



# Fabricación y Caracterización de una Célula Solar Orgánica

José Otero Ruiz

MSc Electrical Engineering

Faculty of Computing, Engineering & Technology

Staffordshire University, Stoke-on-Trent

2017



## Resumen

El propósito de este proyecto es describir brevemente la fabricación de células solares y probar la eficacia de conversión de potencia de las mismas. Obtendremos las propiedades eléctricas y evaluaremos los parámetros fotovoltaicos.

La fabricación de la célula solar se realiza bajo condiciones ambientales, por lo que existirán agentes externos que condicionen la eficiencia de la célula.

Además, se evaluarán diferentes métodos mecánicos para medir el espesor de las películas y las propiedades de los espectros de absorción de los materiales utilizados para aplicaciones de células solares orgánicas (medición de espesores, espectros de absorción óptica, AFM, difracción de rayos X, medidas Raman y fotoluminiscencia).

# Índice

Resumen .....	3
Índice .....	4
Lista de figuras .....	5
<b>1 Introducción</b> .....	8
<b>2 Fabricación del dispositivo</b> .....	9
<b>2.1 Materiales necesarios</b> .....	9
<b>2.2 Procedimiento para fabricar un dispositivo</b> .....	12
<b>3 Caracterización del dispositivo</b> .....	16
<b>3.1 I-V Características</b> .....	18
PBDTTT-C-T: IC <sub>60</sub> BA .....	18
PBDTTT-C-T: PC <sub>70</sub> BM.....	24
<b>3.2 Medición de espectros de absorción óptica</b> .....	30
PBDTTT-C-T polymer .....	31
PBDTTT-C-T: PC <sub>70</sub> BM.....	31
PBDTTT-C-T: IC <sub>60</sub> BA .....	32
<b>3.3 Morfología superficial (AFM)</b> .....	33
Pristine PBDTTT-C-T polymer .....	34
PBDTTT-C-T: PC <sub>70</sub> BM.....	35
PBDTTT-C-T: IC <sub>60</sub> BA .....	36
<b>3.4 Medición del espesor</b> .....	37
<b>3.5 Difracción de rayos X</b> .....	38
PBDTTT-C-T polymer .....	39
PBDTTT-C-T: PC <sub>70</sub> BM.....	40
PBDTTT-C-T: IC <sub>60</sub> BA .....	41
<b>3.6 Espectroscopia Raman y fotoluminiscencia</b> .....	42
3.6.1 Espectroscopia Raman .....	42
3.6.2 Espectroscopia de fotoluminiscencia.....	44
<b>4 Conclusión y discusión</b> .....	45
<b>5 Bibliografía</b> .....	46

## Lista de figuras

Figure 1 Substrato de vidrio recubierto con ITO pre-estampado. .... **¡Error! Marcador no definido.**

Figure 2 PEDOT: PSSS. .... **¡Error! Marcador no definido.**

Figure 3 Tanque de limpieza por ultrasonidos.....**¡Error! Marcador no definido.**

Figure 4 Alambre de aluminio. .... **¡Error! Marcador no definido.**

Figure 5 Spin coater. .... **¡Error! Marcador no definido.**

Figure 6 Sistema de deposición de vacío Auto 500....**¡Error! Marcador no definido.**

Figure 7 Nitrógeno líquido..... **¡Error! Marcador no definido.**

Figure 8 Tanque de limpieza por ultrasonidos.....**¡Error! Marcador no definido.**

Figure 9 Caída del PEDOT: PSS en toda la sección del sustrato.. .... **¡Error! Marcador no definido.**

Figure 10 Placa calefactora para el secado del PEDOT. PSS..... **¡Error! Marcador no definido.**

Figure 11 Uso de un bastoncillo de algodón para eliminar la capa activa.  
..... **¡Error! Marcador no definido.**

Figure 12 Alambre de aluminio cuelgan del filamento en la cámara de deposición..... **¡Error! Marcador no definido.**

Figure 13 Máscara de sombra donde se coloca la capa activa..... **¡Error! Marcador no definido.**

Figure 14 Monitor para controlar el espesor de la película. .... **¡Error! Marcador no definido.**

Figure 15 Cámara de depocisión durante el proceso de deposición..**¡Error! Marcador no definido.**

Figure 16 Célula solar orgánica.. .... **¡Error! Marcador no definido.**

Figure 17 Simulador solar ..... **¡Error! Marcador no definido.**

Figure 18 Medidor de fuente Keithley 2400.....**¡Error! Marcador no definido.**

Figure 19 Espectrómetro de absorción Varian Cary 50...**¡Error! Marcador no definido.**

Figure 20 Microscopio multimodo para sonda de barrido Agilent 5500 AFM. .... **¡Error! Marcador no definido.**

Figure 21 Perfilador de superficie Dektak XT.....**¡Error! Marcador no definido.**

Figure 22 Avance D8 con DAVINCI con detector LYNXEYE..... **¡Error! Marcador no definido.**

Figure 23 Microscopio RENISHAW inVia Raman.. **¡Error! Marcador no definido.**

Figure 24 Ejemplo de un dispositivo dañado.....**¡Error! Marcador no definido.**

Figure 25 Características del dispositivo V-I cuando no hay luz. .... **¡Error! Marcador no definido.**

Figure 26 Características del dispositivo V-I bajo iluminación..... **¡Error! Marcador no definido.**

Figure 27 Características del dispositivo V-J bajo iluminación. .... **¡Error! Marcador no definido.**

Figure 28 Potencia del dispositivo y características V-I bajo iluminación..  
..... **¡Error! Marcador no definido.**

Figure 29 Características del dispositivo V-I L1. ....**¡Error! Marcador no definido.**

Figure 30 Características del dispositivo V-I L1\_2. ...**¡Error! Marcador no definido.**

Figure 31 Características del dispositivo V-I L2. ....**¡Error! Marcador no definido.**

Figure 32 Características del dispositivo V-I L2\_2. ...**¡Error! Marcador no definido.**

Figure 33 Características del dispositivo V-I L3\_2 ....**¡Error! Marcador no definido.**

Figure 34 Características del dispositivo V-I cuando no hay luz... .... **¡Error! Marcador no definido.**

Figure 35 Características del dispositivo V-I bajo iluminación..... **¡Error! Marcador no definido.**

Figure 36 Características del dispositivo V-J bajo iluminación. .... **¡Error! Marcador no definido.**

Figure 37 Potencia del dispositivo y características V-I bajo iluminación..  
..... **¡Error! Marcador no definido.**

Figure 38 Características del dispositivo V-I L1 .....**¡Error! Marcador no definido.**

Figure 39 Características del dispositivo V-I L2. ....; **Error! Marcador no definido.**

Figure 40 Características del dispositivo V-I L3. ....; **Error! Marcador no definido.**

Figure 41 Características del dispositivo V-I L4. ....; **Error! Marcador no definido.**

Figure 42 Características del dispositivo V-I L5. ....; **Error! Marcador no definido.**

Figure 43 Características del dispositivo V-I L6. ....; **Error! Marcador no definido.**

Figure 44 Espectro de absorción..... ; **Error! Marcador no definido.**

Figure 45 Espectro de absorción para PBDTTT-C-T .....; **Error! Marcador no definido.**

Figure 46 Espectro de absorción para PBDTTT-C-T con PC<sub>70</sub>BM. . ; **Error! Marcador no definido.**

Figure 47 Espectro de absorción para PBDTTT-C-T con IC<sub>60</sub>BA. ... ; **Error! Marcador no definido.**

Figure 48 Imagen de la topografía PBDTTT-C-T.. ....; **Error! Marcador no definido.**

Figure 49 Mapeo 3D de la topografía 2x2 um del PBDTTT-C-T.... ; **Error! Marcador no definido.**

Figure 50 Imagen de la topografía PBDTTT-C-T con PC<sub>70</sub>BM..... ; **Error! Marcador no definido.**

Figure 51 Mapeo 3D de la topografía 2x2 um del PBDTTT-C-T con PC<sub>70</sub>BM. .... ; **Error! Marcador no definido.**

Figure 52 Imagen de la topografía PBDTTT-C-T con IC<sub>60</sub>BA. .... ; **Error! Marcador no definido.**

Figure 53 Mapeo 3D de la topografía 2x2 um del PBDTTT-C-T con IC<sub>60</sub>BA..... ; **Error! Marcador no definido.**

Figure 54 Perfil de altura de paso medido de una película..... ; **Error! Marcador no definido.**

Figure 55 Patrón de difracción de rayos X de CT, CT-PC70BM y CT-IC60BA.. .... ; **Error! Marcador no definido.**

Figure 56 Patrón de difracción de rayos X de PBDTTT-C-T..... ; **Error! Marcador no definido.**

Figure 57 Patrón de difracción de rayos X de CT-PC70BM. .... ; **Error! Marcador no definido.**

Figure 58 Patrón de difracción de rayos X de CT-IC<sub>60</sub>BA..... **¡Error! Marcador no definido.**

Figure 59 Cambio de Raman con 1200 l/mm y 0.05% de potencia.. **¡Error! Marcador no definido.**

Figure 60 Cambio de Raman con tiempo de 10s y 0.1% de potencia.  
..... **¡Error! Marcador no definido.**

Figure 61 Raman shift for CT, CT with PC<sub>70</sub>BM and CT with IC<sub>60</sub>BA.  
..... **¡Error! Marcador no definido.**

Figure 62 PL espectros de PBDTTT-C-T, PBDTTT-C-T: IC<sub>60</sub>BA y  
PBDTTT-C-T: PC<sub>70</sub>BM. .... **¡Error! Marcador no definido.**



# 1 Introducción

La forma más simple de la célula solar orgánica es de capa única, fabricándose colocando un material electrónico orgánico entre dos conductores metálicos. La luz golpea el material y crea excitones. Los dispositivos de capa única tienen una eficiencia cuántica pobre y eficiencias de conversión de baja potencia, ya que las celdas son bastante finas. Si la celda no es lo suficientemente fina, entonces los electrones se recombinarían con los agujeros.

Las células solares orgánicas bicapa están formadas por dos láminas colocadas entre los electrodos. Tienen más eficiencia que la célula solar orgánica de capa única. Sin embargo, el grosor de las células solares está generalmente cerca de los 100nm para absorber suficiente luz. Las células solares orgánicas bicapa tienen sólo una pequeña fracción de los excitones que pueden alcanzar la interfaz si se consideran espesores próximos a los 100nm.

Las células solares orgánicas mezcladas tienen una capa de absorción formada por una mezcla de materiales aceptor y donante. Dependen del material aceptor así como de la proporción utilizada. En nuestro experimento se consideran los compuestos IC60BA y PC70BM.

## 2 Fabricación del dispositivo

En este apartado se procederá a, una vez realizado un estudio de las necesidades para fabricar el dispositivo, establecer la relación de los materiales así como las pautas para la fabricación del mismo.

### *2.1 Materiales necesarios*

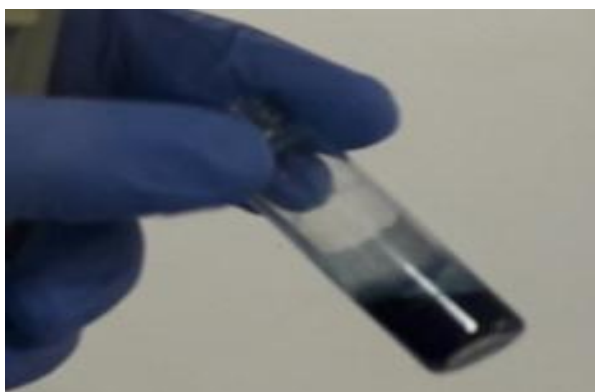
Para la fabricación de una célula solar orgánica bajo condiciones ambientales se requieren los siguientes materiales:

Óxido de estaño de indium pre-estampado, ITO, sustrato de vidrio recubierto (25mm×25mm) (Figure 49).



*Figura 1 Substrato de vidrio recubierto con ITO pre-estampado.*

Poli (3,4-etilendioxitiofeno) -poli (estireno sulfonato), PEDOT: PSS (que es el material de la capa de “buffer layer”) (Figure 50).



*Figura 2 PEDOT: PSSS.*

Solución de capa activa una mezcla de donante PBDTTT-C-T, y receptor IC<sub>60</sub>BA o PC<sub>70</sub>BM en la relación de 1:1.5 (20 mg/ml in diclorobenceno, ODCB).

Los disolventes de limpieza de sustrato que se colocarán en un tanque de limpieza por ultrasonidos (Figura 3) son:

- 1- Agua desionizada
- 2- Acetona
- 3- Isopropanol (IPA)



*Figura 3 Tanque de limpieza por ultrasonidos.*

Alambre de aluminio (Figura 4) que se utilizará para la deposición del cátodo.



*Figura 4 Alambre de aluminio.*

“Spin coater” (Figura 5).



*Figura 5 Spin coater.*

Sistema de deposición de vacío Auto 500 (Figura 6).



*Figura 6 Sistema de deposición de vacío Auto 500.*

El nitrógeno líquido (Figura 7) que será utilizado para disminuir la presión de vacío.



*Figura 7 Nitrógeno líquido.*

## 2.2 Procedimiento para fabricar un dispositivo

Describimos, a continuación, los diferentes pasos que conlleva el proceso de fabricar una célula solar orgánica:

1. *Limpieza y preparación del sustrato*. El sustrato tendrá un lado de vidrio y otro con recubrimiento ITO (la capa de ITO conducirá y se podrá identificar fácilmente con el uso de un multímetro en el modo de resistencia). Los sustratos recubiertos con ITO serán pre-modelados antes del proceso de limpieza. El proceso de limpieza consistirá en un baño ultrasónico (Figura 8) en el que el sustrato de vidrio se limpia en agua desionizada, acetona e isopropanol. Todo el proceso dura alrededor de 35 minutos ya que se tendrá el sustrato de vidrio alrededor de diez minutos en cada disolvente. El tiempo también estará relacionado con el nivel de limpieza deseado. A continuación se limpia el sustrato ITO.



Figura 8 Tanque de limpieza por ultrasonidos.

2. *“Buffer layer deposition”*. Se forma una película uniforme de PEDOT: PSS por depósito del PEDOT: PSS en toda la sección del sustrato tras la puesta en marcha del “spin coater” por centrifugación (Figura 9). El “spin coater” está programado para trabajar en dos etapas con diferentes tiempos y velocidades. Mediante la modificación de estos dos parámetros se controla el grosor final de la película PEDOT: PSS.



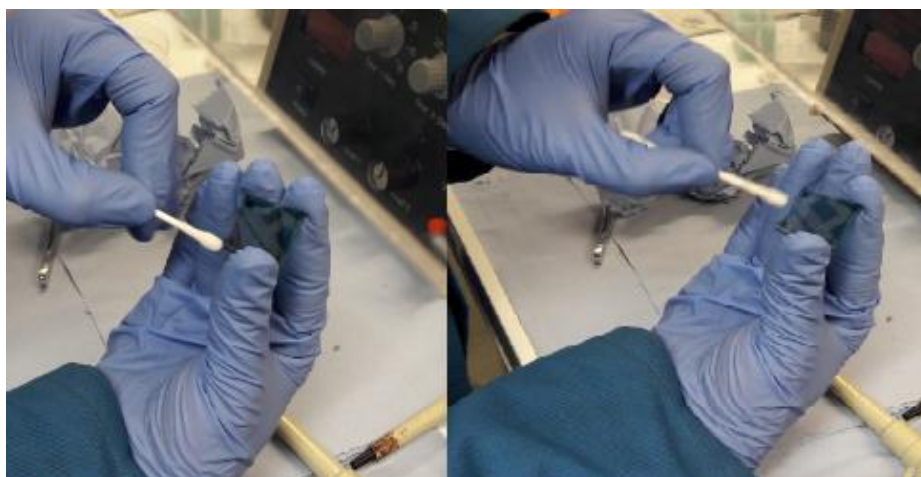
Figura 9 Caída del PEDOT: PSS en toda la sección del sustrato.

Después PEDOT: La película fina PSS se mantiene a una temperatura próxima a 120°C durante diez minutos para garantizar su secado, ya que la siguiente capa es sensible a la humedad (Figura 10). Luego se enfría y se prepara para la deposición de la capa activa. La etapa 1 del “spin coater” se realizó a 400 rpm, durante 6 segundos y la etapa 2 se llevó a cabo a 500 rpm, durante 30 segundos.



*Figura 10 Placa calefactora para el secado del PEDOT. PSS.*

3. *Estructura de centrifugado de capa activa.* La concentración de la solución, la velocidad del “spin coater” y el tiempo son factores relacionados con el espesor de película deseado. Puesto que el grosor final de la película está relacionado con la cantidad de energía que se puede absorber, no se desea una película muy delgada. Se obtendrá un espesor de alrededor de 100 nm cuando finalice el “spin coater”. El tiempo de giro fue de 18 segundos y la velocidad 500 rpm. Una vez terminado el recubrimiento por centrifugación, se evapora el disolvente residual y se usa un bastoncillo de algodón humedecido en un disolvente orgánico para eliminar una línea de la capa activa de modo que se pueda realizar el contacto eléctrico con el electrodo ITO (Figura 11).



*Figura 11 Uso de un bastoncillo de algodón para eliminar la capa activa.*



4. *Depósito de cátodo.* En primer lugar, se encenderá y preparará para su uso el sistema de deposición Auto 500. Luego se preparan los alambres de aluminio. Un alambre de 15 mm podría ser suficiente para lograr el grosor deseado, sin embargo, se usará mayor por seguridad (Figura 12).



*Figura 2 Alambre de aluminio cuelgan del filamento en la cámara de deposición.*

A continuación, se utiliza una máscara de sombra para colocar sobre ella el sustrato recubierto de capa activa buscando que el área activa del dispositivo completado sea la deseada (Figura 13).



*Figura 33 Máscara de sombra donde se coloca la capa activa.*

Después de esto, la máscara de sombra se coloca en la cámara de deposición (Figura 6), donde se desea una presión de vacío próxima a  $10^{-6}$  mbar. Se utilizó nitrógeno líquido (Figura 7) para conseguir este valor de vacío rápidamente. En el proceso de deposición, el espesor del aluminio se controla mediante un monitor (Figura 14).



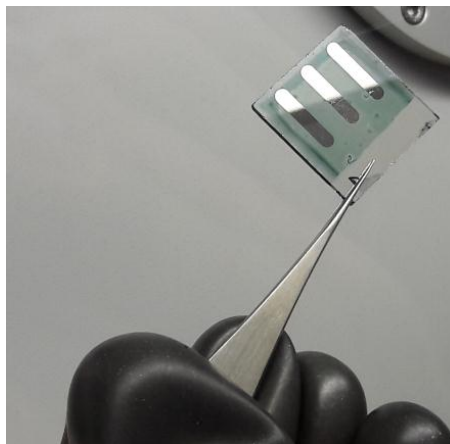
*Figura 44 Monitor para controlar el espesor de la película.*

Este monitor indica la velocidad de evaporación (a la izquierda) y el grosor de la película (a la derecha). Este proceso (Figura 15) se prolongará el tiempo necesario hasta que se alcanza el espesor deseado (en nuestro caso es de aproximadamente 100 nm). El proceso de deposición consiste en calentar la bobina de aluminio inyectando corriente para que el aluminio se evapore.



*Figura 55 Cámara de deposición durante el proceso de deposición.*

Finalmente se fabricó la célula solar orgánica (Figura 16).



*Figura 66 Célula solar orgánica.*

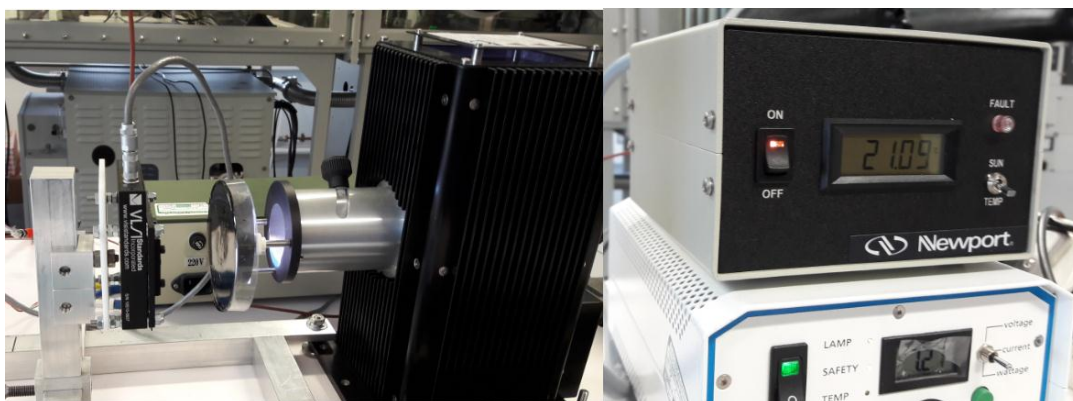
5. *Mediciones.* Una vez creado el dispositivo se pueden realizar diferentes mediciones para evaluar los parámetros fotovoltaicos del mismo.



### 3 Caracterización del dispositivo

En esta sección se realiza un estudio de diferentes características de una célula solar orgánica. Para su caracterización se utilizaron las siguientes máquinas:

Simulador solar (Figura 17) que proporcionará una entrada de energía de alrededor de  $100\text{mW}/\text{cm}^2$ .



*Figura 77 Simulador solar.*

Medidor de fuente Keithley 2400 (Figura 8).



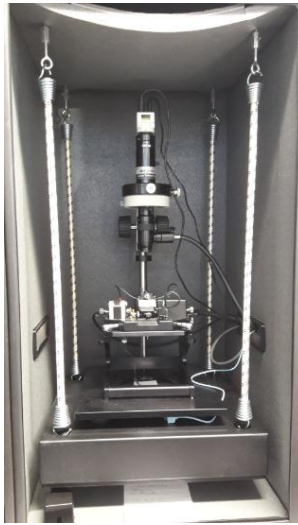
*Figura 88 Medidor de fuente Keithley 2400.*

Espectrofotómetro UV-Vis (Figura 9).



*Figura 9 Espectrómetro de absorción Varian Cary 50.*

Microscopio de sonda de barrido, SPM, (Figura 20).



*Figura 20 Microscopio multimodo para sonda de barrido Agilent 5500 AFM.*

Perfilador de superficie (Figura 21).



*Figura 101 Perfilador de superficie Dektak XT.*

Máquina de difracción de rayos X (Figura 22).



*Figura 112 Avance D8 con DAVINCI con detector LYNXEYE.*

Espectroscopía Raman (Figura 23).



Figura 12 Microscopio RENISHAW inViA Raman.

### 3.1 I-V Características

Colocando nuestros dispositivos bajo un simulador solar (Figura 17) se obtuvieron las características I-V del dispositivo en condiciones de iluminación. Para lograr esto se utilizó una fuente Keithley 2400 (Figura 18).

