de llenado, la eficiencia y las resistencias internas, esenciales para evaluar y mejorar el rendimiento del dispositivo (Aatif & Tiwari, 2020).

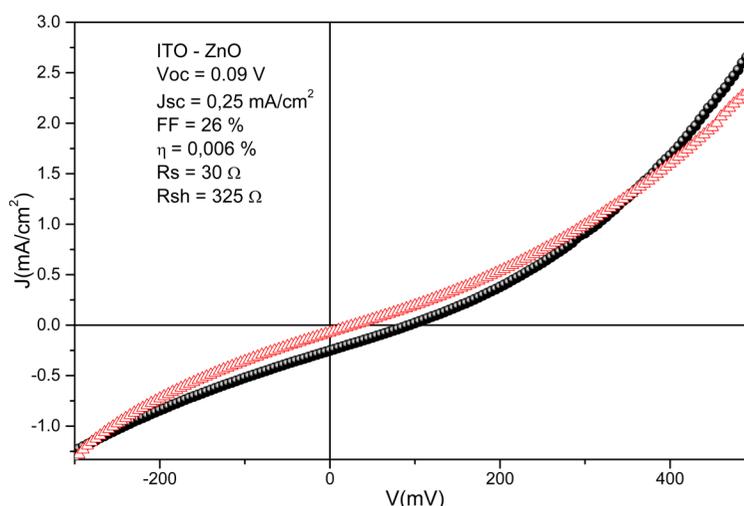


Figura 11. Características J-V Vidrio/ITO/ZnO/C60/SubPc/MoO₃/Al de la configuración inversa de OPV_s con heterounión de fases (PHJ).

En esta estructura, se introduce una capa de ZnO como capa de transporte de electrones, que facilita la extracción eficiente de electrones hacia el electrodo, optimizando el rendimiento global de la celda, en línea con los parámetros críticos discutidos previamente (Cattin *et al.*, 2010). La celda solar analizada tiene un V_{oc} de 0.09 V, un valor bajo que se atribuye al grosor excesivo de la capa de ZnO (cerca de 2 μ m), lo que afecta negativamente la eficiencia del dispositivo. La corriente desviada debido a este grosor afecta el rendimiento, por lo que se optó por un espesor de 40 nm para el SubPc, optimizando así los parámetros de rendimiento. Entre las configuraciones probadas, la estructura inversa ITO/C60/SubPc/MoO₃/Al mostró los mejores resultados, alineándose con los objetivos de eficiencia y absorción de luz (Aatif & Tiwari, 2020; Cattin *et al.*, 2010; Chen *et al.*, 2016; Fengler & Dittrich, 2015; Upama *et al.*, 2018). El factor de llenado (FF) de 26 % sugiere que la curva J-V podría no ser ideal, con R_s de 30 Ω y R_{sh} de 325 Ω , lo que indica que el R_s podría estar limitando el flujo de corriente, y el R_{sh} , aunque no extremadamente bajo, podría mejorarse para minimizar pérdidas de corriente no deseadas. El análisis de estos parámetros indica que, aunque la celda puede generar un voltaje considerable, existen áreas clave que podrían mejorarse para aumentar la eficiencia general (Del Pozo *et al.*, 2003; Zhao, Wang, & Zhan, 2018).

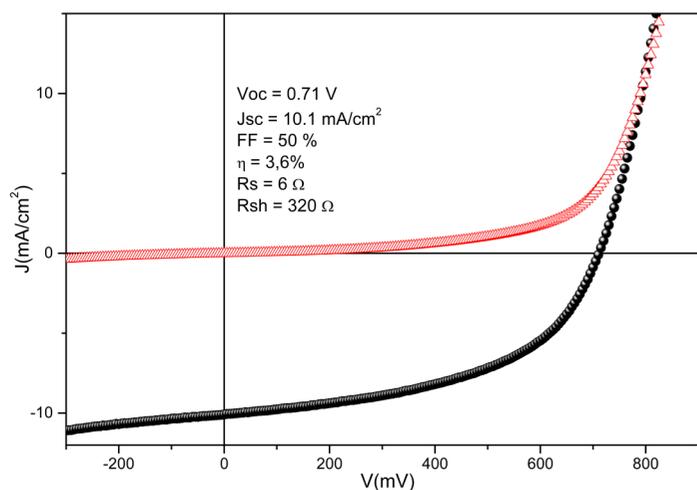


Figura 12. Características J-V de la configuración inversa de OPV_s con heterounión de fases (PHJ) Vidrio/ITO/C60/SubPc/MoO₃/Al.