PBDTTT-C-T: IC<sub>60</sub>BA

Dado que el análisis es el mismo para todos los dispositivos, únicamente estudiaremos uno que nos servirá como ejemplo del resto.

En uno de los dispositivos se obtuvieron datos extraños lo que nos indica que estaba dañado (Figura 24).

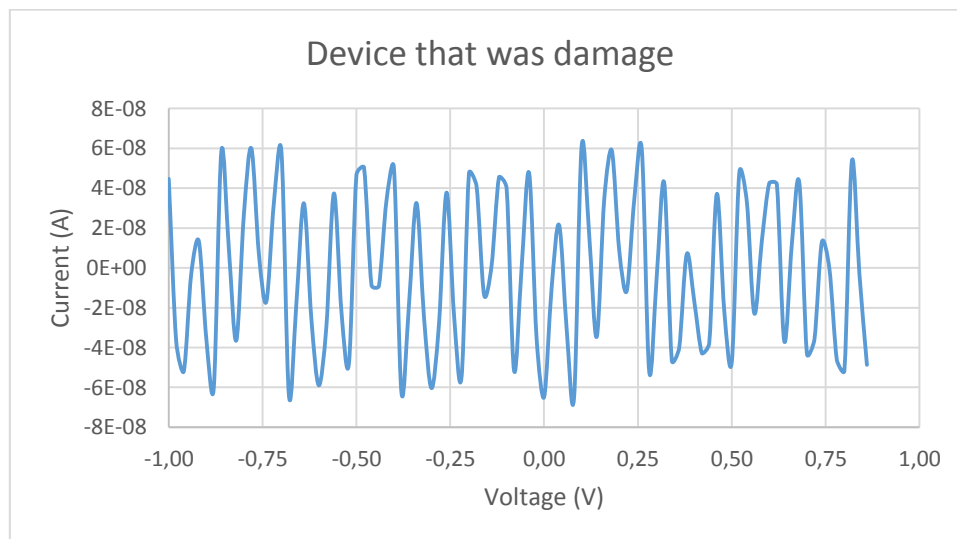


Figura 13 Ejemplo de un dispositivo dañado.

Inicialmente las características V-I del dispositivo se midieron sin ninguna luz (Figura 25).

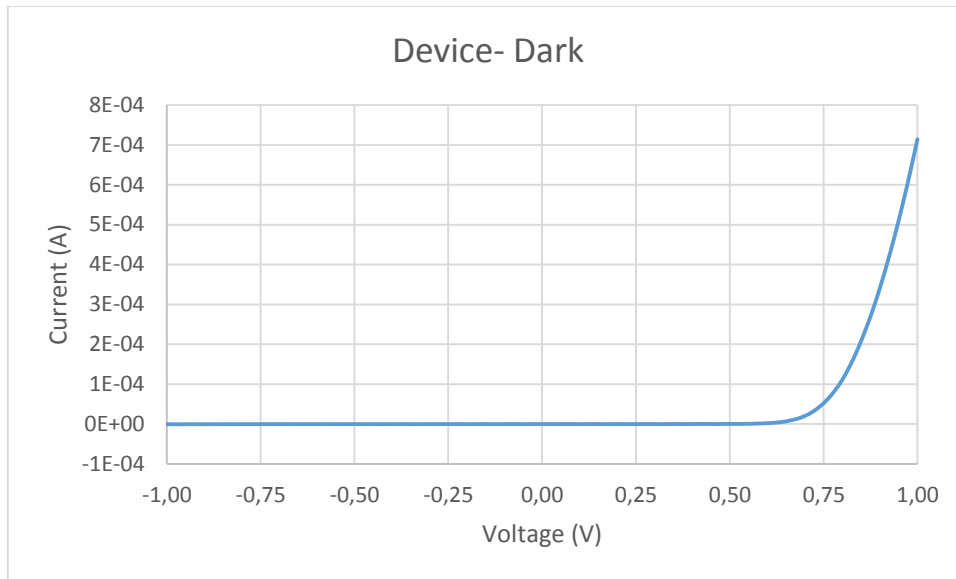


Figura 14 Características del dispositivo V-I cuando no hay luz.

A continuación, se utiliza el simulador solar y se obtienen los datos siguientes (Figura 26):

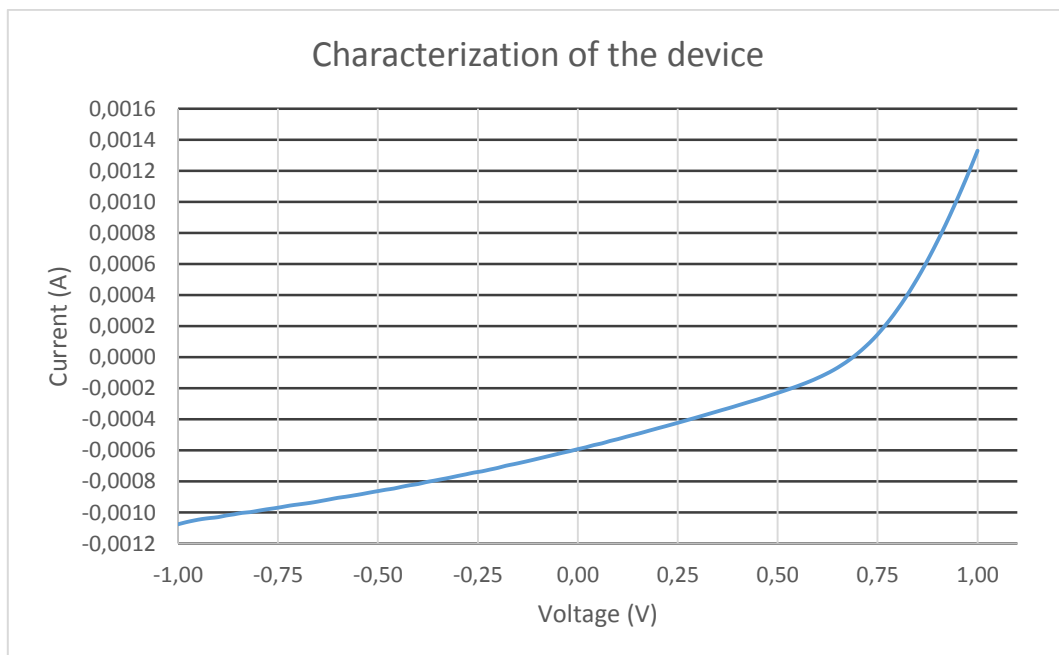


Figura 15 Características del dispositivo V-I bajo iluminación.

A partir de los datos anteriores (Figura 26) se puede obtener la corriente de cortocircuito y la tensión de circuito abierto:

$$V_{oc}=0.6875 \text{ V}$$

$$I_{sc}=0.00058 \text{ A}$$

Sabiendo que el área del dispositivo es  $0.13 \text{ cm}^2$ , también se pueden obtener las características VJ (Figura 27).

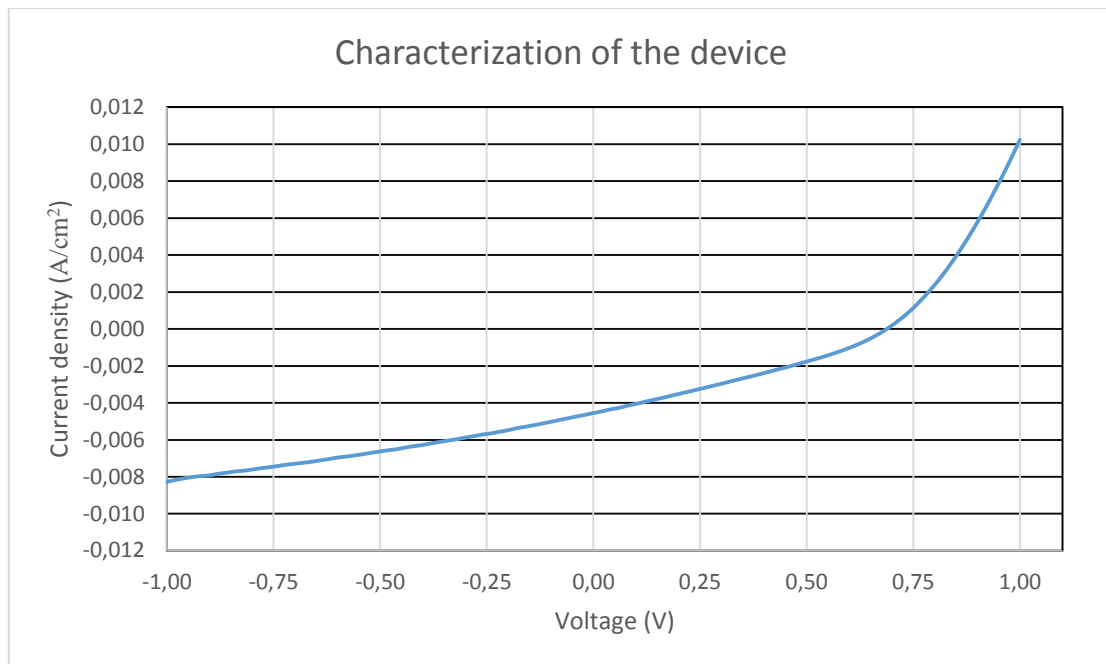


Figura 167 Características del dispositivo V-J bajo iluminación.

A partir de este gráfico se obtiene la  $J_{sc}=0045 \text{ A/cm}^2$ . La potencia también puede ser representada (Figura 28).

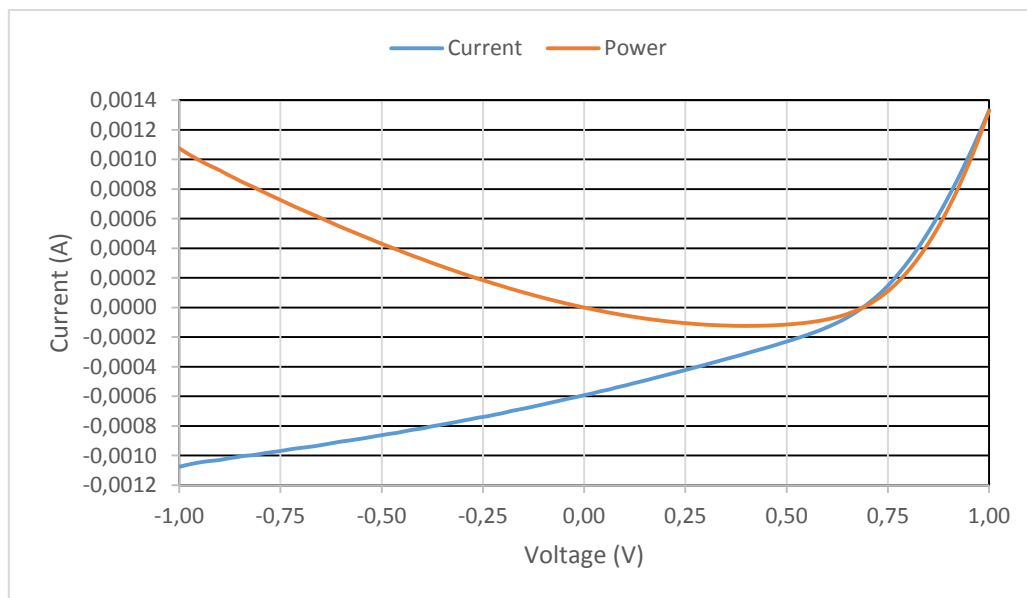


Figura 17 Potencia del dispositivo y características V-I bajo iluminación.

A partir de la figura 28 se puede obtener la potencia máxima  $P_{max} \approx 0.000124 \text{ VA}$ .

Con estos valores se puede calcular fácilmente el factor de llenado, FF, y la eficiencia de conversión de potencia, PCE.

$$FF = \frac{I_{max} \times V_{max}}{I_{sc} \times V_{oc}} = \frac{0.000124}{0.00058 \times 0.6875} = 0.311$$

Sabiendo que:

$$P_{out} = FF \times J_{sc} \times V_{oc} = 0.0045 \times 0.6875 \times 0.311 = 0.00096$$

entonces:

$$PCE(\%) = \frac{P_{out}}{P_{in}} \times 100 = \frac{FF \times J_{sc} \times V_{oc}}{P_{in}} \times 100 = \frac{0.096}{99.24 \times 10^{-3}} = 0.9695\%$$

Como se puede ver, el factor de relleno es bastante pequeño (un valor bueno sería uno próximo a 0,7) y también se puede apreciar que la eficiencia de conversión de potencia es pobre (menos del 1%).

De manera análoga, se calcularon las características de los otros dispositivos. Los resultados obtenidos se muestran en los siguientes gráficos (Figura 29, Figura 30, Figura 31, Figura 32 y Figura 33):

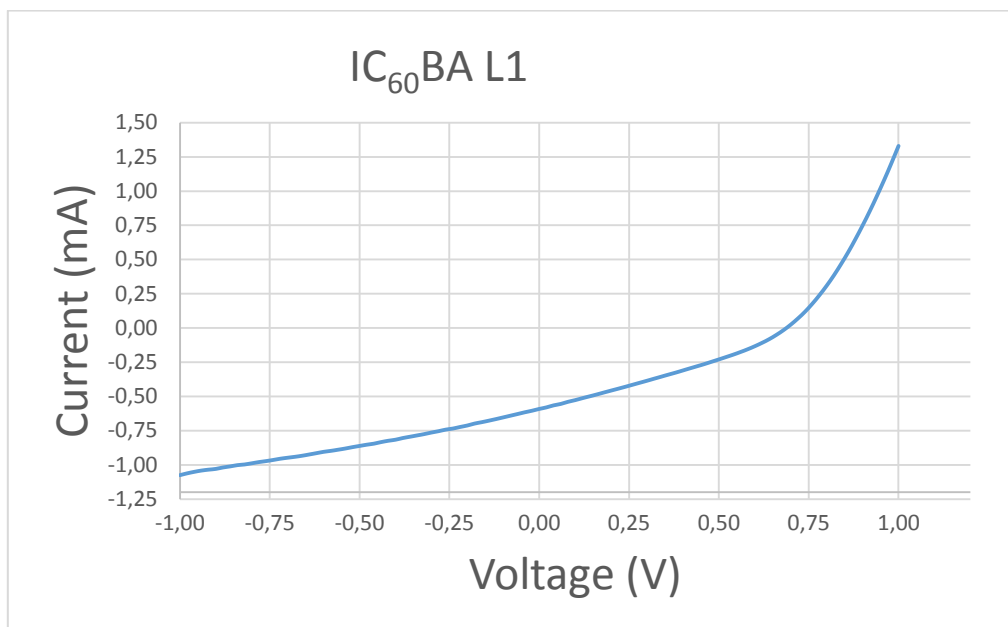


Figura 18 Características del dispositivo V-I L1.

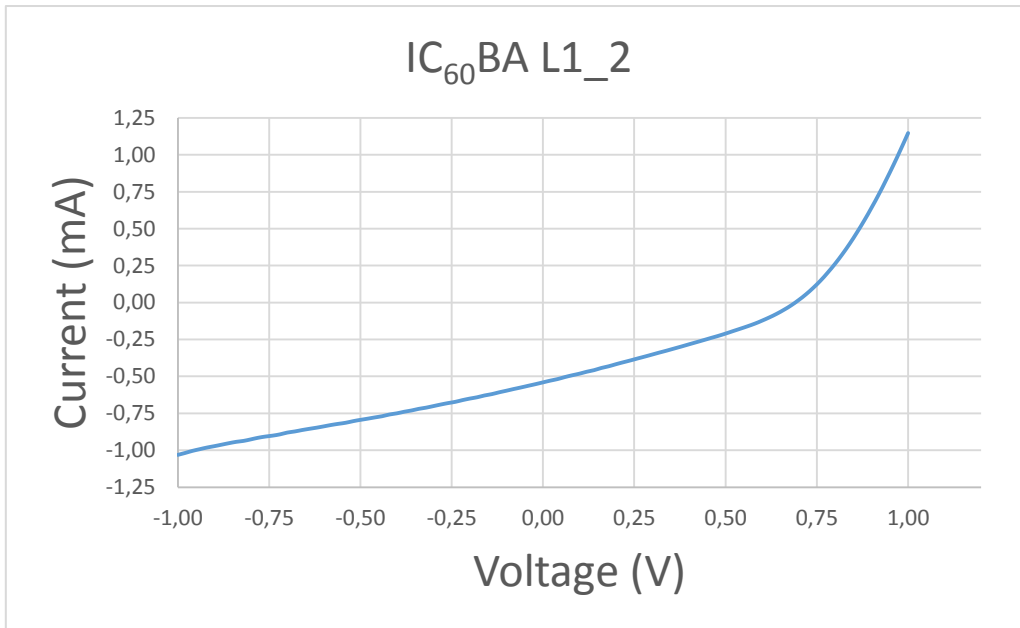


Figura 30 Características del dispositivo V-I L1\_2.

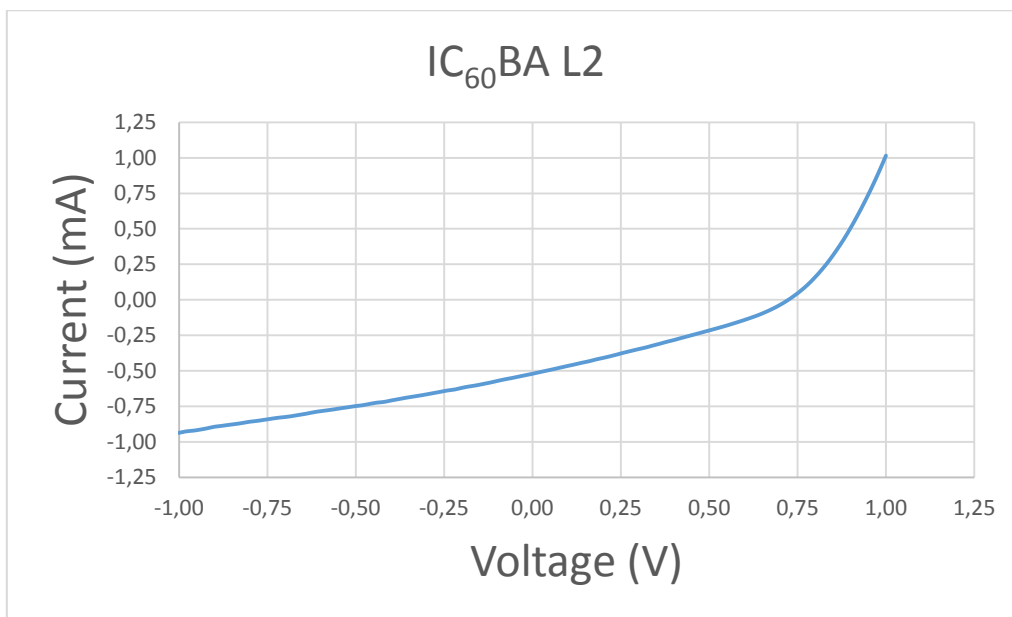


Figura 191 Características del dispositivo V-I L2.

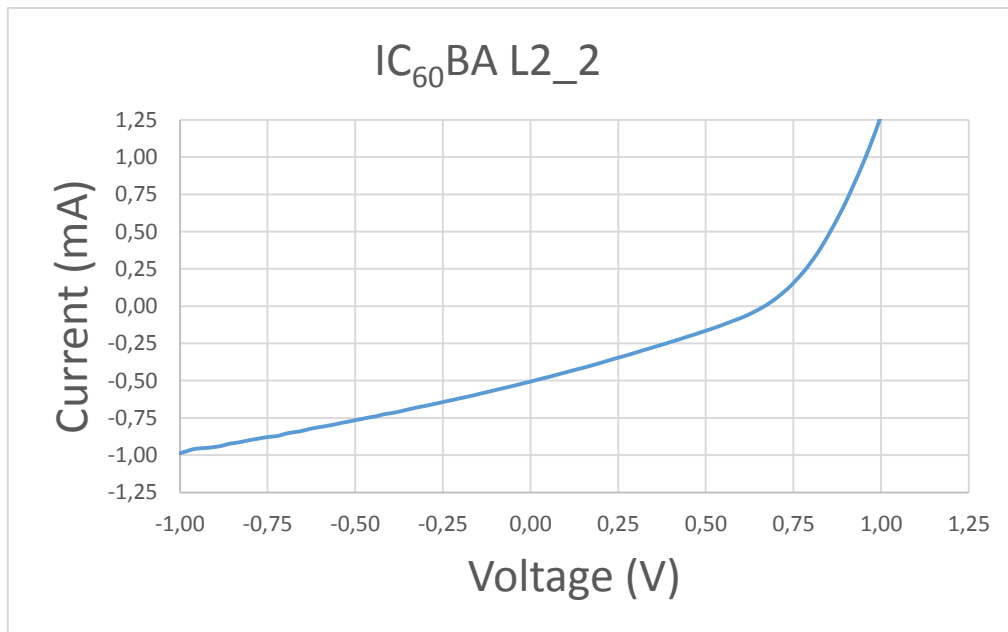


Figura 20 Características del dispositivo V-I L2\_2.

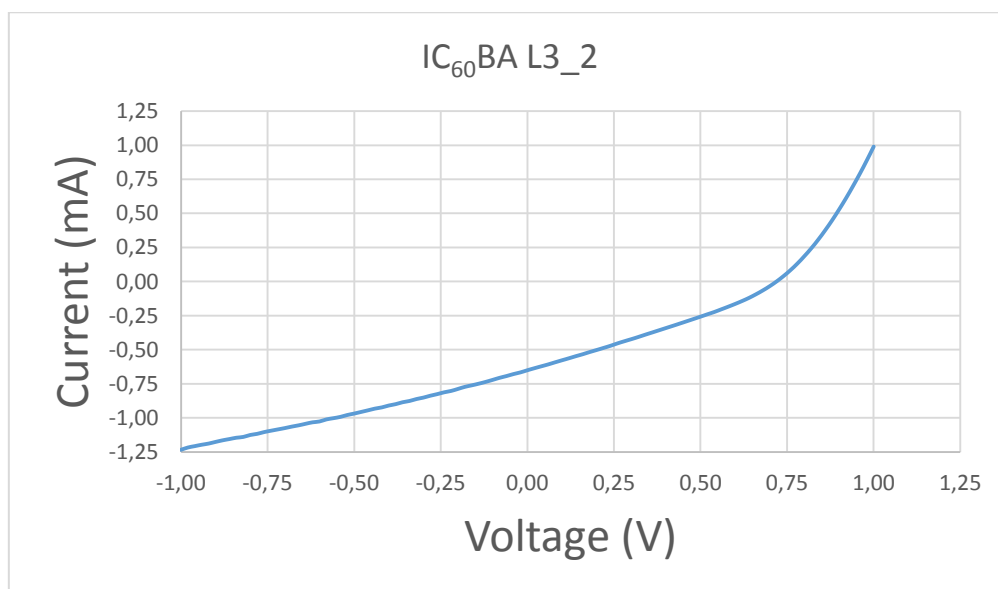


Figura 213 Características del dispositivo V-I L3\_2.

Como puede observarse en los diferentes gráficos, los datos obtenidos de las características de los distintos dispositivos son bastante similares.



Dado que el análisis es el mismo para todos los dispositivos, al igual que en el apartado anterior, estudiaremos únicamente un dispositivo que servirá como ejemplo del resto.

Inicialmente las características VI del dispositivo se midieron sin ninguna luz (Figura 34).

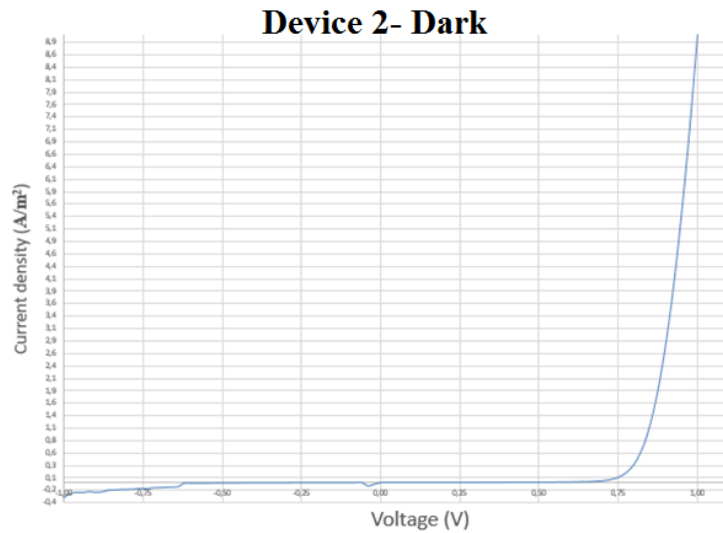


Figura 22 Características del dispositivo V-I cuando no hay luz.

A continuación, se utiliza el simulador solar y se obtienen los siguientes datos:

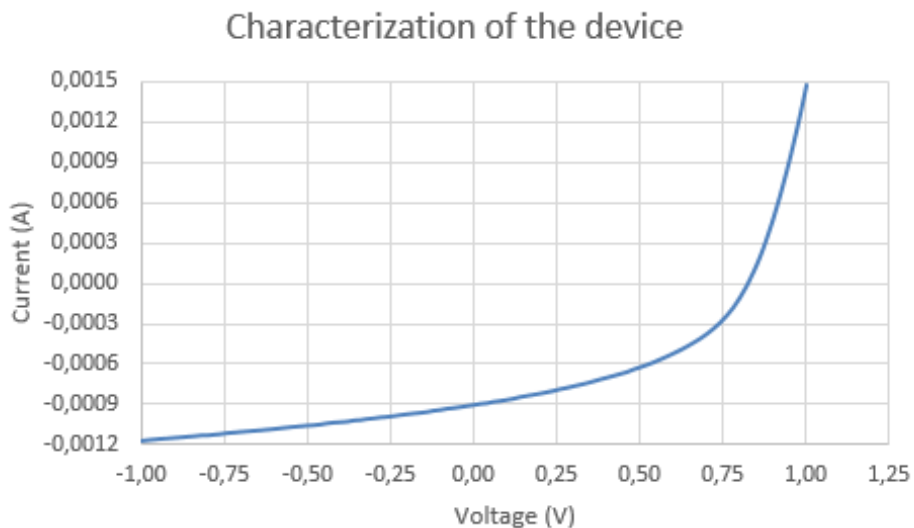


Figura 23 Características del dispositivo V-I bajo iluminación.

A partir de los datos anteriores (Figura 35) se pueden conseguir la corriente de cortocircuito y la tensión de circuito abierto:

$$V_{oc}=0.833 \text{ V}$$

$$I_{sc}=0.0009 \text{ A}$$

Sabiendo que el área del dispositivo es  $0.13 \text{ cm}^2$  también se pueden obtener las características de VJ (Figura 36).

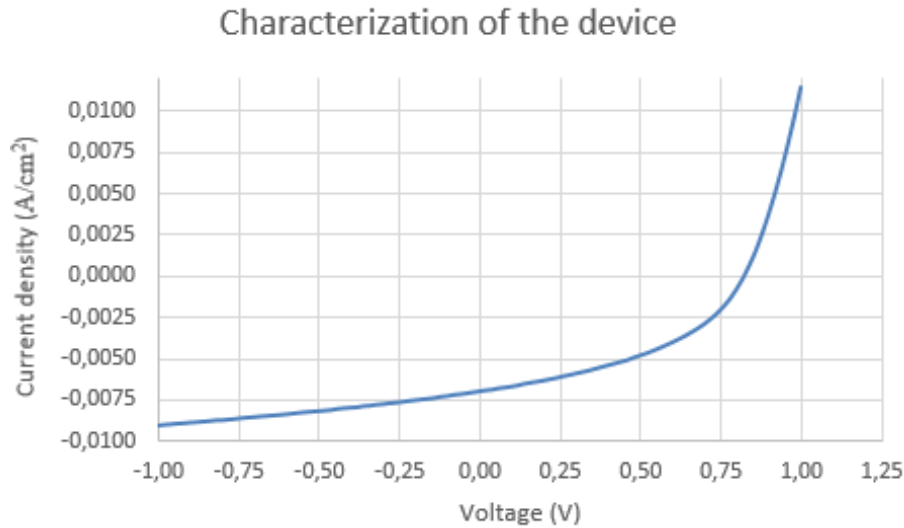


Figura 24 Características del dispositivo V-J bajo iluminación.

De esta gráfica se obtiene la  $J_{sc}=0.00688 \text{ A/cm}^2$ . La potencia también puede ser representada (Figura 37).

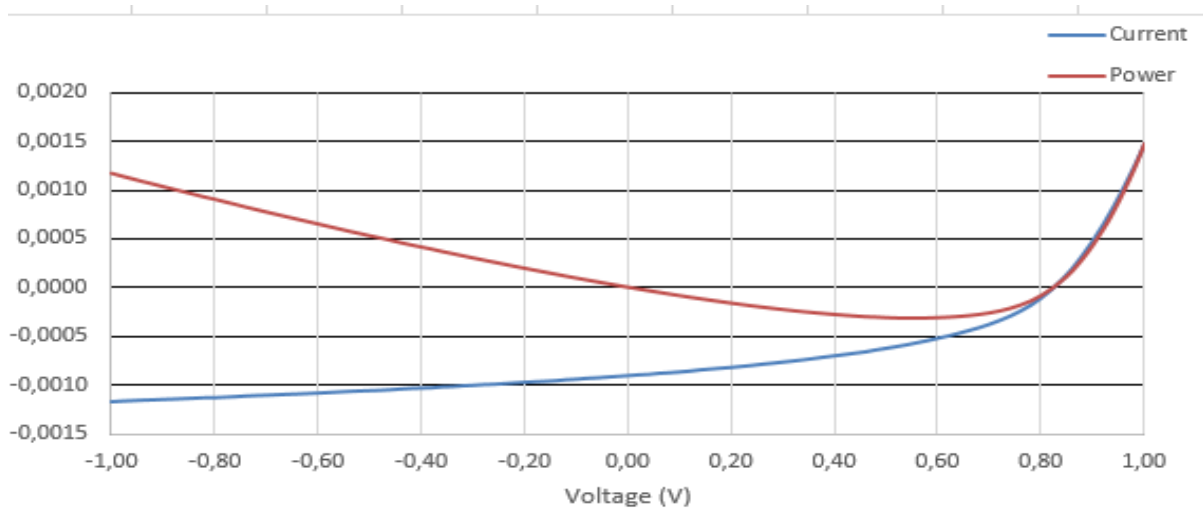


Figura 25 Potencia del dispositivo y características V-I bajo iluminación.

A partir de la figura 37 se puede calcular la potencia máxima  $P_{max} \approx 0.0003 \text{ VA}$ .

Con estos valores el factor de relleno y la eficiencia de conversión de potencia pueden calcularse fácilmente:

$$FF = \frac{I_{max} \times V_{max}}{I_{sc} \times V_{oc}} = \frac{0.0003}{0.0009 \times 0.833} = 0.4$$

Sabiendo que:

$$P_{out} = FF \times J_{sc} \times V_{oc} = 0.00688 \times 0.833 \times 0.4 = 0.00229$$

entonces:

$$PCE(\%) = \frac{P_{out}}{P_{in}} \times 100 = \frac{FF \times J_{sc} \times V_{oc}}{P_{in}} \times 100 = \frac{0.229}{100 \times 10^{-3}} = 2.29\%$$

Se observa que el PCE del dispositivo con PC<sub>70</sub>BM es más alto que el del IC<sub>60</sub>BA.

De manera análoga se pueden conseguir las características del resto de dispositivos. Los resultados obtenidos se muestran en los siguientes gráficos (Figura 26, Figura 27, Figura 28, Figura 29, Figura 30 y Figura 31):

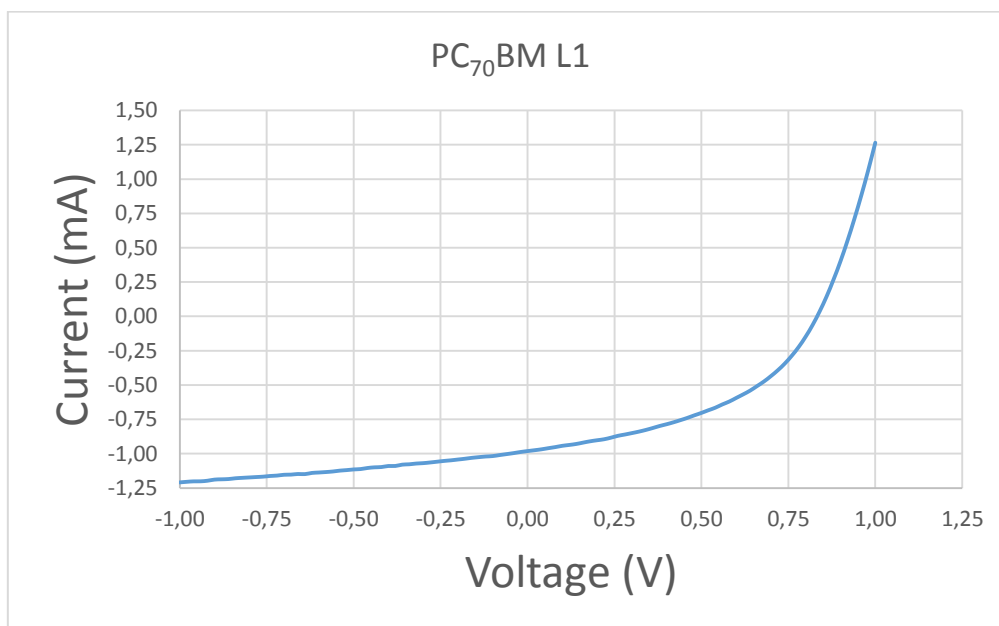


Figura 26 Características del dispositivo V-I L1

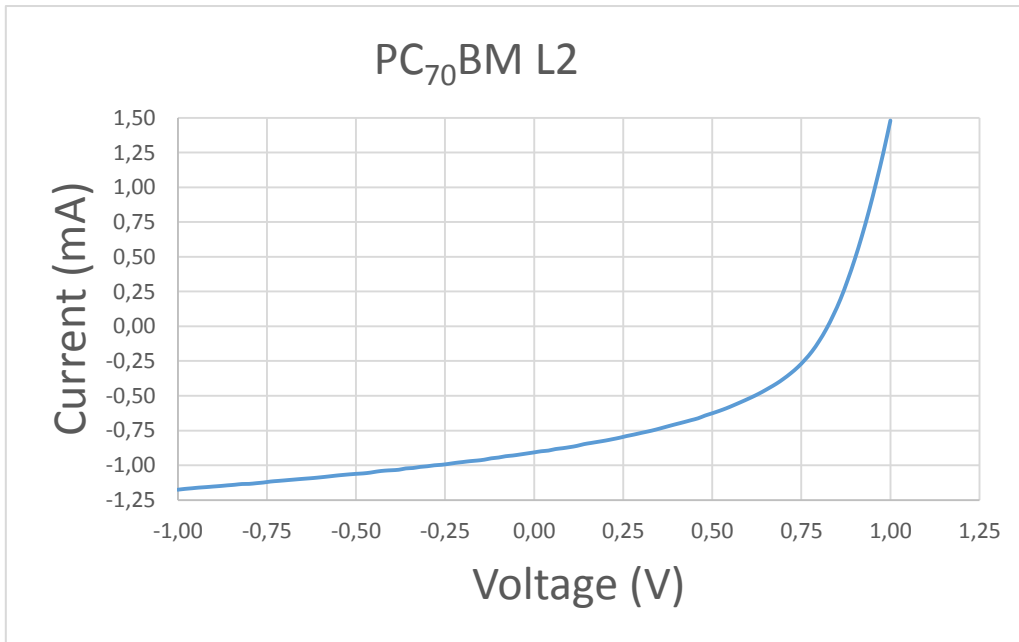


Figura 279 Características del dispositivo V-I L2.

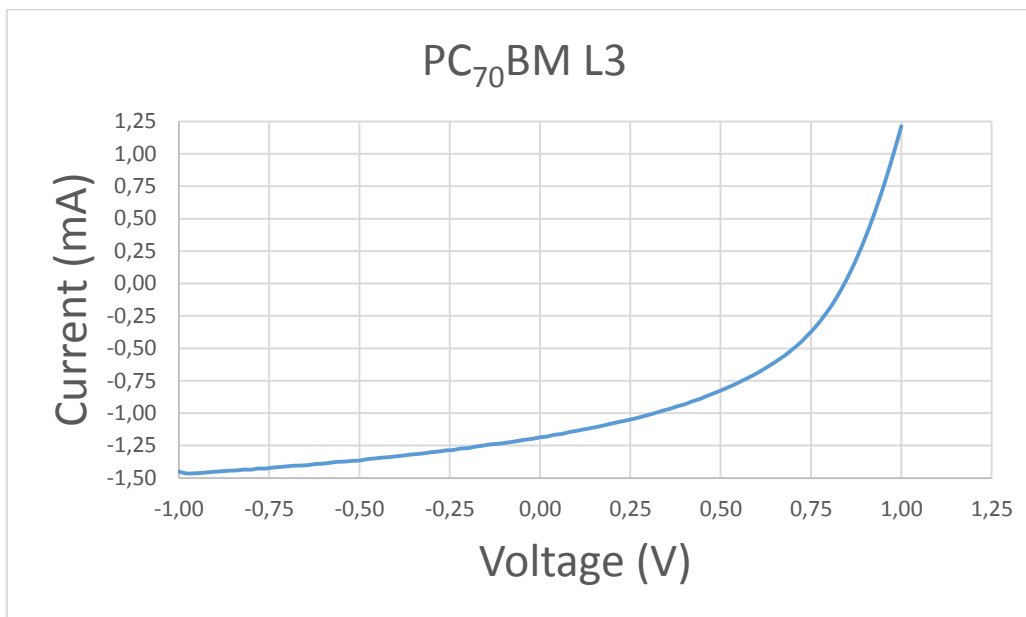


Figura 28 Características del dispositivo V-I L3.

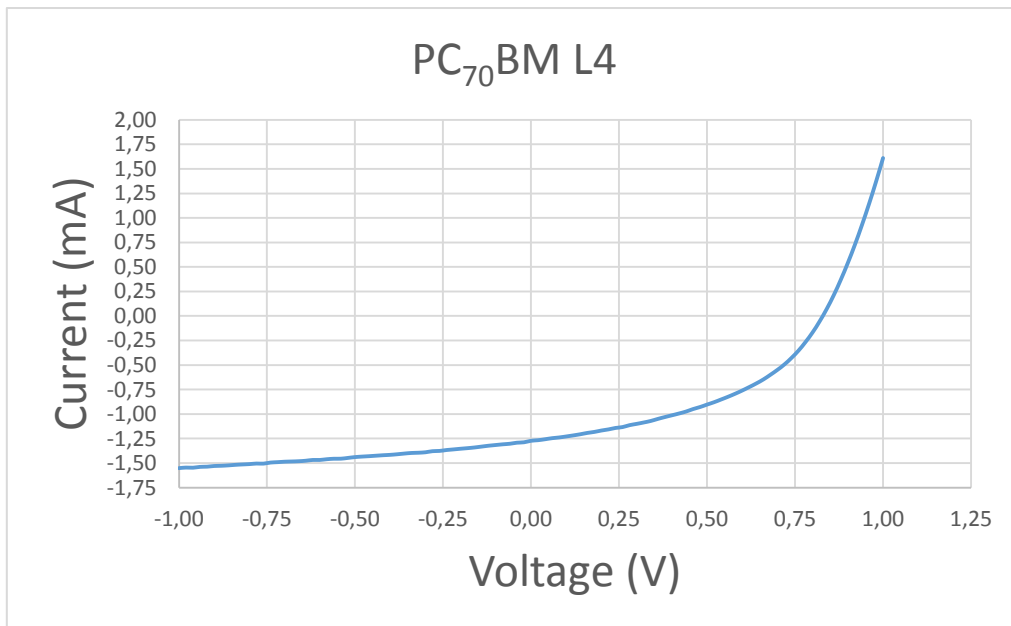


Figura 291 Características del dispositivo V-I L4.

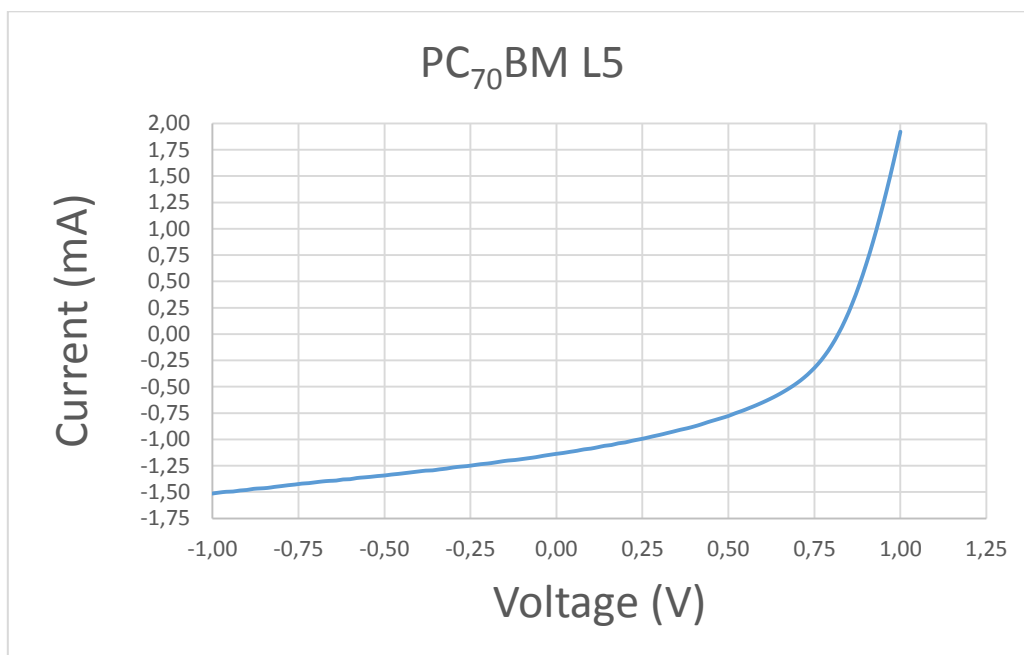
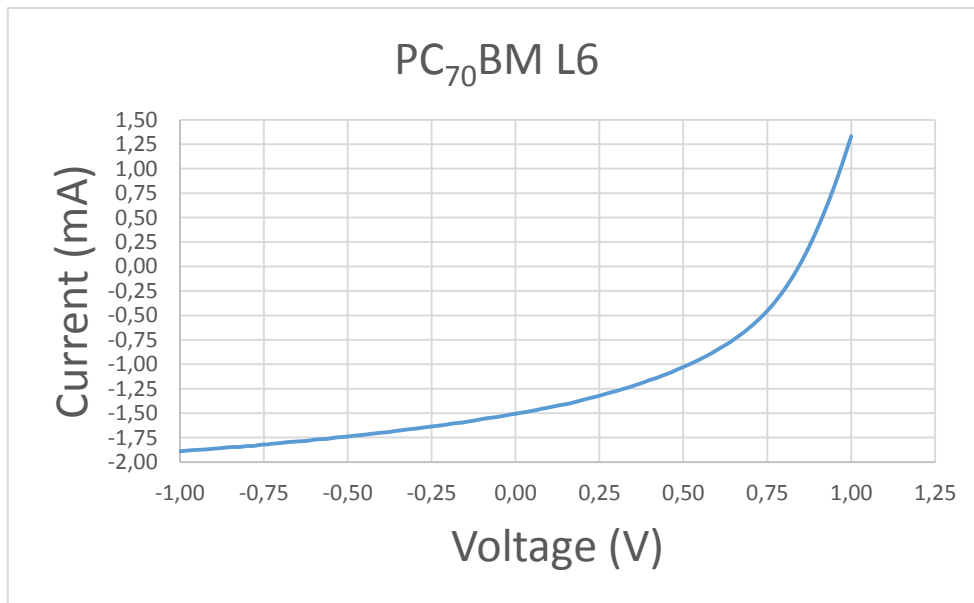


Figura 30 Características del dispositivo V-I L5.



*Figura 31 Características del dispositivo V-I L6.*

### 3.2 Medición de espectros de absorción óptica

La medida de los espectros de absorción óptica consiste en calibrar los espectros de absorción ultravioleta-visible y es una técnica útil para la caracterización de una célula solar y para obtener las propiedades electrónicas y ópticas. La técnica consiste en medir la luz absorbida de un rango de longitudes de onda ya que así se determinan las transiciones electrónicas sobre el material.

Según la ley de Beer:

$$A = \log I_0/I = -\log_{10} T$$

Donde A es la absorbancia y T representa la transmitancia.

El espectro de absorción de un material puede representarse trazando la absorbancia en función de diferentes longitudes de onda.