La modificación en el espesor de SubPc resultó en un mejor rendimiento, como se muestra en la Figura 12. La curva J-V presenta un aumento inicial gradual que luego se vuelve exponencial, lo que es característico de la generación de energía bajo iluminación. El Voc fue de 0.71 V, el Jsc de 10.1 mA/cm² y la eficiencia (η) fue del 3.6 %, un valor aceptable. Los valores de Rs y Rsh de 6 Ω y 320 Ω respectivamente, sugieren una reducción en las pérdidas internas en comparación con celdas anteriores, mejorando la calidad del dispositivo (Yin & Dadmun, 2011). En general, aunque hay ciertos factores que limitan el desarrollo óptimo de los parámetros en estas celdas, la eficiencia obtenida, que varía desde un bajo 0.006 % hasta un 3.6 %, muestra que existen áreas de mejora significativa.

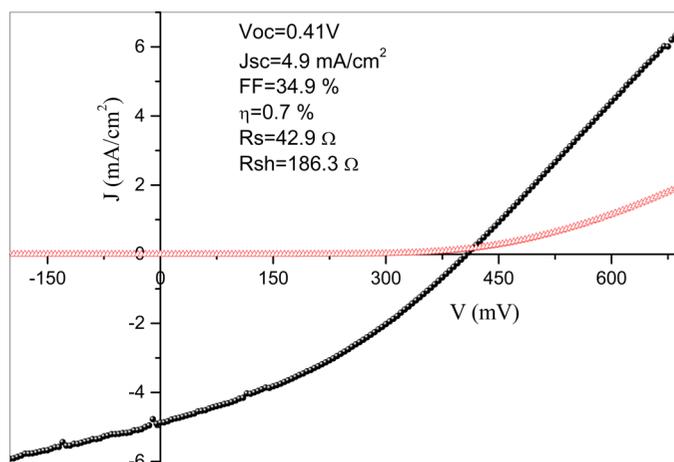


Figura 13. Características de J-V de la configuración clásica Vidrio/ITO/MoO₃ (5nm)/P3HT:PCBM/LiF (1 nm)/Al (100 nm).

La Figura 13 presenta la curva característica corriente-voltage (J-V) de una celda fotovoltaica orgánica (OPV), destacando aspectos relevantes para su análisis. El valor del voltaje de circuito abierto (Voc) es adecuado, con valores típicos alrededor de 0.5 V, y la densidad de corriente de cortocircuito (Jsc) es de 4.9 mA/cm², lo que es aceptable para este

tipo de celda. La eficiencia alcanzada es del 0.7 %, un valor que, aunque bajo, es prometeedor considerando las condiciones del experimento (El-Menyawy *et al.*, 2019). Los valores de R_s y R_{sh} , de 42.9Ω y 186.2Ω respectivamente, sugieren una alta resistencia interna que afecta el flujo de corriente, impactando negativamente la eficiencia del dispositivo (Javed *et al.*, 2021; Luo *et al.*, 2016; Yin & Dadmun, 2011).

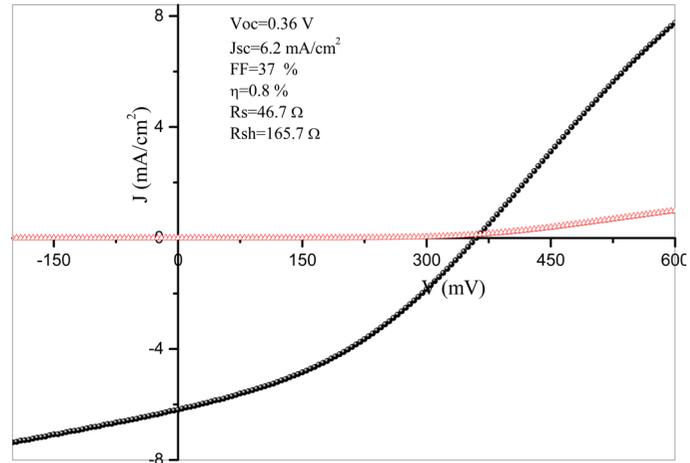


Figura 14. Caracterización eléctrica Vidrio/ITO/MoO₃ (5nm)/P3HT:PCBM/LiF (1nm)/Al (100 nm).