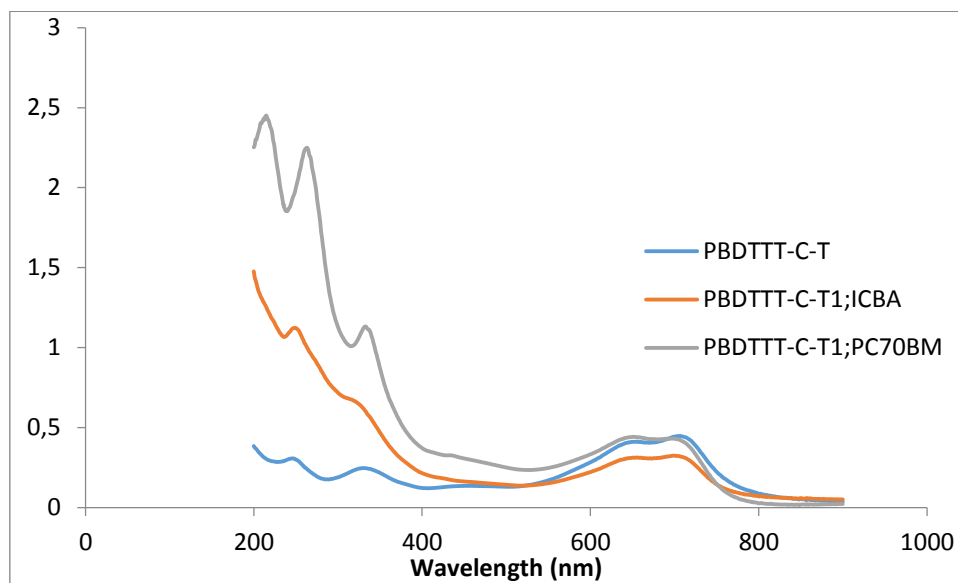


Figura 32 Espectro de absorción.

Como puede verse en la Figura 44, el nivel de absorción es bastante similar para longitudes de onda superiores a 400 nm. Sin embargo, si se considera un valor de la longitud de onda inferior a 400 nm se pueden constatar mayores diferencias entre los tres. Se observa que el PBDTTT-C-T tiene los valores más bajos mientras que se puede apreciar que el PBDTTT-C-T con IC<sub>60</sub>BA tiene valores intermedios y el PBDTTT-C-T con PC70BM tiene los valores más altos para  $200 \text{ nm} < \lambda < 500 \text{ nm}$ .

Estos datos para los diferentes componentes quedan representados en las figuras siguientes: 45, 46 y 47.

PBDTTT-C-T polymer

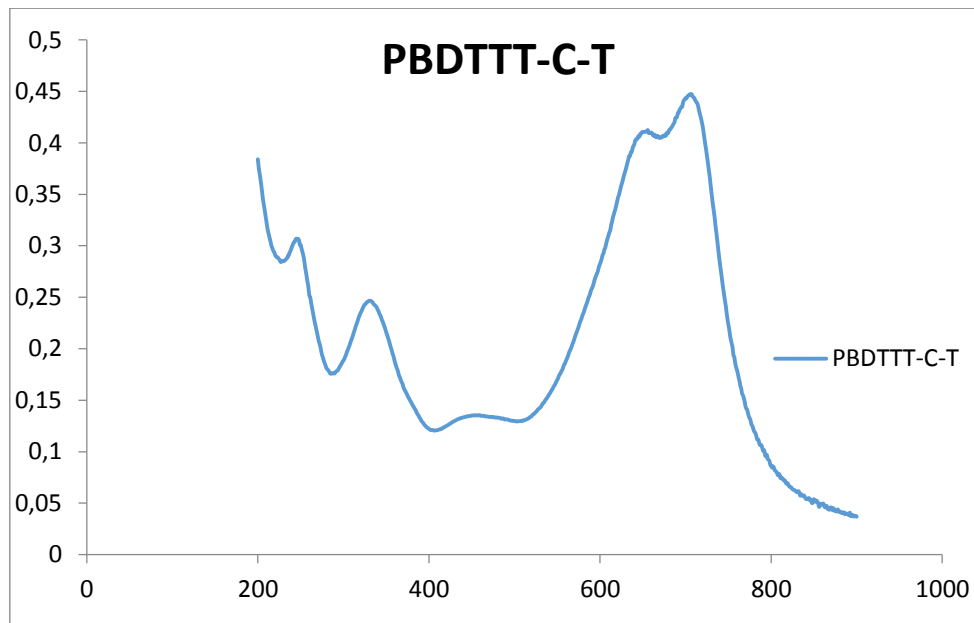


Figura 33 Espectro de absorción para PBDTTT-C-T.

Para  $\lambda = 200$  nm se puede observar un valor de 0,4 cuando sólo hay PBDTTT-C-T.

PBDTTT-C-T: PC<sub>70</sub>BM

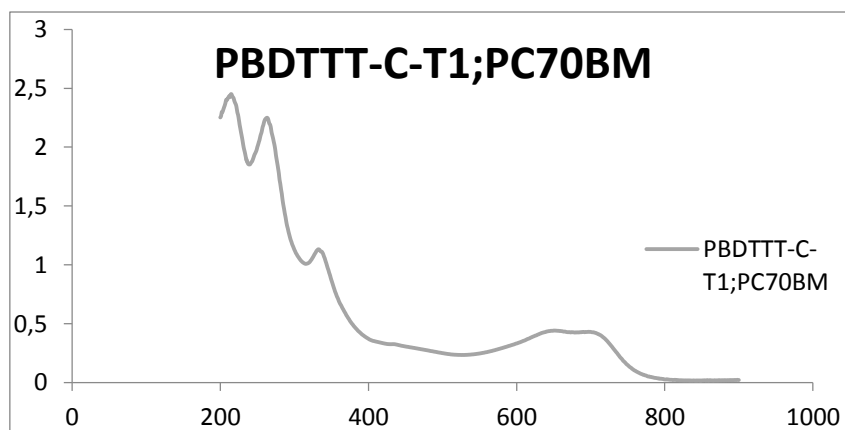
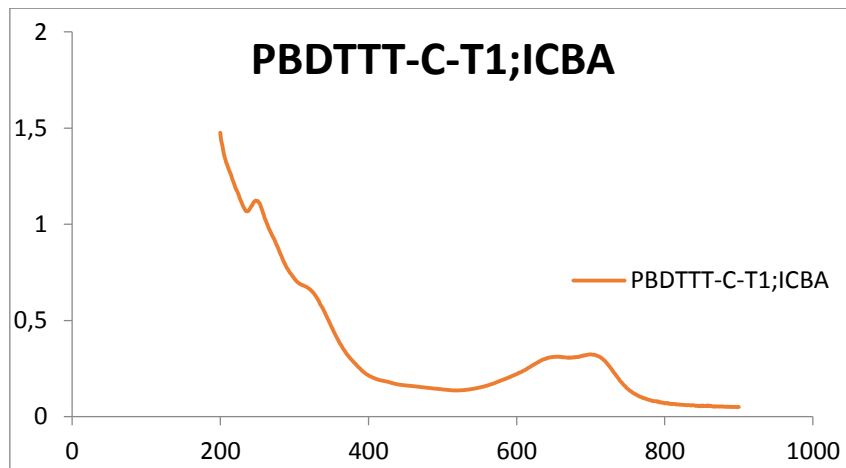


Figura 34 Espectro de absorción para PBDTTT-C-T con PC<sub>70</sub>BM.

Para  $\lambda = 200$  nm se puede observar un valor de 2,2 cuando hay PBDTTT-C-T con PC<sub>70</sub>BM.



PBDTTT-C-T: IC<sub>60</sub>BA



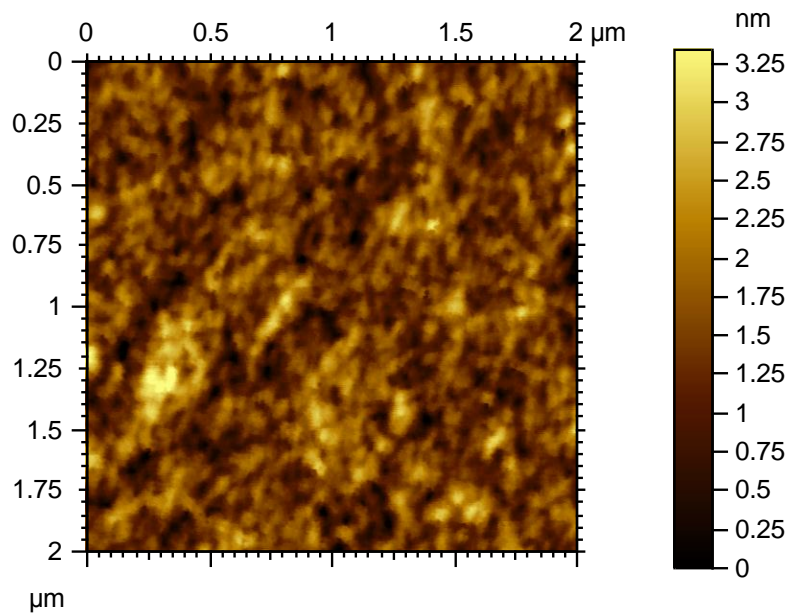
*Figura 35 Espectro de absorción para PBDTTT-C-T con IC<sub>60</sub>BA.*

Para  $\lambda=200$  nm se puede observar un valor de 1,5 cuando hay PBDTTT-C-T con IC<sub>60</sub>BA.

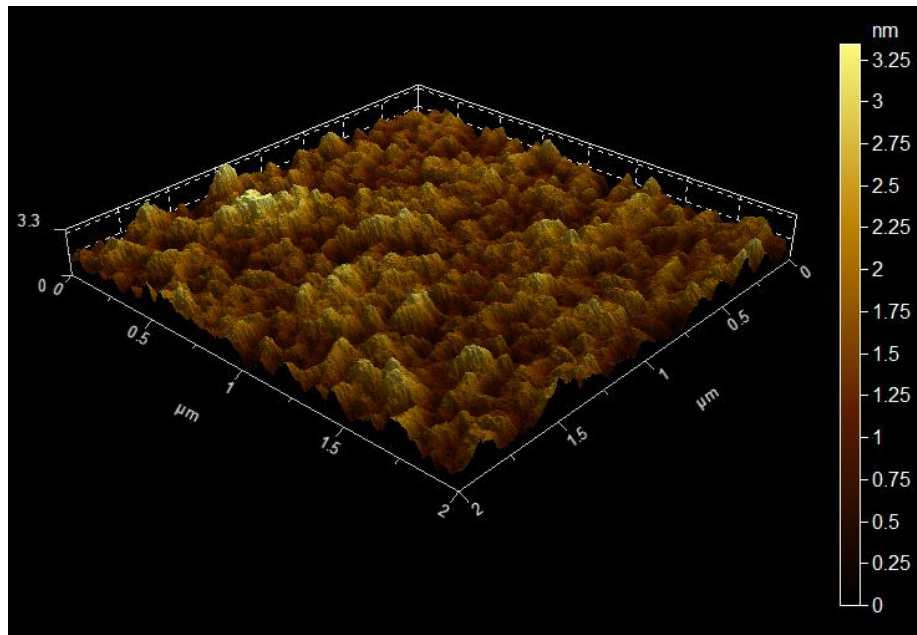
### *3.3 Morfología superficial (AFM)*

Se utiliza una microscopía de sonda de exploración (Figura 20) para investigar las propiedades de las morfologías superficiales de las capas activas que forman interfaces con el cátodo. Esto es importante, ya que las interfaces entre el cátodo y la capa afectan a las propiedades de la célula solar. Con la microscopía de fuerza atómica (AFM), se puede observar la composición de la superficie, así como su topografía. El AFM está formado por una punta unida a un voladizo y tiene tres modos operativos que son: modo sin contacto, contacto (donde la punta del voladizo está cerca de la superficie de la muestra) y toma (donde el voladizo oscila a una cierta frecuencia). Este último es el método más usado para células solares orgánicas.

Pristine PBDTTT-C-T polymer



*Figura 36 Imagen de la topografía PBDTTT-C-T.*



*Figura 379 Mapeo 3D de la topografía 2x2 μm del PBDTTT-C-T.*

De la Figura 36 y Figura 37 se obtiene la rugosidad media  $R_s=0.506$  nm.

PBDTTT-C-T: PC<sub>70</sub>BM

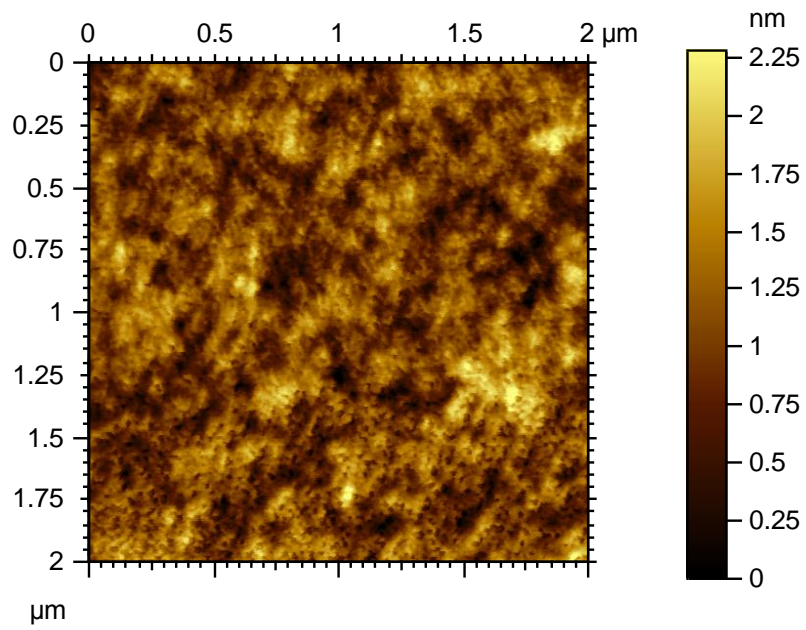


Figura 50 Imagen de la topografía PBDTTT-C-T con PC<sub>70</sub>BM.

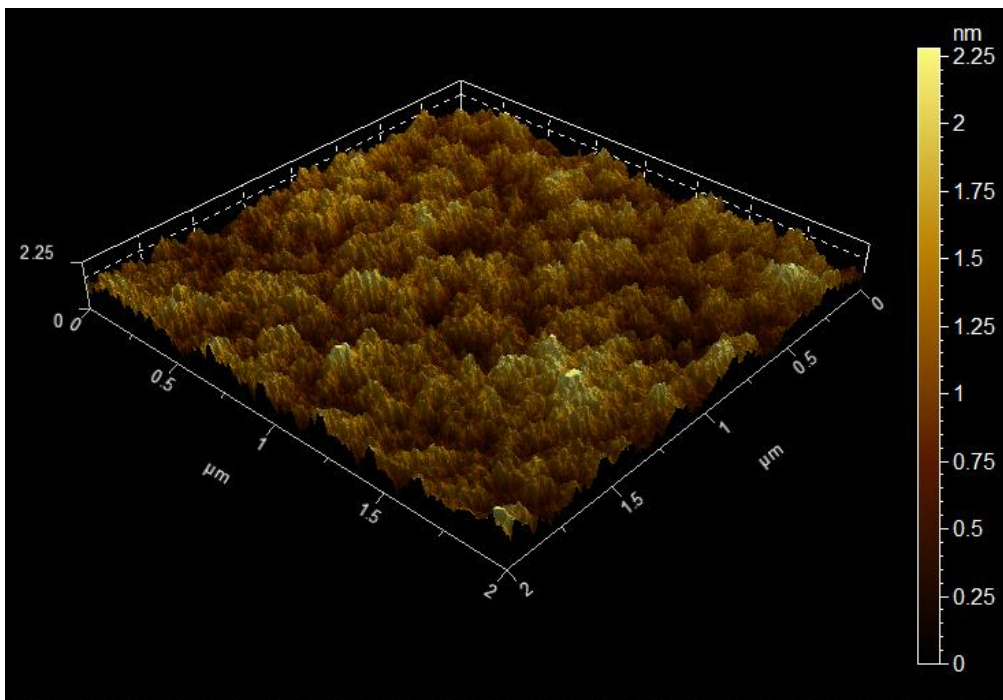


Figura 38 Mapeo 3D de la topografía 2x2 μm de PBDTTT-C-T con PC<sub>70</sub>BM.

De la Figura 36 y Figura 37 se obtiene la rugosidad media  $R_s=0.371$  nm.

PBDTTT-C-T: IC<sub>60</sub>BA

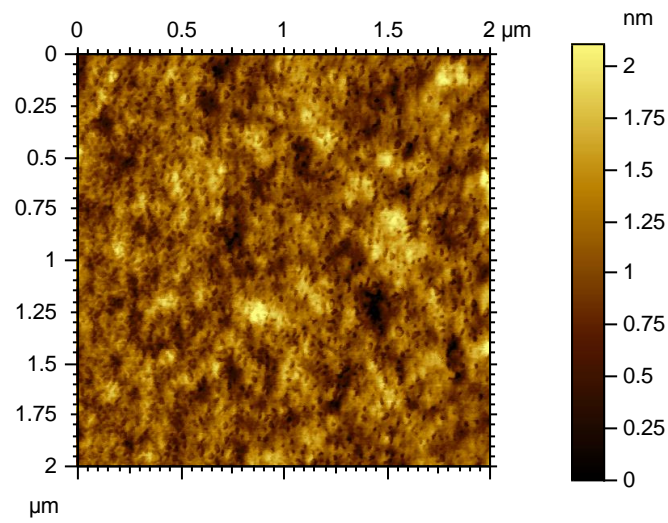


Figura 39 Imagen de la topografía PBDTTT-C-T con IC<sub>60</sub>BA.

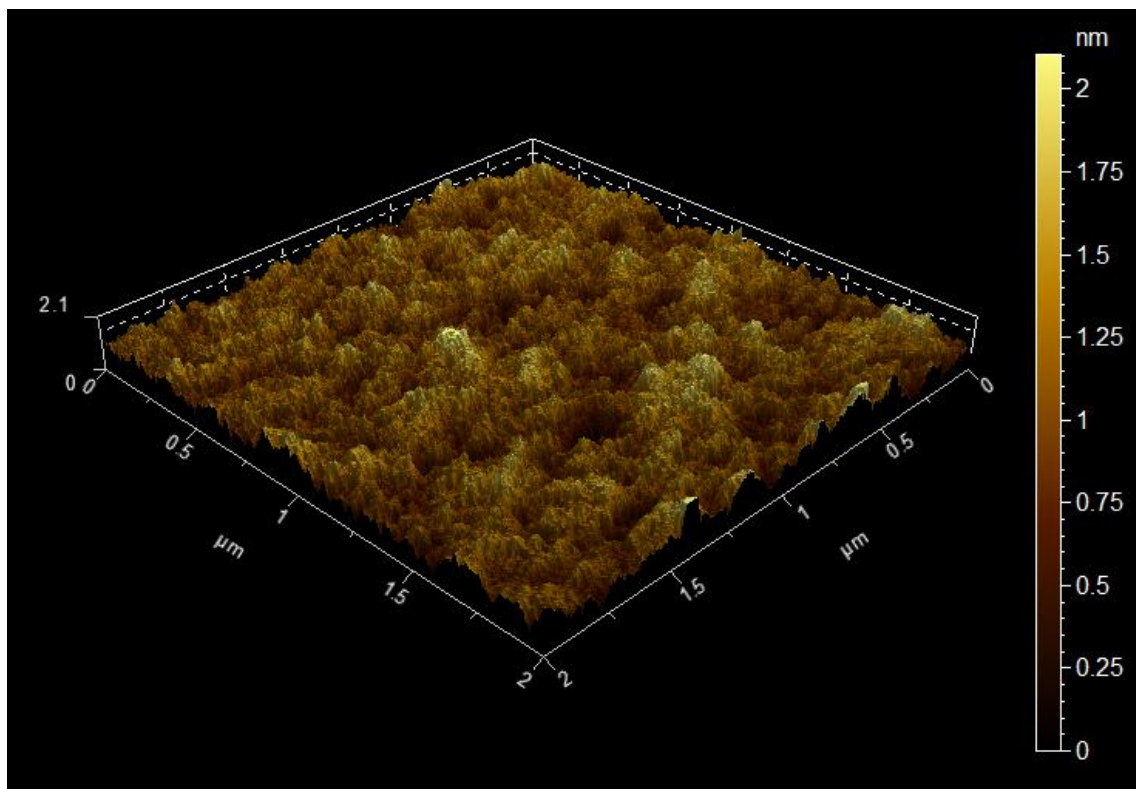


Figura 40 Mapeo 3D de la topografía 2x2 μm de PBDTTT-C-T con IC<sub>60</sub>BA.

De la Figura 36 y Figura 37 se obtiene la rugosidad media  $R_s=0.317$  nm.

### 3.4 Medición del espesor

El grosor de la célula solar orgánica es un parámetro importante. El espesor de las muestras de película se puede medir utilizando un perfilador de superficie de estilete Dektak XT (Figura 21). Las puntas de la aguja se ponen en contacto con la superficie de la película y se mueven a través de la misma mientras se recoge una traza y se obtiene un perfil de escalón (Figura 54). Este es un método muy destructivo pues la película puede ser dañada después de que el espesor se haya medido. Esta es la razón por la cual este tipo de medición es el último realizado.

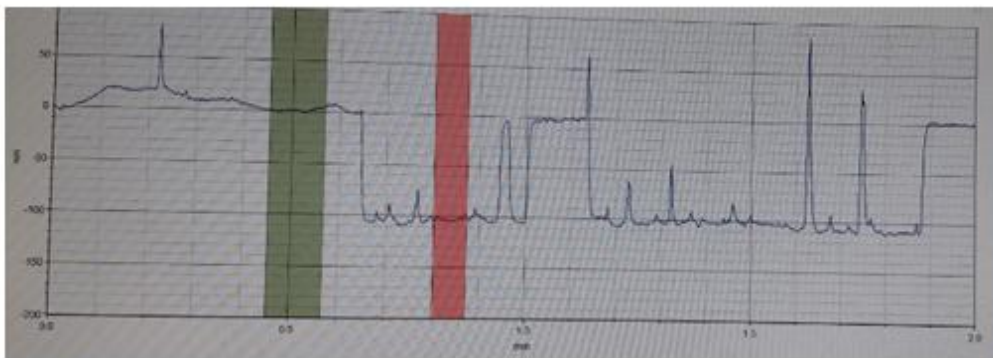


Figura 41 Perfil de altura de paso medido de una película.

### 3.5 Difracción de rayos X

Para caracterizar la microestructura en películas finas y los detalles de la estructura cristalográfica, se utiliza la difracción de rayos X de incidencia “Grazing”. Esta técnica tiene la ventaja de ser capaz de obtener una visión de la orientación, así como de la estructura de las moléculas en los compuestos de película fina (Figura 55). Es una técnica muy importante ya que el rendimiento de los materiales electrónicos orgánicos está estrictamente asociado a su configuración molecular y a su delgada morfología

Los picos representan los lugares donde muchas moléculas están orientadas con la misma configuración.

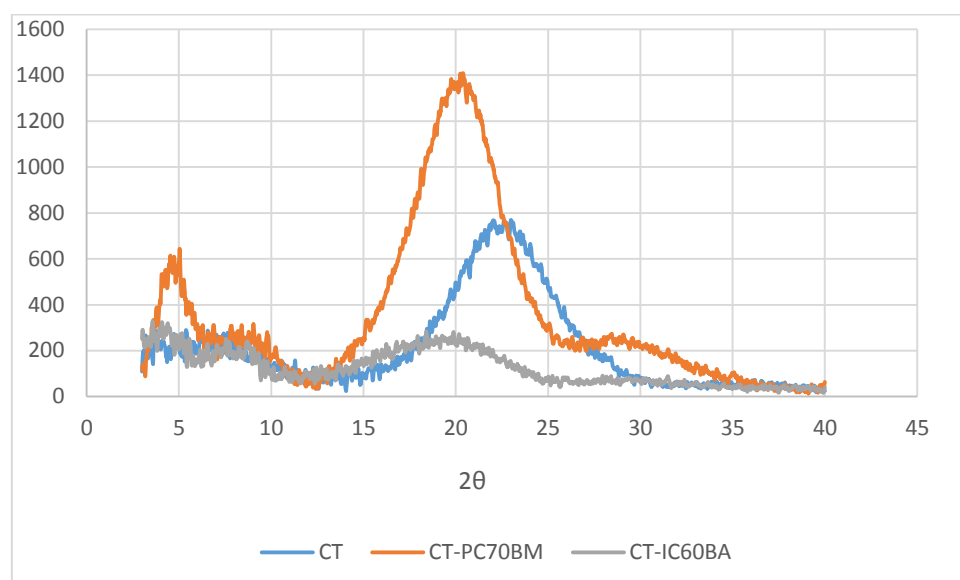


Figura 42 Patrón de difracción de rayos X de CT, CT-PC70BM y CT-IC60BA.



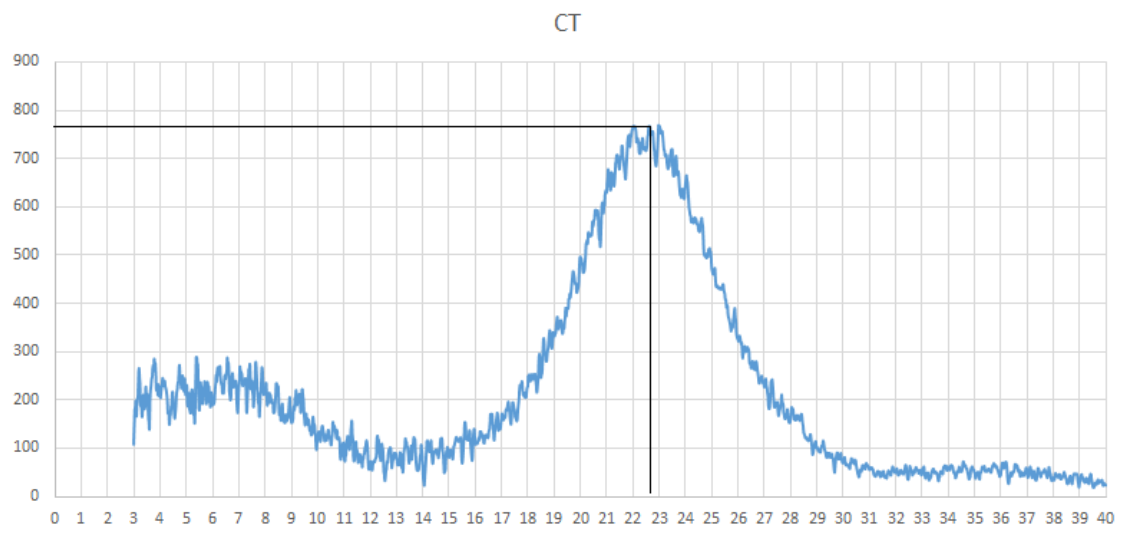


Figura 43 Patrón de difracción de rayos X de PBDTTT-C-T.

En el caso de CT sin PC<sub>70</sub>BM y sin IC<sub>60</sub>BA (Figura 43), se observa que el valor máximo se alcanza en  $2\theta=22.8^\circ$  y este valor máximo es alrededor de 770.

Por lo tanto, el espacio entre planos puede obtenerse fácilmente aplicando la ley de Bragg. Tomando la longitud de onda de la radiografía,  $\lambda$ , como  $0.1542 \text{ nm}=1.542 \text{ \AA}$  y el valor de  $n=1$ , entonces:

$$n \times \lambda = 2 \times d \times \sin\theta \rightarrow d = \frac{n \times \lambda}{2 \times \sin\theta} = \frac{1 \times 0.1542}{2 \times \sin 11.4} = 0.39 \text{ nm} \\ = 3.9 \text{ \AA}$$

Además, el tamaño de cristalita también puede obtenerse aplicando la relación de Scherer.

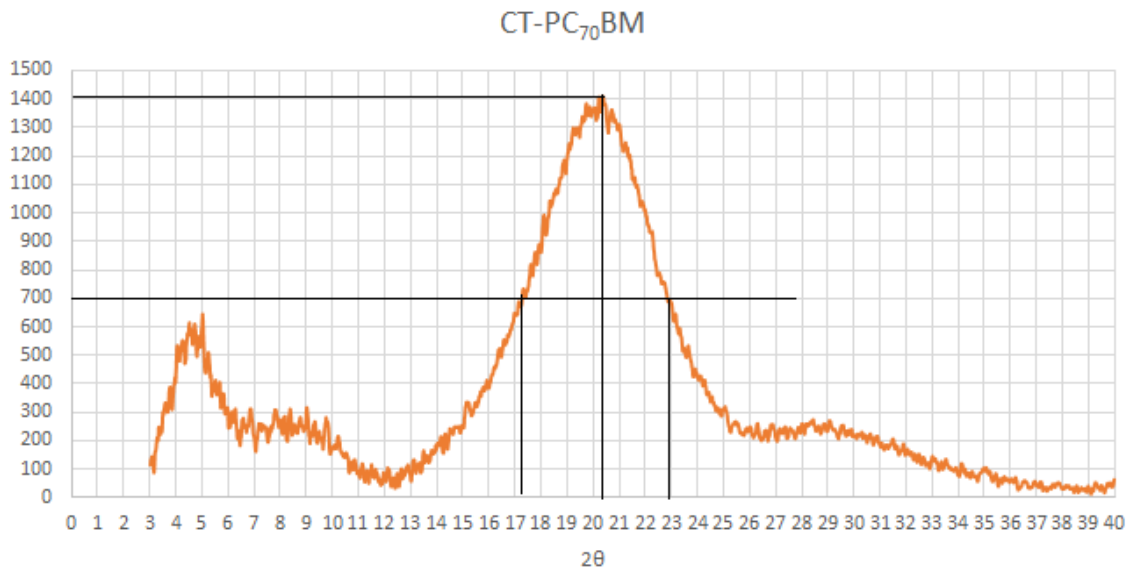
$$L \sim \frac{k \times \lambda}{\Delta_{2\theta} \times \cos\theta}$$

Suponiendo que  $k=0.9$ ,  $\lambda=0.1542 \text{ nm}$  y considerando el resto de los valores del gráfico tenemos:

$$\Delta_{2\theta} = 25.5^\circ - 19.5^\circ = 6^\circ = 0.105 \text{ rad}$$

$$L \sim \frac{0.9 \times 0.1542}{0.105 \times \cos 11.4} = 1.348 \text{ nm}$$





*Figura 44 Patrón de difracción de rayos X de CT-PC70BM.*

En el caso de CT-PC<sub>70</sub>BM (Figura 44), se observa que el valor máximo se alcanza en  $2\theta=20.2^\circ$  y este valor máximo es alrededor de 1400.

Aplicando la ley de Bragg y tomando la longitud de onda de la radiografía,  $\lambda$ , como  $0.1542 \text{ nm}=1.542 \text{ \AA}$  y el valor de  $n=1$ , el espacio entre planos es:

$$n \times \lambda = 2 \times d \times \sin\theta \rightarrow d = \frac{n \times \lambda}{2 \times \sin\theta} = \frac{1 \times 0.1542}{2 \times \sin 10.1} = 0.44 \text{ nm}$$

$$= 4.4 \text{ \AA}$$

Y el tamaño de cristalita:

$$L \sim \frac{k \times \lambda}{\Delta_{2\theta} \times \cos\theta}$$

Suponiendo nuevamente, que  $k=0.9$ ,  $\lambda=0.1542 \text{ nm}$  y considerando el resto de los valores del gráfico entonces:

$$\Delta_{2\theta} = 23^\circ - 17.1^\circ = 5.9^\circ = 0.103 \text{ rad}$$

$$L \sim \frac{0.9 \times 0.1542}{0.103 \times \cos 10.1} = 1.369 \text{ nm}$$

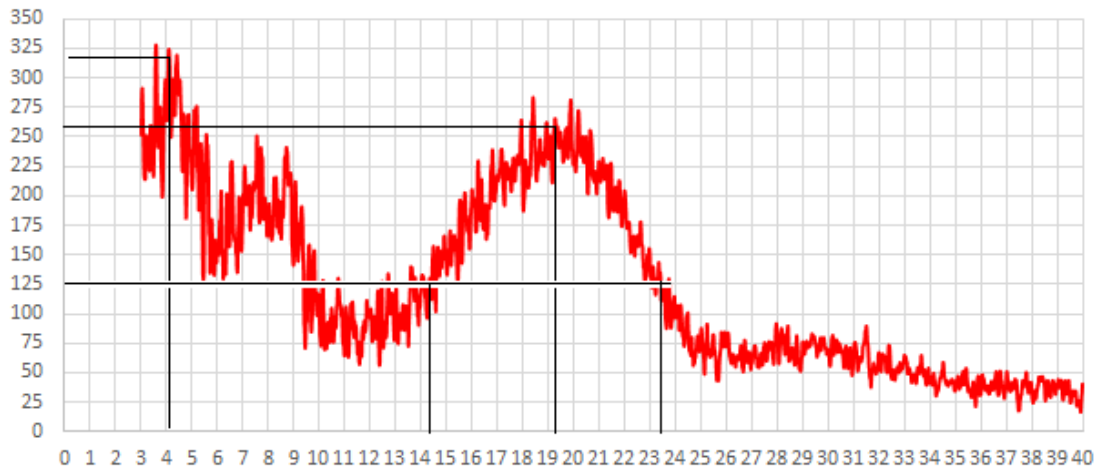
CT-IC<sub>60</sub>BA

Figura 45 Patrón de difracción de rayos X de CT-IC<sub>60</sub>BA.

En el caso de CT-IC<sub>60</sub>BA (Figura 45), se observa que el valor máximo se alcanza en  $2\theta=19.2^\circ$  y este valor máximo es próximo a 255.

Nuevamente, en virtud de la ley de Bragg y con la longitud de onda de la radiografía,  $\lambda$ , como  $0.1542 \text{ nm}=1.542 \text{ \AA}$  y el valor de  $n=1$ , entonces:

$$n \times \lambda = 2 \times d \times \sin\theta \rightarrow d = \frac{n \times \lambda}{2 \times \sin\theta} = \frac{1 \times 0.1542}{2 \times \sin 9.6} = 0.4623 \text{ nm} \\ = 4.623 \text{ \AA}$$

Se obtiene, aplicando la relación de Scherer, el tamaño de cristalita:

$$L \sim \frac{k \times \lambda}{\Delta_{2\theta} \times \cos\theta}$$

Y para  $k=0.9$ ,  $\lambda=0.1542 \text{ nm}$  y considerando el resto de los valores del gráfico se tiene:

$$\Delta_{2\theta} = 23.2^\circ - 14.2^\circ = 9^\circ = 0.157 \text{ rad}$$

$$L \sim \frac{0.9 \times 0.1542}{0.157 \times \cos 9.6} = 0.897 \text{ nm}$$

## 3.6 Espectroscopia Raman y fotoluminiscencia

### 3.6.1 Espectroscopia Raman

Técnica que se basa en la medición del desplazamiento en la frecuencia de la luz dispersada después de su incidencia sobre la película fina.

Una fracción de la luz dispersa está en una frecuencia diferente que la de la luz incidente. La diferencia entre estas frecuencias (luz dispersa y luz incidente) se conoce como cambio de Raman.

Inicialmente, el haz láser se calibra en una caja vacía. La CT se excita con un rayo láser de 514 nm y se produce una vibración en las moléculas. El “grating name” se selecciona inicialmente para que sea de 2400 lúmenes/mm y la potencia del láser se fija en 0,05%. El tiempo de exposición se fija en 1s. Con estos valores se obtiene el cambio de Raman.

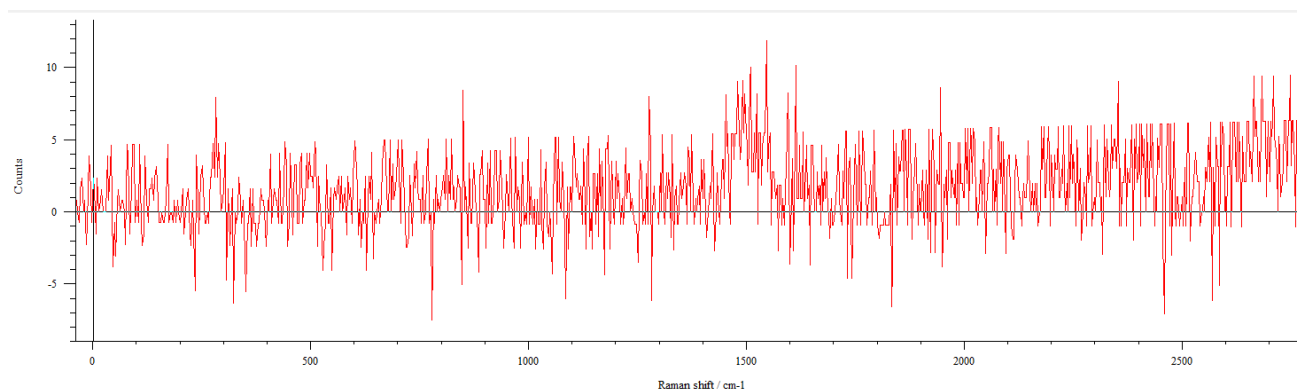


Figura 46 Cambio de Raman con 1200 l/mm y 0.05% de potencia.

A continuación, la potencia del láser se incrementa a 0,1% y el tiempo de exposición se incrementa a 10 s (Figura 60).

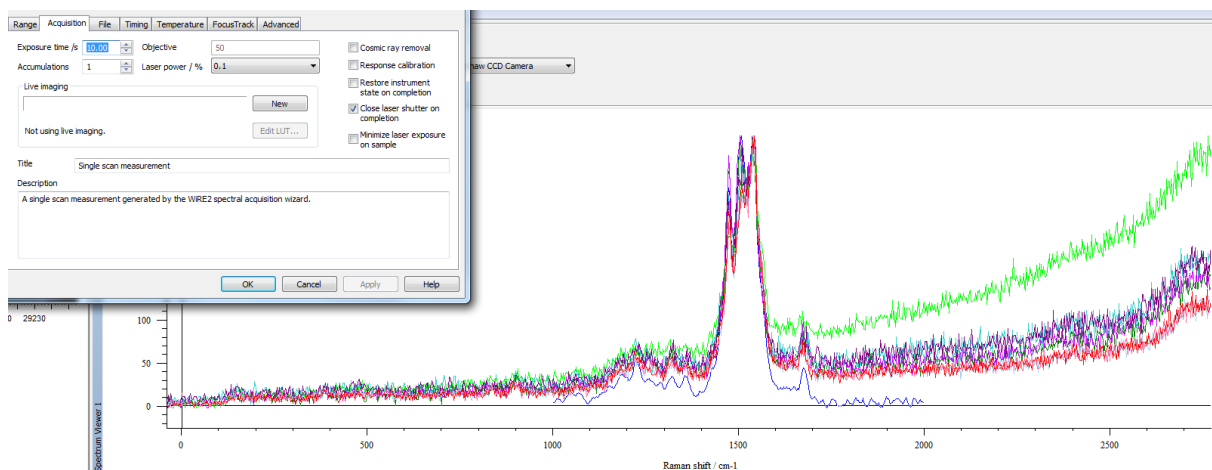
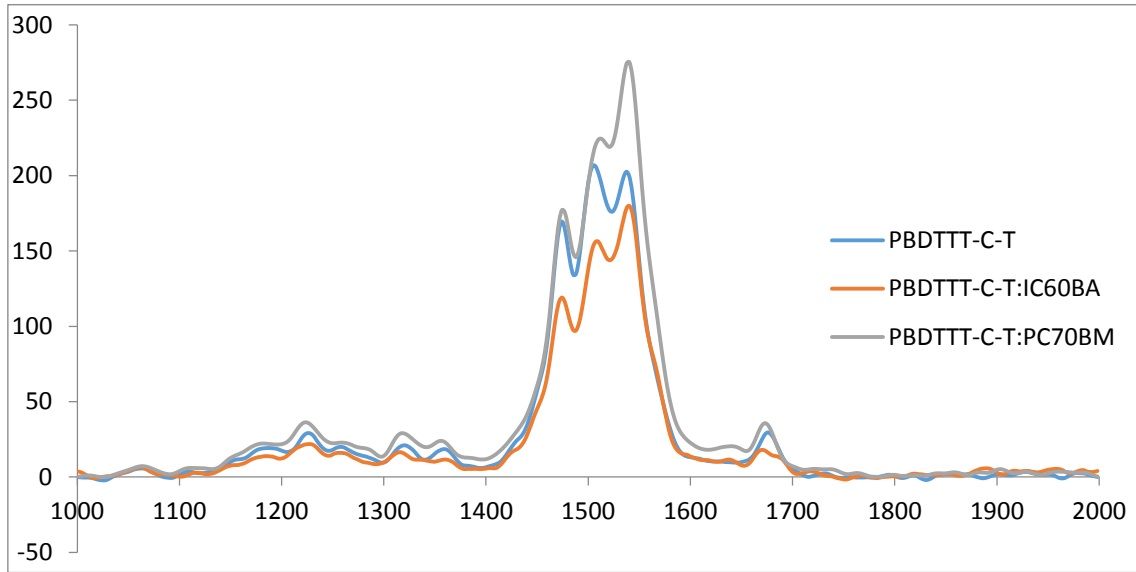


Figura 60 Cambio de Raman con tiempo de 10s y 0.1% de potencia.

Se representa el cambio de Raman para PBDTTT-C-T, PBDTTT-C-T: IC<sub>60</sub>BA y PBDTTT-C-T: PC<sub>70</sub>BM en la Figura 47.



*Figura 47 Cambio de Raman para CT, CT con PC70BM y CT con IC60BA.*

### 3.6.2 Espectroscopia de fotoluminiscencia

La fotoluminiscencia es un método usualmente utilizado para complementar la medición de espectros UV-Vis y Raman. Se utiliza para comparar los recuentos de emisiones y es indicativo de la transferencia de carga del polímero hacia la molécula pequeña. Además, este método puede utilizarse para evaluar la eficacia con la que los materiales compuestos en películas finas están entremezclados.

En la Figura 48 se representan los datos obtenidos.

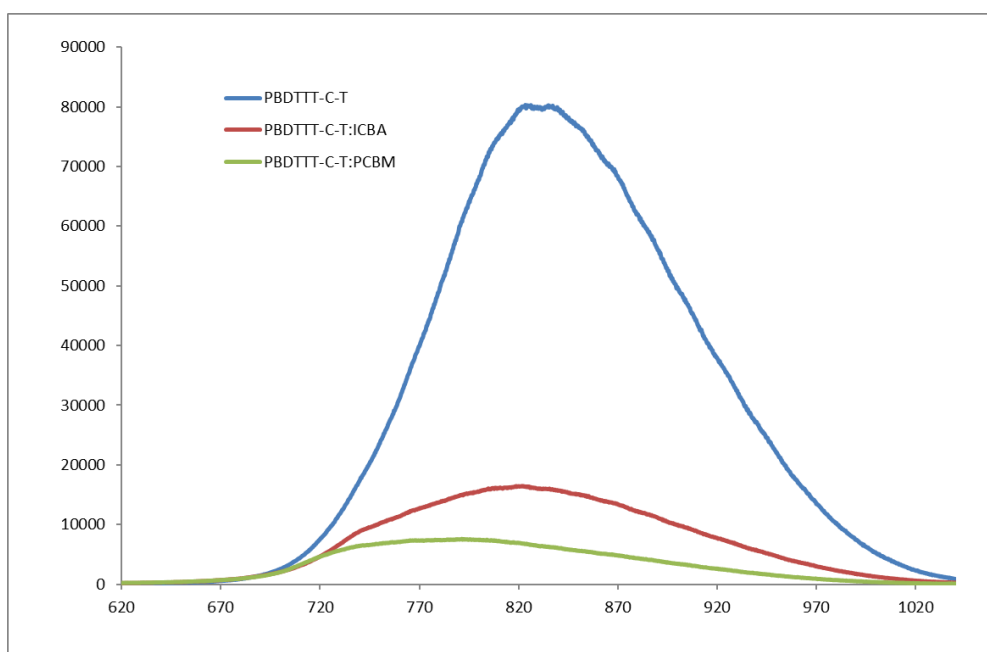


Figura 48 PL espectros de PBDTTT-C-T, PBDTTT-C-T: IC<sub>60</sub>BA y PBDTTT-C-T: PC<sub>70</sub>BM.

Como se puede observar en la Figura 62 en el caso de la CT hay una gran cantidad de recombinación y por lo tanto casi ninguna eficiencia. En el caso de IC<sub>60</sub>BA la eficiencia es mayor que en CT pero inferior a la que se presenta en PC<sub>70</sub>BM. Sin embargo en PC<sub>70</sub>BM aparece una gran cantidad de disociación.

## 4 Conclusión y discusión

En este trabajo se estudiaron las diferentes características durante el periodo de fabricación de una célula solar orgánica y su eficiencia y caracterización. Sin embargo, no se discutió la estabilidad. Estabilidad y degradación orgánica son propiedades muy importantes de la célula solar pero que se manifiestan a muy largo plazo y, estas son las razones por las que no fueron objetivo de este estudio. Además, durante el proceso de fabricación del dispositivo, se utilizó vidrio, mientras que, en operaciones reales, el plástico puede ser más adecuado debido a su flexibilidad (Universidad Técnica de Dinamarca (DTU)). No obstante, hay que tener presente que con el vidrio se obtiene mayor eficiencia, razón por la cual ha sido el elemento elegido en este trabajo.

Se observa que el PCE del dispositivo con mezcla de PBDTTT-C-T: PC<sub>70</sub>BM es más alto que el del IC<sub>60</sub>BA.

De acuerdo con el test AFM, la mezcla de PBDTTT-C-T: PC<sub>70</sub>BM tiene menos rugosidad que la PBDTTT-C-T: IC<sub>60</sub>BA.