La Figura 14 muestra la característica corriente-voltaje (J-V) bajo condiciones de oscuridad y luz. La curva en oscuridad, cerca del eje X, indica que la corriente es prácticamente nula en ausencia de luz, lo que es consistente con el comportamiento esperado (Bartesaghi *et al.*, 2015). Los valores de R_s y R_{sh} son críticos para el análisis de las pérdidas internas. Un R_s elevado sugiere oposición considerable al flujo de corriente, mientras que un R_{sh} relativamente bajo indica posibles fugas de corriente, ambos factores afectan la eficiencia general de la celda (Bartesaghi *et al.*, 2015; Cui *et al.*, 2019; El-Menyawy, 2015; Khan *et al.*, 2022).

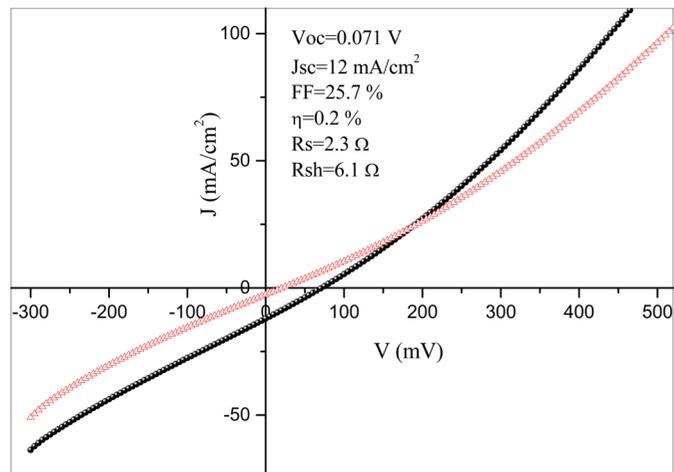


Figura 15. Características de J-V de la configuración clásica Vidrio/ITO/ZnO/P3HT:PCBM/MoO₃ (7 nm)/Al (100 nm).

El gráfico 15 muestra un V_{oc} , J_{sc} , FF y η atípicos para este tipo de celdas fotovoltaicas orgánicas, con R_s de 2.3Ω y R_{sh} de 6.1Ω , lo que sugiere una resistencia interna moderada que afecta el flujo de corriente y las pérdidas de potencia (Cui *et al.*, 2019). Estos valores no son representativos de un buen comportamiento para celdas solares orgánicas, indicando áreas de mejora significativa.

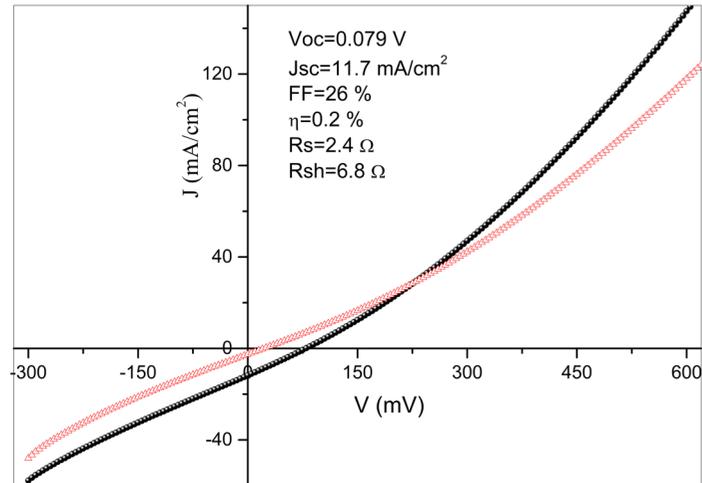


Figura 16. Características de J-V de la configuración inversa Vidrio/ITO/ZnO/P3HT:PCBM/MoO₃ (7 nm)/Al (100 nm).

Finalmente, la figura 16 destaca la importancia del J_{sc} de 11.7 mA/cm^2 como un indicador clave de la eficiencia de conversión de la celda. Aunque el FF de 26 % no es ideal, proporciona información sobre la calidad de la celda y su capacidad para operar cerca de las condiciones óptimas de V_{oc} y J_{sc} . Con una eficiencia de 0.2 %, aunque baja, se resalta la necesidad de optimizar R_s y R_{sh} para mejorar el rendimiento general (Cui *et al.*, 2019; Khan *et al.*, 2022). Estos parámetros ofrecen una comprensión integral del comportamiento y la eficiencia de la celda, proporcionando una base para futuras optimizaciones en el diseño y los materiales de la celda (Javed *et al.*, 2021).