Del experimento de absorción óptica, podemos deducir que la mezcla de PBDTTT-C-T: PC<sub>70</sub>BM tiene una absorción más alta que la PBDTTT-C-T: IC<sub>60</sub>BA.

La mezcla de PBDTTT-C-T: PC<sub>70</sub>BM tiene más PL eficiente y menos recombinante que la PBDTTT-C-T: IC<sub>60</sub>BA.

En resumen, si se consideran los resultados reseñados anteriormente, se observa que PBDTTT-C-T: PC<sub>70</sub>BM es un material de mezcla mejor que PBDTTT-C-T: IC<sub>60</sub>BA.

Las morfologías mesoscópicas están estrictamente asociadas a la miscibilidad del polímero-fullereno y al comportamiento de construcción del polímero (Han Yan, 2013).

## 5 Bibliografía

Han Yan, Denghua Li, Chang He, Zhixiang Wei, Yanlian Yang and Yongfang Li, 2013. *A material combination principle for highly efficient polymer solar cells investigated by mesoscopic phase heterogeneity*. RSC Publishing.

J. G. Sánchez, J. Ferré-Borrull, L. F. Marsal, J. Pallarès, V. S. Balderrama and M. Estrada, "Performance comparison of BHJ organic solar cells based on P3HT with PC70BM and ICBA," *2015 IEEE International Autumn Meeting on Power, Electronics and Computing (ROPEC)*, Ixtapa, 2015, pp. 1-4.

Z. Xiao, Q. Dong, Q. Wang, W. Tian, H. Huang and J. Huang, "Efficiency Enhancement in Polymer Solar Cells With a Polar Small Molecule Both at Interface and in the Bulk Heterojunction Layer," in *IEEE Journal of Photovoltaics*, vol. 5, no. 5, pp. 1408-1413, Sept. 2015.

Utzat, Hendrik; Dimitroy, Stoichko D , 2017, "Charge-Separation in Intermixed Polymer:PC70BM Photovoltaic Blends: Correlating Structural and Photophysical Length Scales as a Function of Blend Composition," *2017 JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY C*, vol 121, no. 18, pp.9790-9801, May 2017

Technical University of Denmark (DTU).

wikipedia foundation, s.f. *Wikipedia*. Available at: [http://en.m.wikipedia.org/wiki/Organic\\_solar\\_cell#Single\\_layer](http://en.m.wikipedia.org/wiki/Organic_solar_cell#Single_layer)

Thin films technology laboratory (class notes).







Fabrication and Characterisation of an  
Organic Solar Cell  
(Summary)

By

José Otero Ruiz

MSc Electrical Engineering

Faculty of Computing, Engineering & Technology

Staffordshire University, Stoke-on-Trent

2017



## Abstract

The purpose of this assignment is to briefly describe the fabrication and testing of power conversion efficiency of the solar cell fabricated device. the electrical properties are going to be obtained and the photovoltaic parameters are going to be evaluated.

The fabrication of the solar cell is carried out under ambient conditions.

In addition, different mechanical methods for measuring the thickness of the films and the absorption spectra properties of materials used for organic solar cell applications will be evaluated (thickness measurement, optical absorption spectra, AFM, X-ray diffraction, Raman and photoluminescence measurements)

# Index

<b>Abstract</b> .....	50
<b>Index</b> .....	51
<b>List of figures</b> .....	53
<b>Introduction</b> .....	55
<b>2 Experimental</b> .....	56
<i>2.1 Materials required</i> .....	56
<i>2.2 Procedure for fabricating a device</i> .....	59
<b>3 Characterization of the device</b> .....	63
<i>3.1 I-V Characteristics</i> .....	65
PBDTTT-C-T: IC <sub>60</sub> BA.....	65
PBDTTT-C-T: PC <sub>70</sub> BM .....	71
<i>3.2 Optical absorption spectra measurement</i> .....	77
PBDTTT-C-T polymer .....	78
PBDTTT-C-T: PC <sub>70</sub> BM .....	78
PBDTTT-C-T: IC <sub>60</sub> BA.....	79
<i>3.3 Surface morphology (AFM)</i> .....	80
Pristine PBDTTT-C-T polymer .....	81
PBDTTT-C-T: PC <sub>70</sub> BM .....	82
PBDTTT-C-T: IC <sub>60</sub> BA.....	83
<i>3.4 Thickness measurement</i> .....	84
<i>3.5 X ray diffraction</i> .....	85
PBDTTT-C-T polymer .....	86
PBDTTT-C-T: PC <sub>70</sub> BM .....	87
PBDTTT-C-T: IC <sub>60</sub> BA .....	88
<i>3.6 Raman spectroscopy and photoluminescence</i> .....	89
3.6.1 Raman spectroscopy .....	89
3.6.2 Photoluminescence spectroscopy.....	91
<b>4 Conclusion and Discussion</b> .....	92
<b>5 References</b> .....	93



## List of figures

Figure 1 Pre-patterned ITO coated glass substrate.....	56
Figure 2 PEDOT: PSSS. ....	56
Figure 3 Ultrasonic cleaning tank. ....	57
Figure 4 Aluminium wire.....	57
Figure 5 Spin coater. ....	57
Figure 6 Auto 500 vacuum deposition system. ....	58
Figure 7 Liquid nitrogen. ....	58
Figure 8 Ultrasonic cleaning tank used to clean the glass substrate.....	59
Figure 9 Drop of the PEDOT: PSS in the whole section of the substrate. ....	60
Figure 10 Heating plate for drying the PEDOT. PSS.....	60
Figure 11 Use of a cotton bud to clear the active layer off. ....	60
Figure 12 Aluminium wire hang on the filament in the deposition chamber.....	61
Figure 13 Shadow mask where the active layer is placed. ....	61
Figure 14 Monitor for controlling the film thickness.....	61
Figure 15 Deposition chamber during the deposition process. ....	62
Figure 16 Organic solar cell.....	62
Figure 17 Solar simulator.....	63
Figure 18 Keithley 2400 source meter. ....	63
Figure 19 Varian Cary 50 absorption spectrometer. ....	64
Figure 20 Scanning probe multimode microscope Agilent 5500 AFM. ....	64
Figure 21 Dektak XT surface profiler.....	64
Figure 22 D8 advance with DAVINCI with LYNXEYE detector.....	65
Figure 23 RENISHAW inViA Raman Microscope. ....	65
Figure 24 Example of a damaged device. ....	65
Figure 25 Device V-I characteristics when there is not any light. ....	66
Figure 26 Device V-I characteristics under illumination. ....	66
Figure 27 Device V-J characteristics under illumination.....	67
Figure 28 Device power and V-I characteristics under illumination. ....	68
Figure 29 Device V-I characteristics L1. ....	68
Figure 30 Device V-I characteristics L1_2. ....	69
Figure 31 Device V-I characteristics L2. ....	69
Figure 32 Device V-I characteristics L2_2. ....	70
Figure 33 Device V-I characteristics L3_2.....	70
Figure 34 Device V-I characteristics when there is not any light. ....	71
Figure 35 Device V-I characteristics under illumination. ....	71
Figure 36 Device V-J characteristics under illumination. ....	72
Figure 37 Device power and V-I characteristics under illumination. ....	72
Figure 38 Device V-I characteristics L1.....	73
Figure 39 Device V-I characteristics L2. ....	74
Figure 40 Device V-I characteristics L3. ....	74
Figure 41 Device V-I characteristics L4. ....	75
Figure 42 Device V-I characteristics L5. ....	75
Figure 43 Device V-I characteristics L6. ....	76
Figure 44 Absorption spectra. ....	77
Figure 45 Absorption spectra for PBDTTT-C-T.....	78

Figure 46 Absorption spectra for PBDTTT-C-T with PC <sub>70</sub> BM.....	78
Figure 47 Absorption spectra for PBDTTT-C-T with IC <sub>60</sub> BA. ....	79
Figure 48 Topography image PBDTTT-C-T. ....	81
Figure 49 3D mapping of the topography 2x2 um of PBDTTT-C-T. ....	81
Figure 50 Topography image PBDTTT-C-T with PC <sub>70</sub> BM.....	82
Figure 51 3D mapping of the topography 2x2 um of PBDTTT-C-T with PC <sub>70</sub> BM. ....	82
Figure 52 Topography image PBDTTT-C-T with IC <sub>60</sub> BA. ....	83
Figure 53 3D mapping of the topography 2x2 um of PBDTTT-C-T with IC <sub>60</sub> BA.....	83
Figure 54 Measured step height profile of a film. ....	84
Figure 55 X-ray diffraction pattern of CT, CT-PC70BM and CT-IC60BA.....	85
Figure 56 X ray diffraction pattern of PBDTTT-C-T. ....	86
Figure 57 X ray diffraction pattern of CT-PC70BM.....	87
Figure 58 X ray diffraction pattern of CT-IC60BA. ....	88
Figure 59 Raman shift with 1200 l/mm and 0.05% of power. ....	89
Figure 60 Raman shift with time of 10 and 0.1% of power. ....	89
Figure 61 Raman shift for CT, CT with PC70BM and CT with IC60BA.....	90
Figure 62 PL spectra of PBDTTT-C-T, PBDTTT-C-T: IC <sub>60</sub> BA and PBDTTT-C-T: PC <sub>70</sub> BM..	91

## Introduction

The simplest form of the organic solar cell is the single layer which are made by placing an organic electronic material between two metallic conductors. The light hits the material and creates excitons. Single layer devices have poor quantum efficiency and low power conversion efficiencies since the machines are quite thin. If the machine was not thin, then the electrons would recombine with the holes (wikipedia foundation).

Bilayer organic solar cells are formed by two layers placed between the electrodes. They have more efficiency than the single layer organic solar cell. However, the thickness of the solar cells is usually close to 100nm to absorb enough light. Bilayer organic solar cells have only a small fraction of the excitons can reach the interface if thicknesses closer to 100nm are considered (wikipedia foundation).

Blended organic solar cells have an absorption layer formed by a blend of acceptor and donor materials. They depend on the acceptor material as well as the proportion used. In our experiment IC<sub>60</sub>BA and PC<sub>70</sub>BM where considered (wikipedia foundation).

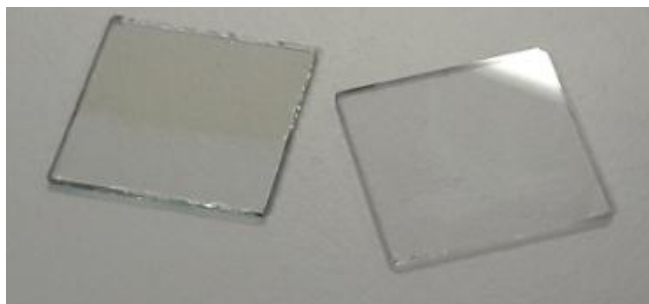


## 2 Experimental

### *2.1 Materials required*

For the fabrication of an organic solar cell under ambient conditions the following materials were required:

Pre-patterned Indium tin oxide, ITO, coated glass substrate (25mm×25mm) (Figure 49).



*Figure 49 Pre-patterned ITO coated glass substrate.*

Poly (3,4-ethylenedioxythiophene)-poly (styrene sulfonate), PEDOT: PSS (which is the buffer layer material) (Figure 50).

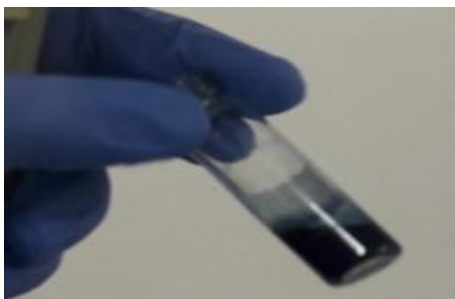


Figure 50 PEDOT: PSSS.

Active layer solution a blend of donor PBDTTT-C-T, and acceptor IC<sub>60</sub>BA or PC<sub>70</sub>BM in the ratio of 1:1.5 (20 mg/ml in dichlorobenzene, ODCB).

Substrate cleaning solvents which will be placed on an ultrasonic cleaning tank (Figure 51) and are:

- 4- Deionised water
- 5- Acetone
- 6- Isopropanol (IPA)



*Figure 51 Ultrasonic cleaning tank.*

Aluminium wire (Figura ) which will be used for cathode deposition.



*Figure 52 Aluminium wire.*

Spin coater (Figura ).



*Figure 53 Spin coater.*

Auto 500 vacuum deposition system (Figura 6).



*Figure 54 Auto 500 vacuum deposition system.*

Liquid nitrogen (Figura 7) that was used to drop the vacuum pressure.



*Figure 55 Liquid nitrogen.*

## 2.2 Procedure for fabricating a device

The process of fabricating an organic solar cell have different steps that are:

1 Cleaning and preparation of the substrate. The glass substrate will have a side of glass and another side with ITO coated (the ITO side will conduct and can easily be identified with the use of a multimeter in the resistance mode). The ITO coated substrates will be pre-patterned before the cleaning process. The cleaning process will consist in an ultrasonic bath (Figura ) in which the glass substrate is cleaned in deionised water, acetone and isopropanol. The entire process last circa 35 minutes since you will have the glass substrate about ten minutes in each solvent. The time will be related with the level of cleaning desired. After that the ITO substrate is cleaned.



*Figure 56 Ultrasonic cleaning tank used to clean the glass substrate.*

2 Buffer layer deposition. A uniform PEDOT: PSS film is formed by dropping the PEDOT: PSS in the whole section of the substrate and starting the spin coater (Figura ). The spin coater is programmed to work in two stages with different times and speed. By the modification of these two parameters the final thickness of the PEDOT: PSS film is controlled.



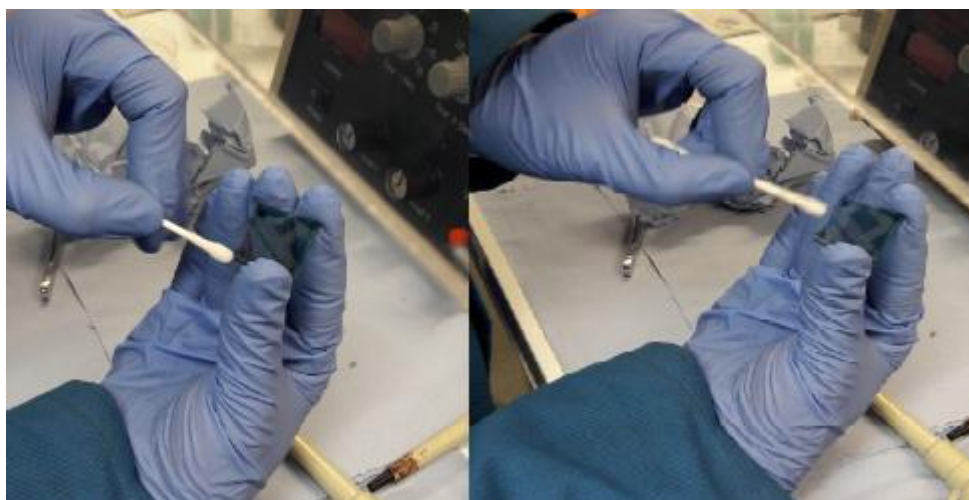
*Figure 57 Drop of the PEDOT: PSS in the whole section of the substrate.*

Afterward PEDOT: PSS thin film is dried at a temperature close to 120°C for ten minutes since the next layer is sensitive to humidity (Figura 10) and then it is cooled down and prepared for the deposition of the active layer. The Stage 1 of the spin coater was performed at 400 rpm for 6 seconds and the Stage 2 was accomplished at 500 rpm for 30 seconds.



*Figure 58 Heating plate for drying the PEDOT. PSS.*

3 Active layer spin casting. The concentration of the solution, the speed of the spin coater and the time are factors related with the desired film thickness. Since the final film thickness is related with the quantity of energy that can be absorbed, you will not desire a quite thin film. A thickness circa 100 nm will be obtained after spin coater ends. The spin time was 18 seconds and the speed was 500 rpm. Once the spin coater ends the residual solvent is evaporated and a cotton bud dabbed in an organic solvent is used to clear a line of the active layer off so that electrical contact with ITO electrode can be made (Figura 1).



*Figure 59 Use of a cotton bud to clear the active layer off.*

4 Cathode deposition. First, the Auto 500 deposition system is switched on and prepared for use. Then the aluminium wires are prepared. One wire of 15 mm can be enough to achieve the desired thickness however, more will be used to be sure (Figura 2).



*Figure 60 Aluminium wire hang on the filament in the deposition chamber.*

Then, a shadow mask is used to place there the active layer coated substrate so that the active area of the completed device is the one that you desire (Figura 3).



*Figure 61 Shadow mask where the active layer is placed.*

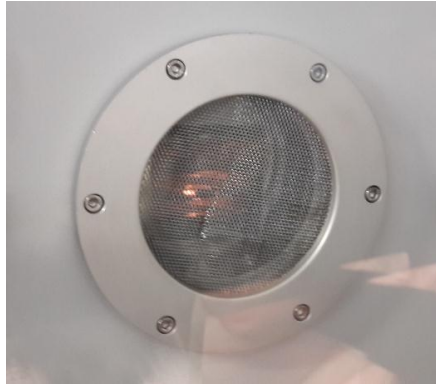
After that the shadow mask is placed on the deposition chamber (Figura 6) where a vacuum pressure close to  $10^{-6}$  mbar is desired. Liquid nitrogen (Figura 7) was used to achieve this vacuum value quickly. In the deposition process, the thickness of the aluminium is controlled by a monitor (Figura 4).



*Figure 62 Monitor for controlling the film thickness.*

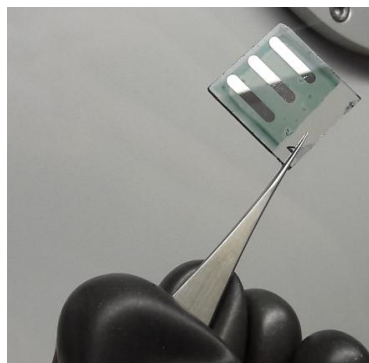


The monitor indicates the rate of evaporation (in the left) and the film thickness (to the right). The deposition process (Figura 5) is started and is carried out until the desired thickness is achieved, in our case the desired thickness was about 100 nm. The deposition process consists in heating the aluminium coil by injecting current so that aluminium evaporates.



*Figure 63 Deposition chamber during the deposition process.*

The organic solar cell was finally fabricated (Figura 6).



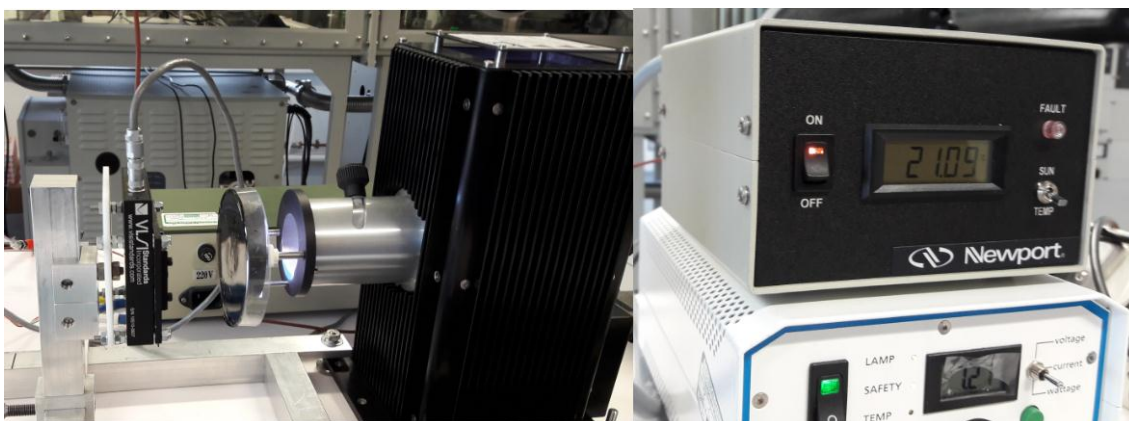
*Figure 64 Organic solar cell.*

5 Measurements. After the device is created different measurements can be carried out to evaluate the photovoltaic parameters of the device.

### 3 Characterization of the device

For the characterization of an organic solar cell the following machines were required:

Solar simulator (Figura 7) that will provide a power input around 100 mW/cm<sup>2</sup>.



*Figure 65 Solar simulator.*

Keithley 2400 source meter (Figura 8).



*Figure 66 Keithley 2400 source meter.*

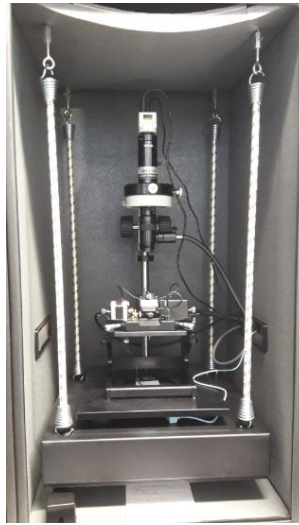
UV-Vis spectrophotometer (Figura 9).



*Figure 67 Varian Cary 50 absorption spectrometer.*



Scanning probe microscopy, SPM, (Figura 20).



*Figure 68 Scanning probe multimode microscope Agilent 5500 AFM.*

Surface profiler (Figura 10).



*Figure 69 Dektak XT surface profiler.*

X-ray diffraction machine (Figura 11).



*Figure 70 D8 advance with DAVINCI with LYNXEYE detector.*

Raman spectroscope (Figura 12).



Figure 71 RENISHAW inVia Raman Microscope.

### 3.1 I-V Characteristics

By placing our devices under a solar simulator (Figura 7) the I-V characteristics of the device were obtained under illumination conditions. For achieving this a Keithley 2400 source (Figura 8) was used.

PBDTTT-C-T: IC<sub>60</sub>BA

Since the analysis is the same for all the devices, only one device will be analysed as an example of the rest.

In one of the devices we obtained estrange data since it was damaged (Figura 13).

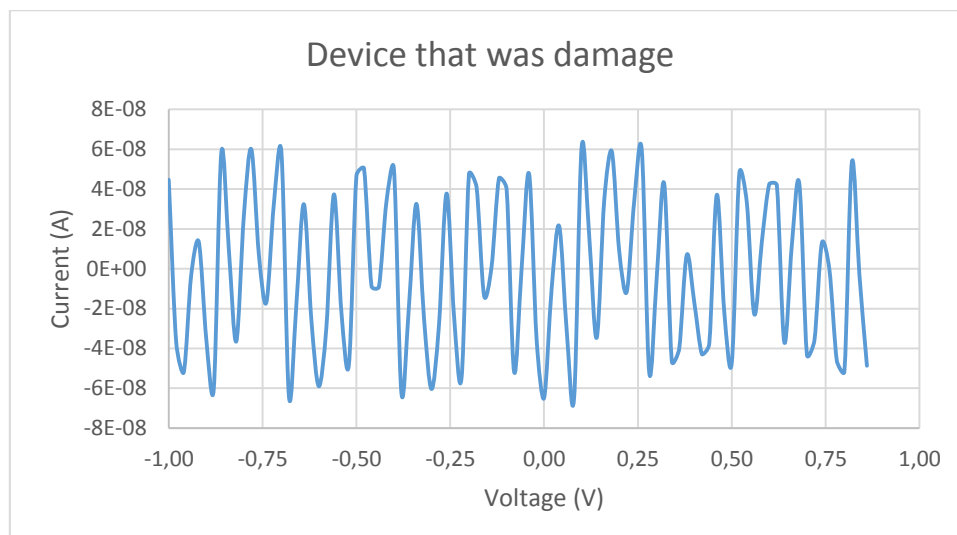


Figure 72 Example of a damaged device.

Initially the VI characteristics of the device were measured without any light (Figura 14).

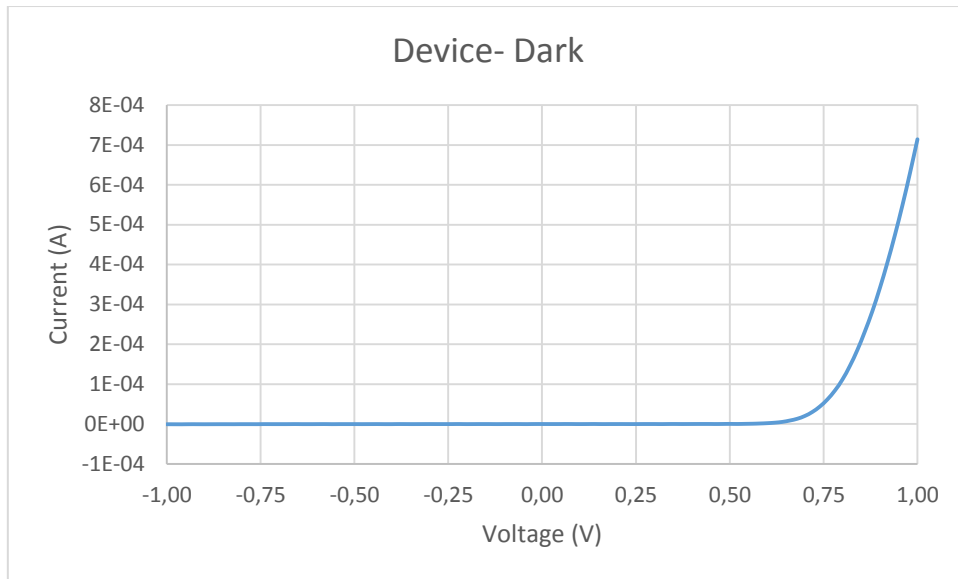


Figure 73 Device V-I characteristics when there is not any light.

Then the solar simulator is used and the following data are obtained (Figura 15):

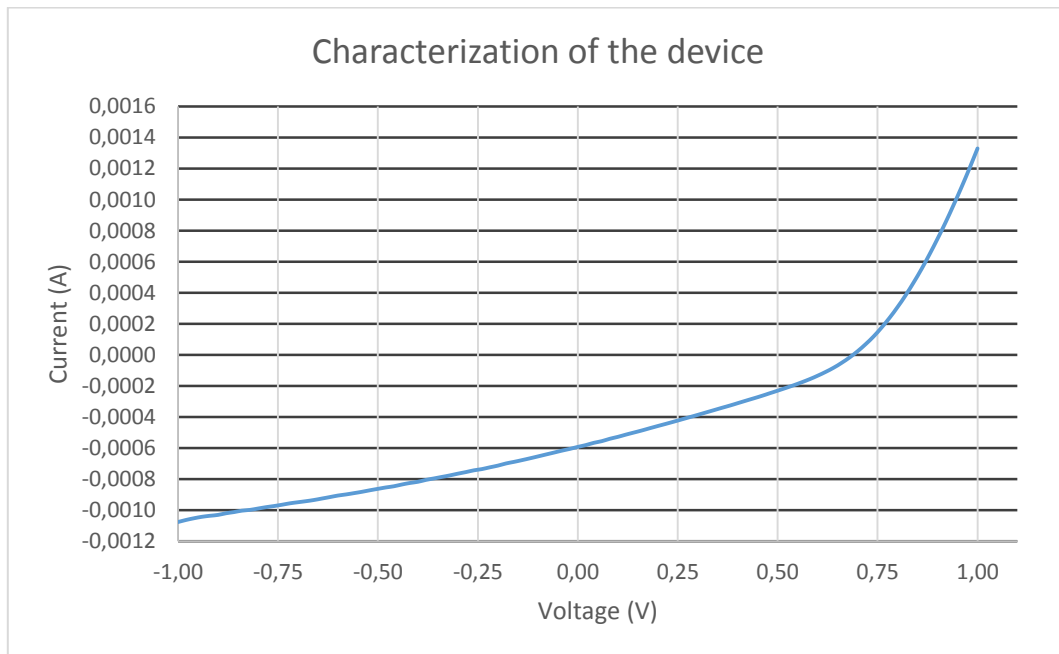


Figure 74 Device V-I characteristics under illumination.

From the data above (Figura 15) the short circuit current and the open circuit voltage can be obtained:

$$V_{oc}=0.6875 \text{ V}$$

$$I_{sc}=0.00058 \text{ A}$$

Knowing that the area of the device is  $0.13 \text{ cm}^2$  the VJ characteristics can also be obtained (Figura 16).

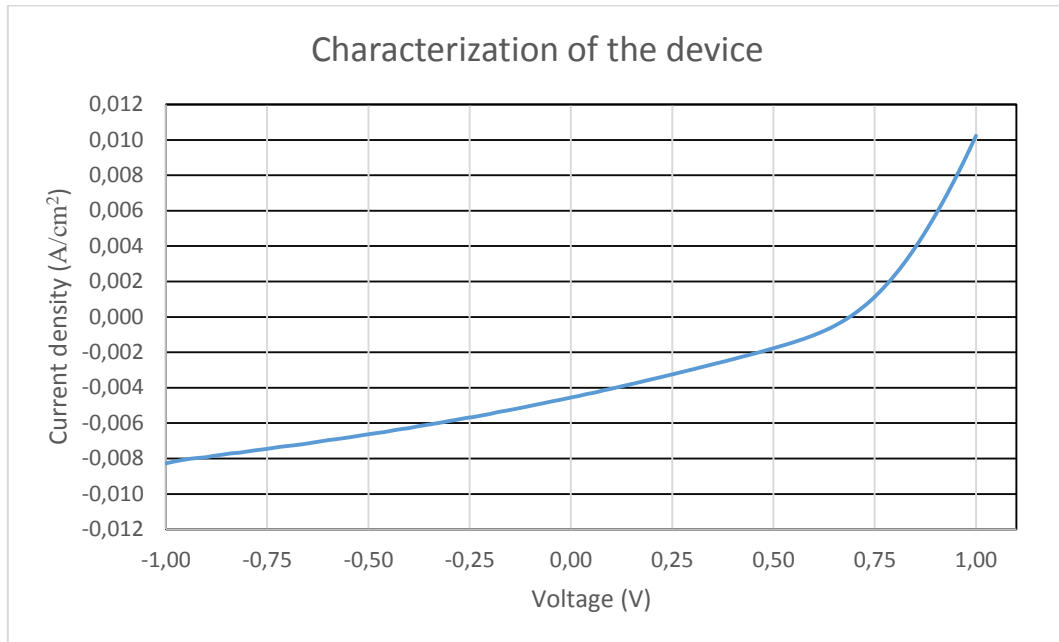


Figure 75 Device V-J characteristics under illumination.

From this graph the  $J_{sc}=0045 \text{ A/cm}^2$  is obtained. The power can also be represented (Figura 17).

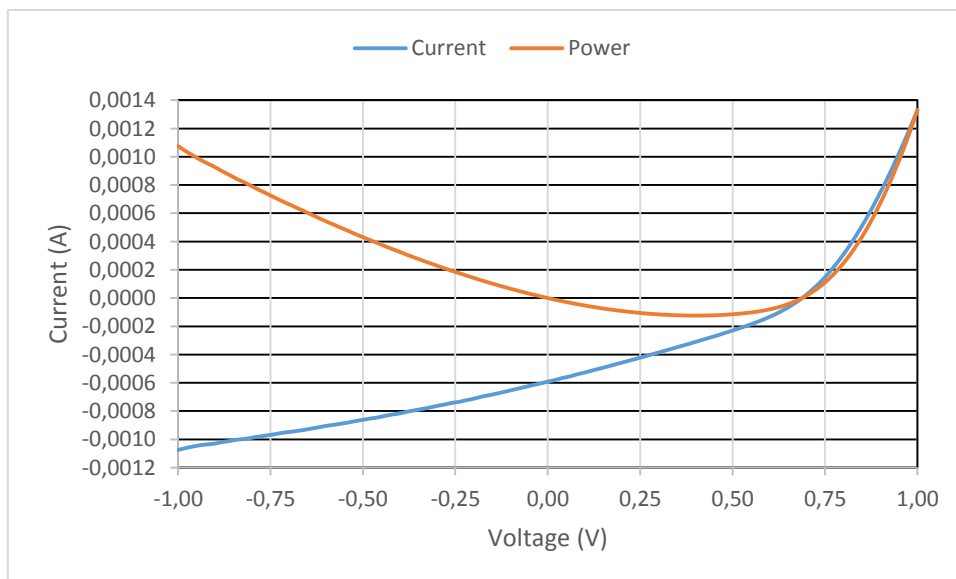


Figure 76 Device power and V-I characteristics under illumination.

From Figura 17 the maximum power can be obtained  $P_{max} \approx 0.000124$  VA.

With these values the fill factor, FF, and the power conversion efficiency, PCE, can easily be calculated.

$$FF = \frac{I_{max} \times V_{max}}{I_{sc} \times V_{oc}} = \frac{0.000124}{0.00058 \times 0.6875} = 0.311$$

Knowing that:

$$P_{out} = FF \times J_{sc} \times V_{oc} = 0.0045 \times 0.6875 \times 0.311 = 0.00096$$

then:

$$PCE(\%) = \frac{P_{out}}{P_{in}} \times 100 = \frac{FF \times J_{sc} \times V_{oc}}{P_{in}} \times 100 = \frac{0.096}{99.24 \times 10^{-3}} = 0.9695\%$$

As it can be seen the fill factor is quite small (a good value will be around 0.7) and the power conversion efficiency is poor (less than 1%).

The other devices were also computed and the following graphs were obtained (Figura 18, Figura 30, Figura 19, Figura 20 and Figura 21 ):

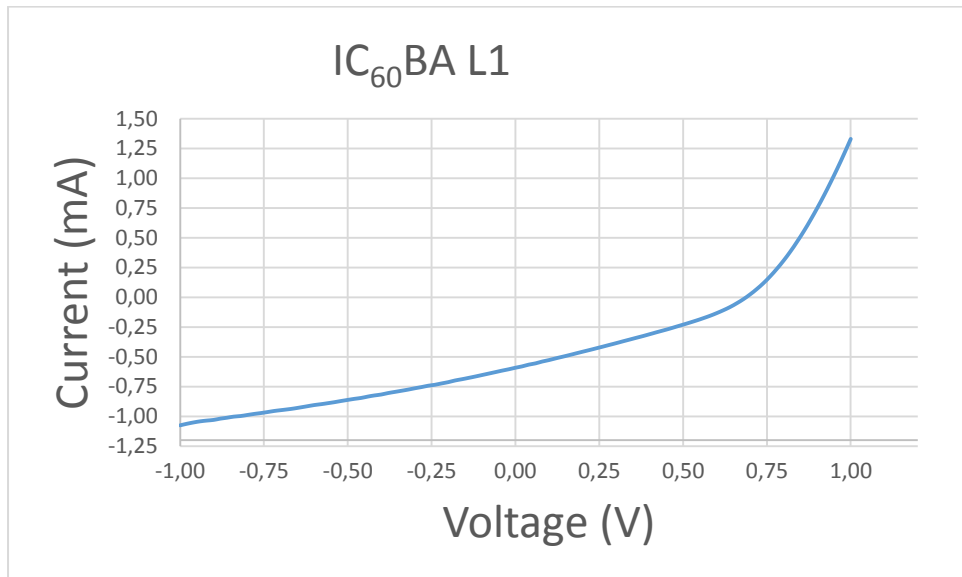


Figure 77 Device V-I characteristics L1.

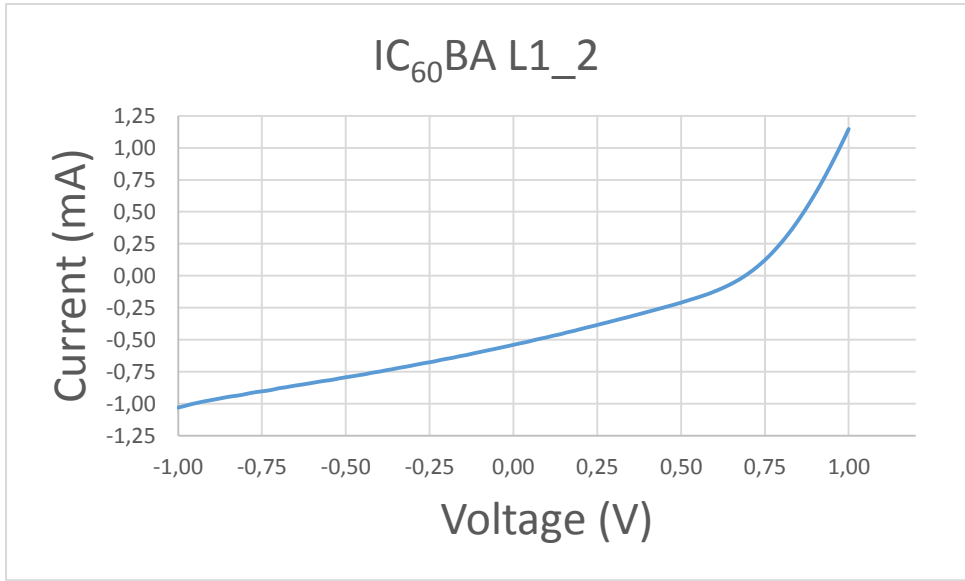


Figure 78 Device V-I characteristics L1\_2.

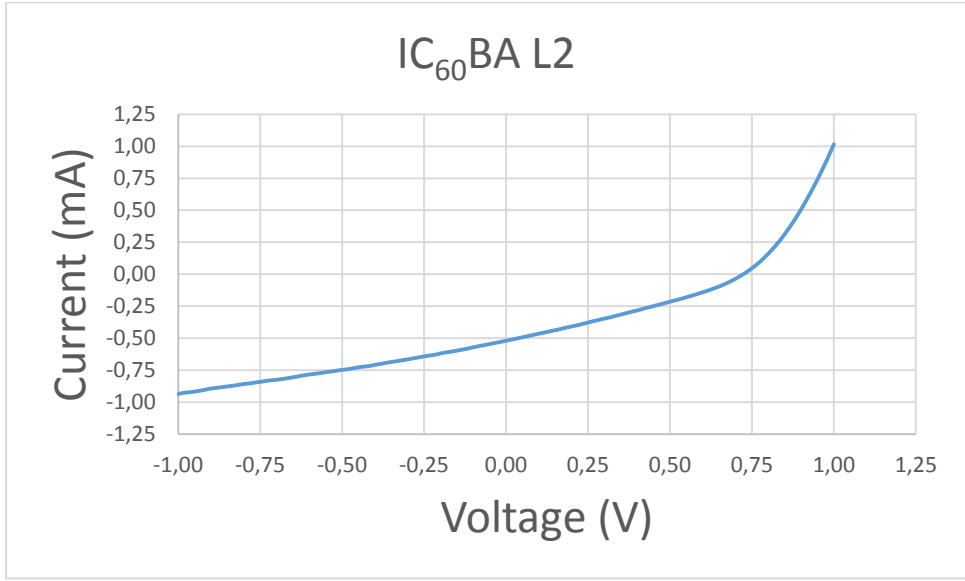


Figure 79 Device V-I characteristics L2.

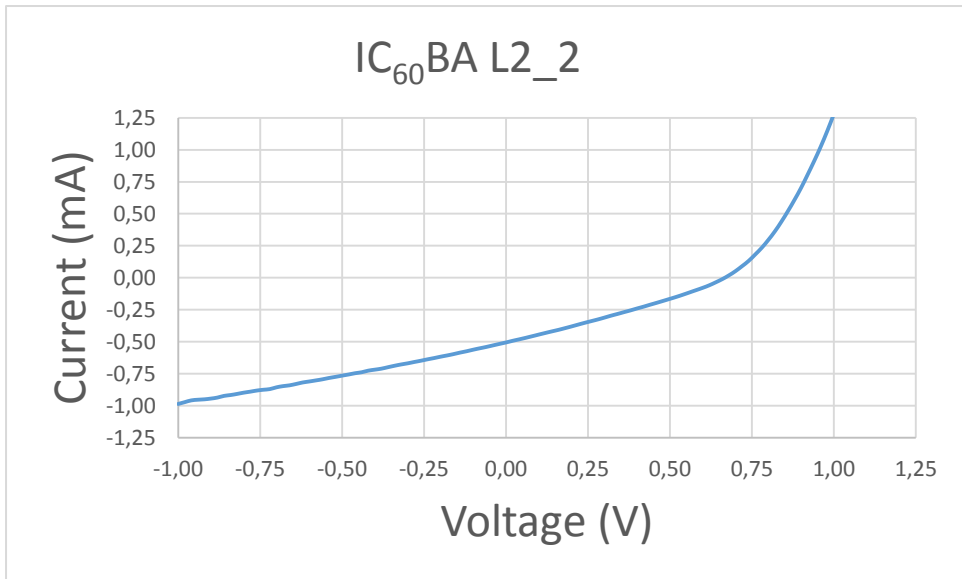


Figure 80 Device V-I characteristics L2\_2.

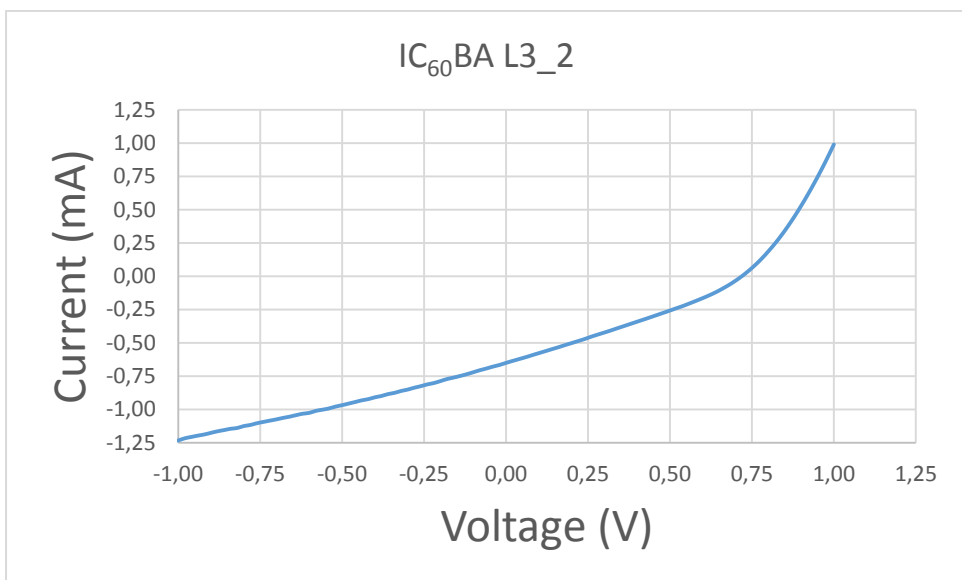


Figure 81 Device V-I characteristics L3\_2

As it can be observed in the different graphs the values are quite similar.

Since the analysis is the same for all the devices, only one device will be analysed as an example of the rest.

Initially the VI characteristics of the device were measured without any light (Figura 22).

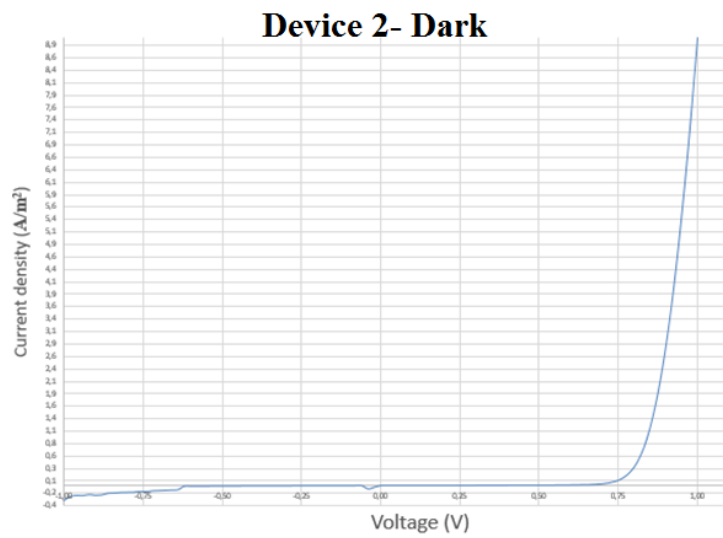


Figure 82 Device V-I characteristics when there is not any light.

Then the solar simulator is used and the following data are obtained (Figura 15):

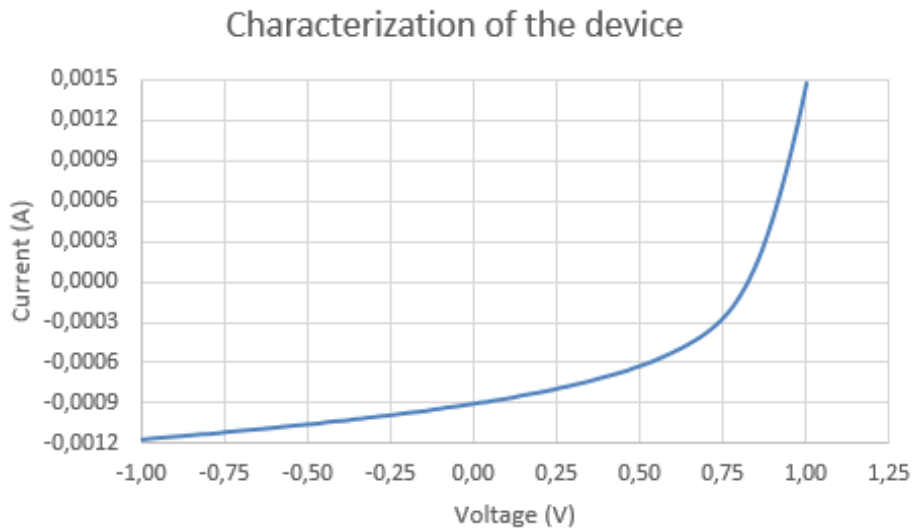


Figure 83 Device V-I characteristics under illumination.