En la tabla 2 se muestra una comparación de los resultados obtenidos en las celdas fotovoltaicas orgánicas (OPVs) con estructura clásica e invertida con los resultados reportados en la literatura:

Tabla 2. Comparación de Resultados de Celdas Fotovoltaicas Orgánicas

Parámetro	Estructura clásica	Estructura invertida	Resultados en la literatura
V_{oc}	0.4 V	0.09 V	0.5 V
J_{sc}	4.9 mA/cm ²	11.7 mA/cm ²	10-12 mA/cm ²
FF	34.9 %	26 %	30-60 %
Eficiencia (η)	0.7 %	0.82 %	3.6 %
R_s	42.9 Ω	30 Ω	2.4-6 Ω
R_{sh}	186.2 Ω	325 Ω	320 Ω

Conclusiones

Este estudio ha subrayado la importancia de la optimización y caracterización de celdas fotovoltaicas orgánicas con colectores de electrones nanoestructurados. Se ha demostrado que un depósito controlado de nanotubos de ZnO es fundamental para maximizar el rendimiento de las celdas, y que la interacción en la interfaz entre los materiales y el ánodo de ITO juega un papel crucial en su desempeño. Las imágenes SEM y los patrones XRD confirmaron la presencia de una fase hexagonal wurtzita en el ZnO, destacando un alto contenido de oxígeno, lo que sugiere la necesidad de abordar posibles contaminaciones identificadas mediante DRX. Estos hallazgos enfatizan la relevancia de técnicas como la espectroscopía de fotoelectrones de rayos X (XPS) para la identificación precisa de estados químicos en las superficies, y abren nuevas oportunidades para mejorar la calidad y pureza de las capas tampón de ZnO.

El análisis de las curvas corriente-voltaje (J-V) ha proporcionado una visión clara sobre el funcionamiento y la eficiencia de las celdas solares estudiadas. En particular, se ha identificado que la optimización de la interfaz entre el ITO y los materiales orgánicos es clave para reducir las pérdidas por recombinación de carga y mejorar la eficiencia de recolección de portadores, resultando en un incremento significativo de la eficiencia de conversión de energía. Este aspecto es fundamental para el diseño de celdas solares más eficientes.

Además, se ha investigado cómo la interacción entre la interfaz y los materiales afecta la forma de la curva J-V, especialmente en configuraciones convencionales con ánodo de ITO. El uso de un aceptor de electrones como PCBM y el polímero P3HT como material activo, comparado con el C60 en celdas de referencia, ha demostrado que tanto la pureza de los materiales como la optimización de la interfaz son determinantes para lograr altos factores de llenado y, por ende, una mayor eficiencia energética. Estos resultados resaltan la importancia de continuar investigando en la mejora de las interfaces y la pureza de los materiales para desarrollar celdas solares orgánicas más eficientes y duraderas.

Agradecimientos

Queremos expresar nuestro profundo agradecimiento al Departamento de Investigación de la Universidad del Atlántico por respaldar este trabajo a través del proyecto de investigación de Convocatoria de Movilidad Académica con Europa No. 836- 2019, con código de registro No. 67001, al profesor Emad El-Menyawy del Laboratorio de Electrónica del Estado Sólido, Departamento de Física del Estado Sólido, División de investigación Física, Centro Nacional de Investigación en Giza, Egipto, por sus valiosas discusiones previas sobre este tema, y al programa de cooperación científica y tecnológica Colombia- Francia ECOS Nord- Ministerio de Ciencia por el apoyo financiero brindado a través del contrato No. C20P01 y el Contrato 895-2019. Por último, y no menos importante, agradezco al profesor Davian Martínez Buitrago de la Universidad de los Llanos, y a mi amigo colega Alvaro Andres Barraza Romero por el apoyo incondicional que siempre me ha brindado, al candidato a doctor Freider Duran por su direccionamiento, Cada contribución ha sido fundamental para el desarrollo y éxito de este trabajo. Agradecemos sinceramente su dedicación y colaboración.

Contribución de los autores

J R, A R, M R, G A, J C-B, G L, LC, diseñaron el estudio, redactaron el manuscrito, recolectaron e interpretaron los datos.

Conflicto de intereses

Los autores declaran no tener conflictos de intereses.

References

- Aatif, M., Tiwari, J. (2020) Futuristic electron transport layer based on multifunctional interactions of zno/tcne for stable inverted organic solar cells. *RSC advances*, 10(69), 42305–42317.
- Bartasaghi, D., Pérez, I. D. C., Kniepert, J., Roland, S., Turbiez, M., Neher, D., Koster, L. J. A. (2015) Competition between recombination and extraction of free charges determines the fill factor of organic solar cells. *Nature communications*, 6(1), 7083.
- Cattin, L., Morsli, M., Dahou, F., Abe, S. Y., Khelil, A., Bernède, J. (2010) Investigation of low resistance transparent moo3/ag/moo3 multilayer and application as anode in organic solar cells. *Thin Solid Films*, 518(16), 4560–4563.
- Chen, S., Pan, X., Xu, C., Huang, J., Ye, Z. (2016) X-ray photoelectron spectroscopy study of energy-band alignments of zno on buffer layer lu2o3. *Physics Letters A*, 380(7-8), 970–972.
- Chen, X., Zhao, M., Zhang, Z.-g., Li, Y., Li, X., Wang, H. (2018) High-efficiency all polymer solar cell with a low voltage loss of 0.56 v. *ACS Applied Energy Materials*, 1(5), 2350–2357.
- Chong, K., Xu, X., Meng, H., Xue, J., Yu, L., Ma, W., Peng, Q. (2022) Realizing 19.05% efficiency polymer solar cells by progressively improving charge extraction and suppressing charge recombination. *Advanced Materials*, 34(13), 2109516.
- Cui, Y., Yao, H., Zhang, J., Zhang, T., Wang, Y., Hong, L., Xian, K., Xu, B., Zhang, S., Peng, J., *Et al.* (2019) Over 16% efficiency organic photovoltaic cells enabled by a chlorinated acceptor with increased open-circuit voltages. *Nature communications*, 10(1), 2515.
- Del Pozo, G., Romero, B., Arredondo, B., Gutiérrez-Llorente, A. (2003) Células solares orgánicas basadas en p3ht/pcbm. *Adv. Funct. Mater*, 13, 85–88.
- El-Menyawy, E. (2015) Electrical and photovoltaic properties of gaussian distributed inhomogeneous barrier based on tris (8-hydroxyquinoline) indium/p-si interface. *Materials Science in Semiconductor Processing*, 32, 145–151.
- El-Menyawy, E., Cattin, L., Bernède, J., Louarn, G., Arzel, L. (2019) Facile enhancement of bulk heterojunction solar cells performance by utilizing pbse nanorods decorated with graphene. *Journal of colloid and interface science*, 553, 117–125.
- Fengler, S., Dittrich, T. (2015) Electronic transitions and band offsets in c {sub 60}: Subpc and c {sub 60}: Mgpc on moo {sub 3} studied by modulated surface photovoltage spectroscopy. *Journal of Applied Physics*, 118(3).
- Javed, A. H., Shahzad, N., Khan, M. A., Ayub, M., Iqbal, N., Hassan, M., Hussain, N., Rameel, M. I., Shahzad, M. I. (2021) Effect of zno nanostructures on the performance of dye sensitized solar cells. *Solar Energy*, 230, 492–500.
- Khan, M. U., Imran, M., Rehman, M. F. u., Assiri, M. A., Mashhadi, S. M. A., Akram, M. S., Lu, C. (2022) Evaluating zn-porphyrin-based near-ir-sensitive non-fullerene acceptors for efficient panchromatic organic solar cells. *ChemistryOpen*, 11(8), e202200047.
- Luo, G., Ren, X., Zhang, S., Wu, H., Choy, W. C., He, Z., Cao, Y. (2016) Recent advances in organic photovoltaics: Device structure and optical engineering optimization on the nanoscale. *Small*, 12(12), 1547–1571.

-
- Romero, M., Henriquez, R., Dalchiele, E.** (2016) Electrochemical deposition of zno nanorod arrays onto a zno seed layer: Nucleation and growth mechanism. *International Journal of Electrochemical Science*, 11(10), 8588–8598.
- Upama, M. B., Elumalai, N. K., Mahmud, M. A., Xu, C., Wang, D., Wright, M., Uddin, A.** (2018) Enhanced electron transport enables over 12% efficiency by interface engineering of non-fullerene organic solar cells. *Solar Energy Materials and Solar Cells*, 187, 273–282.
- Yin, W., Dadmun, M.** (2011) A new model for the morphology of p3ht/pcbm organic photovoltaics from small-angle neutron scattering: Rivers and streams. *ACS nano*, 5(6), 4756–4768.
- Zhao, F., Wang, C., Zhan, X.** (2018) Morphology control in organic solar cells. *Advanced Energy Materials*, 8(28), 1703147.