From the data above (Figura 23) the short circuit current and the open circuit voltage can be obtained:

$$V_{oc}=0.833 \text{ V}$$

$$I_{sc}=0.0009 \text{ A}$$

Knowing that the area of the device is  $0.13 \text{ cm}^2$  the VJ characteristics can also be obtained (Figura 24).

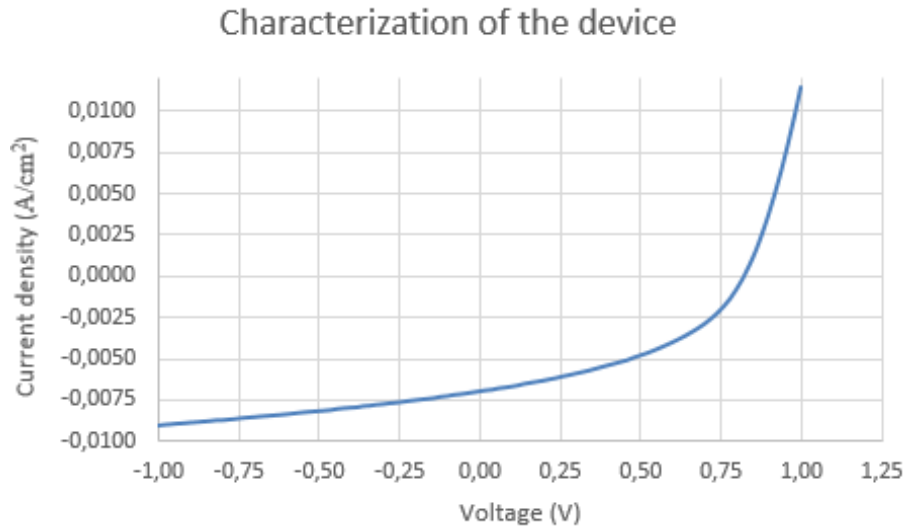


Figure 84 Device V-J characteristics under illumination.

From this graph the  $J_{sc}=0.00688 \text{ A/cm}^2$  is obtained. The power can also be represented (Figura 25).

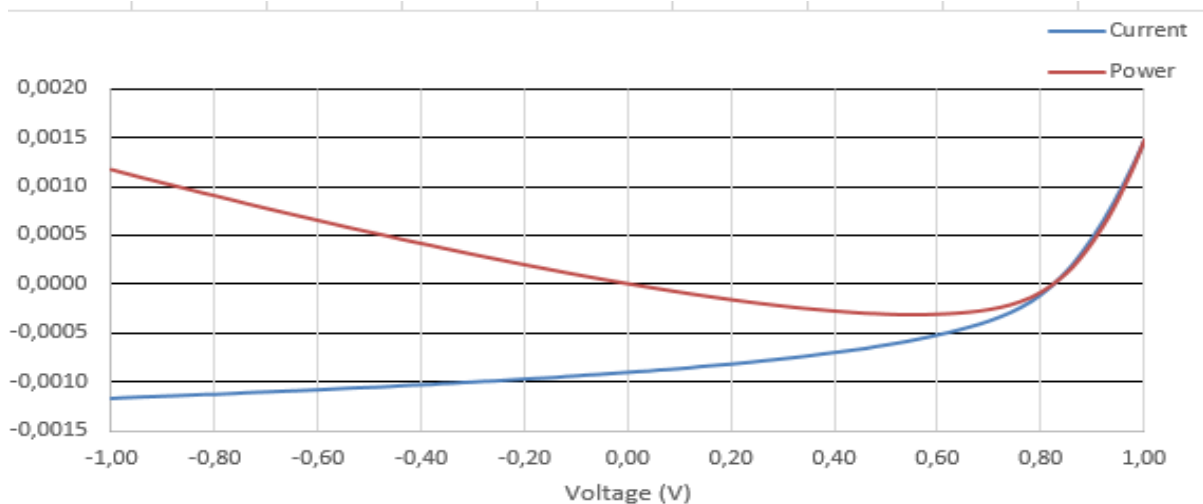


Figure 85 Device power and V-I characteristics under illumination.

From Figura 25 the maximum power can be obtained  $P_{max} \approx 0.0003$  VA.

With these values the fill factor and the power conversion efficiency can easily be computed:

$$FF = \frac{I_{max} \times V_{max}}{I_{sc} \times V_{oc}} = \frac{0.0003}{0.0009 \times 0.833} = 0.4$$

Knowing that:

$$P_{out} = FF \times J_{sc} \times V_{oc} = 0.00688 \times 0.833 \times 0.4 = 0.00229 \text{ then:}$$

$$PCE(\%) = \frac{P_{out}}{P_{in}} \times 100 = \frac{FF \times J_{sc} \times V_{oc}}{P_{in}} \times 100 = \frac{0.229}{100 \times 10^{-3}} = 2.29\%$$

The PCE of the device with PC<sub>70</sub>BM is observed to be higher than the one of the IC<sub>60</sub>BA.

The other devices were also computed and the following graphs were obtained (Figura 26, Figura 27, Figura 28, Figura 29, Figura 30 and Figura 31):

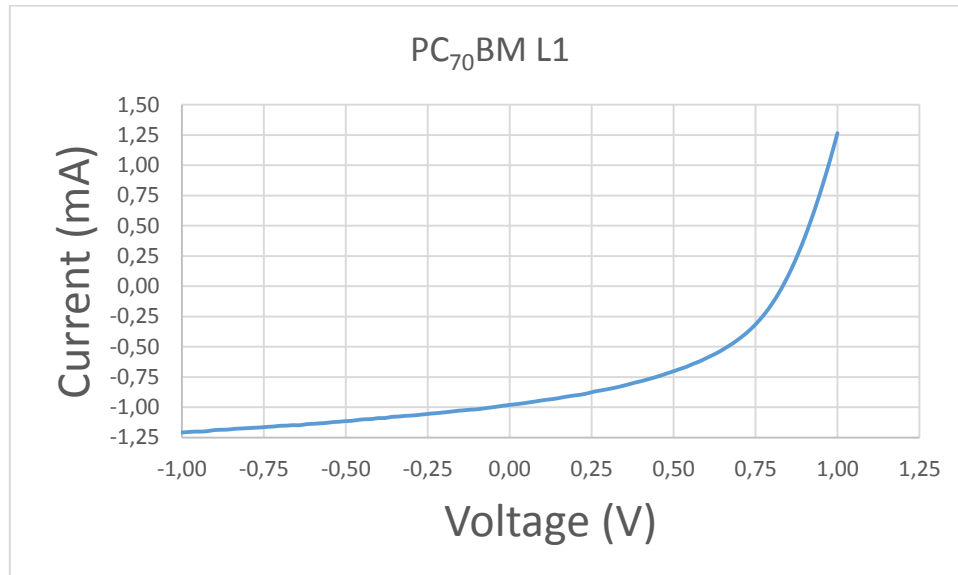


Figure 86 Device V-I characteristics L1

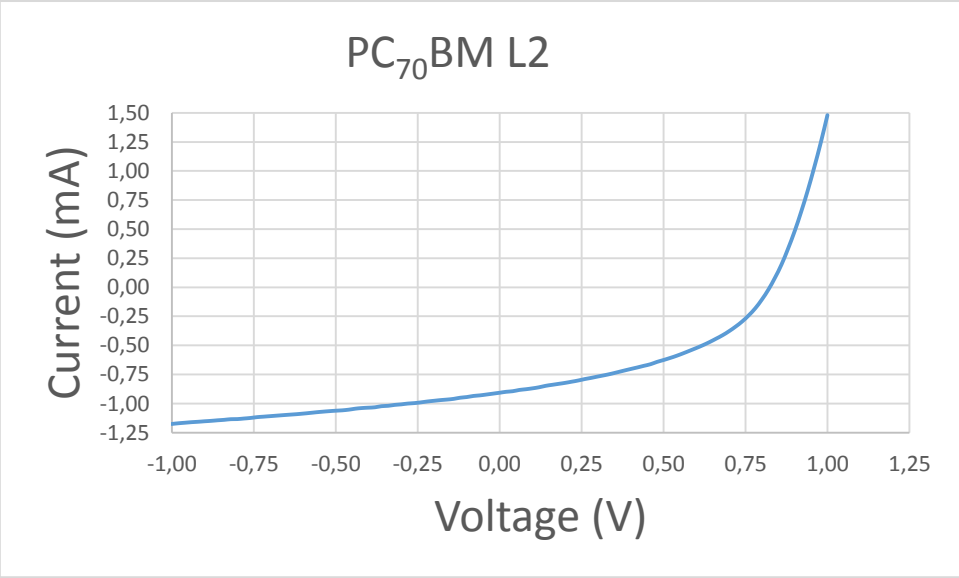


Figure 87 Device V-I characteristics L2.

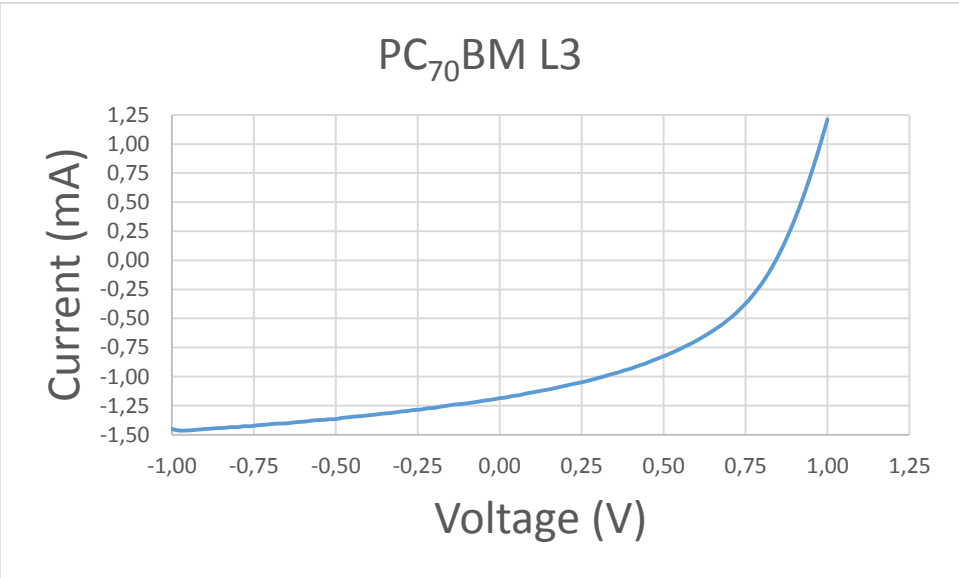
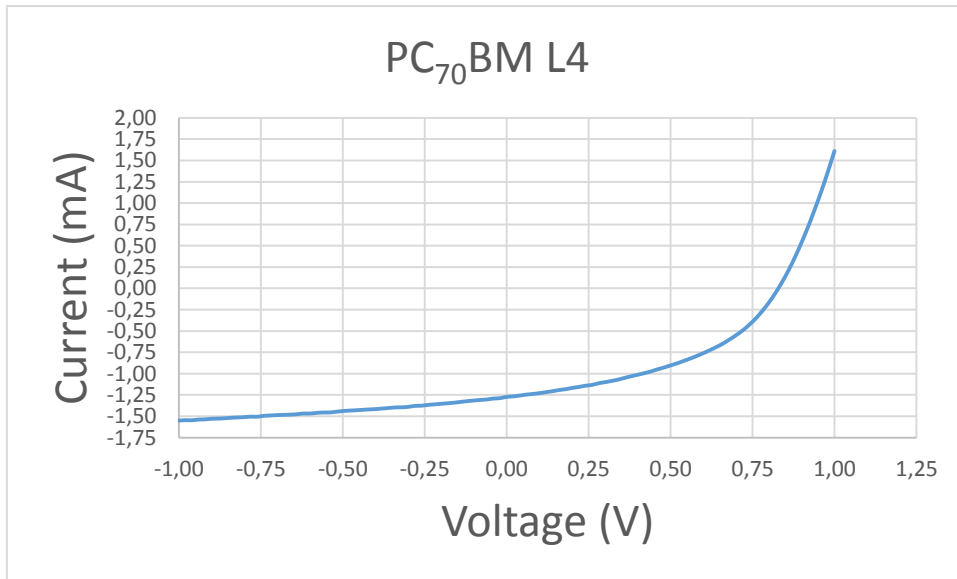
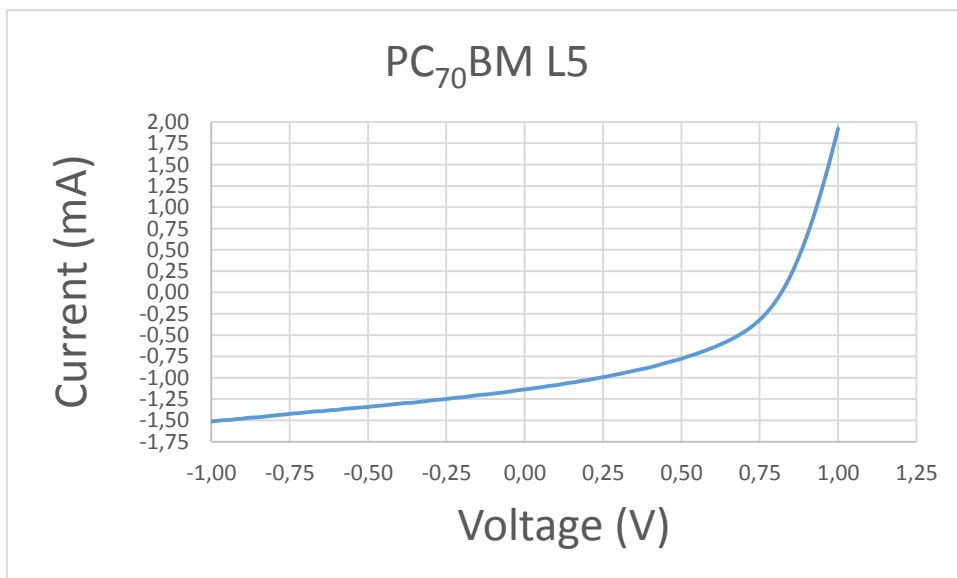


Figure 88 Device V-I characteristics L3.



*Figure 89 Device V-I characteristics L4.*



*Figure 90 Device V-I characteristics L5.*

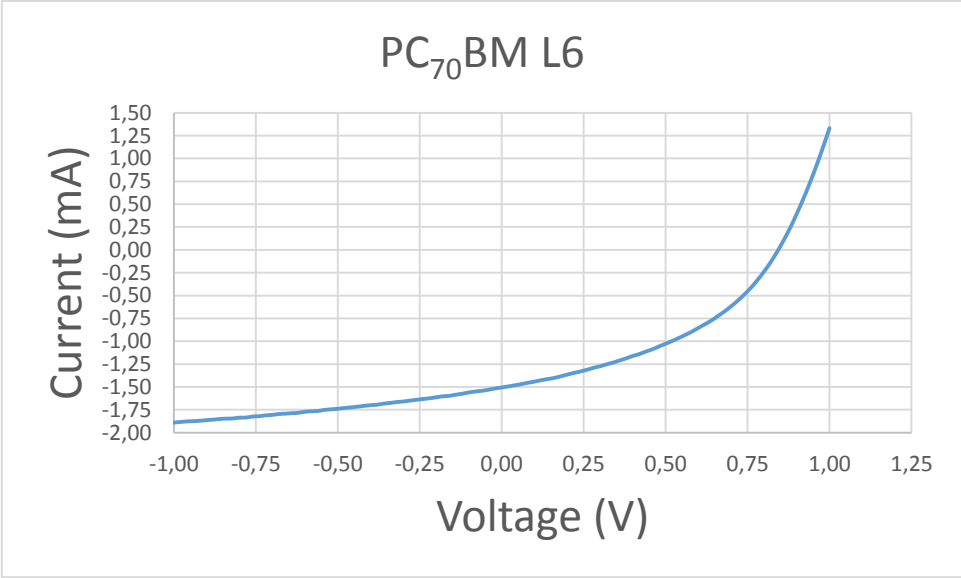


Figure 91 Device V-I characteristics L6.

### 3.2 Optical absorption spectra measurement

The optical absorption spectra measurement consists on the measurement of the ultraviolet-visible absorption spectra and it is a useful technique for the characterization of a solar cell and for obtaining electronic and optical properties. The technique consists in measuring the absorbed light of a range of wavelengths since that determines the electronic transitions on the material.

Per the Beer's law:

$$A = \log I_0/I = -\log_{10} T$$

Where A is the absorbance and T represents the transmittance.

The absorption spectrum of a material can be represented by plotting the absorbance as a function of different wavelengths.

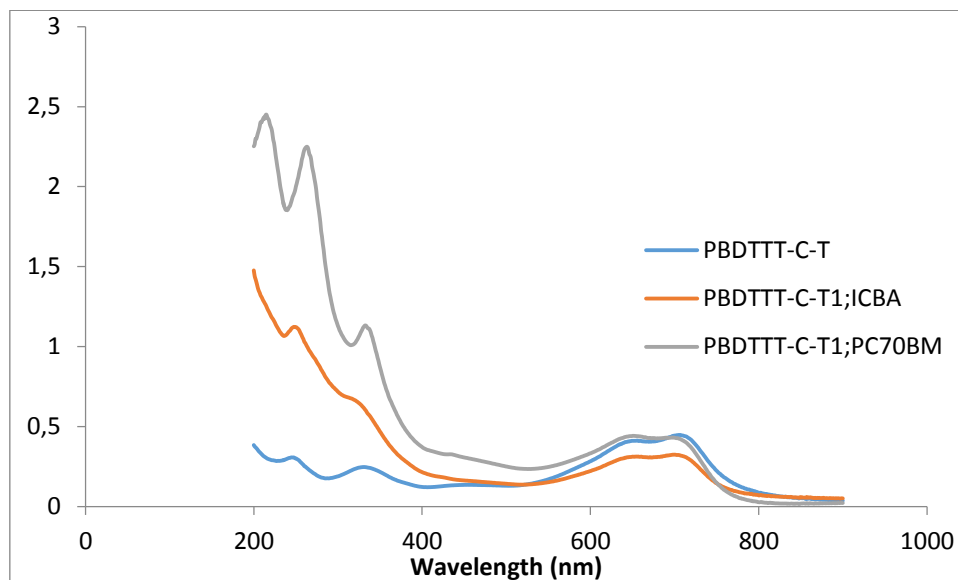


Figure 92 Absorption spectra.

As it can be seen in Figura 32 the absorption level is quite similar for wavelengths higher than 400 nm. However, if a value of the wavelength lower than 400nm is considered greater differences between the three can be observed. The PBDTTT-C-T is observed to have the smallest values whereas the PBDTTT-C-T with IC<sub>60</sub>BA is observed to have intermediate values and the PBDTTT-C-T with PC70BM is observed to have the highest values for 200nm <math>\lambda</math> <math>< 500\text{nm}</math>.

The graphs can be represented for the different components alone in Figura 33, Figura 34 and Figura 35.

PBDTTT-C-T polymer

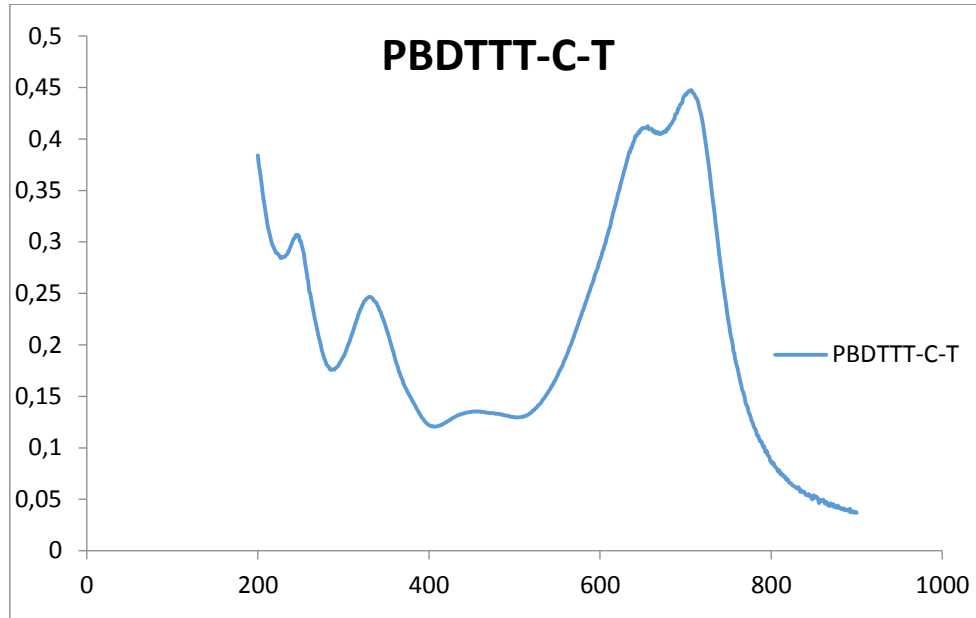


Figure 93 Absorption spectra for PBDTTT-C-T.

At  $\lambda=200$  nm a value of 0.4 can be observed when there is only PBDTTT-C-T.

PBDTTT-C-T: PC<sub>70</sub>BM

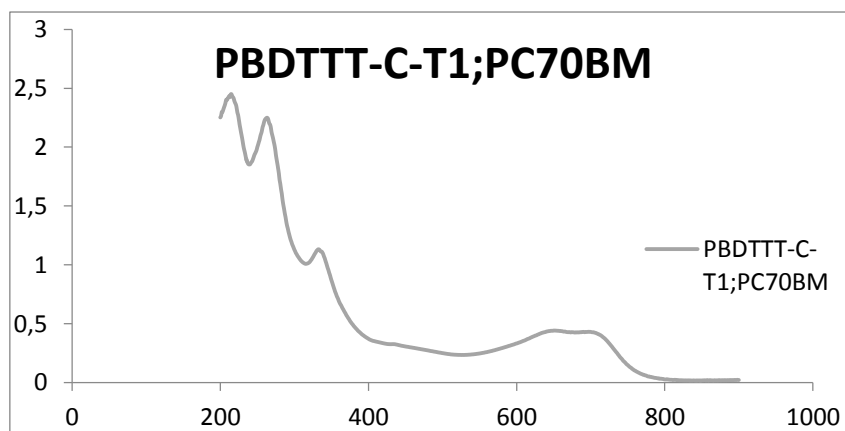


Figure 94 Absorption spectra for PBDTTT-C-T with PC<sub>70</sub>BM.

At  $\lambda=200$  nm a value of 2.2 can be observed when there is PBDTTT-C-T with PC<sub>70</sub>BM.

PBDTTT-C-T: IC<sub>60</sub>BA

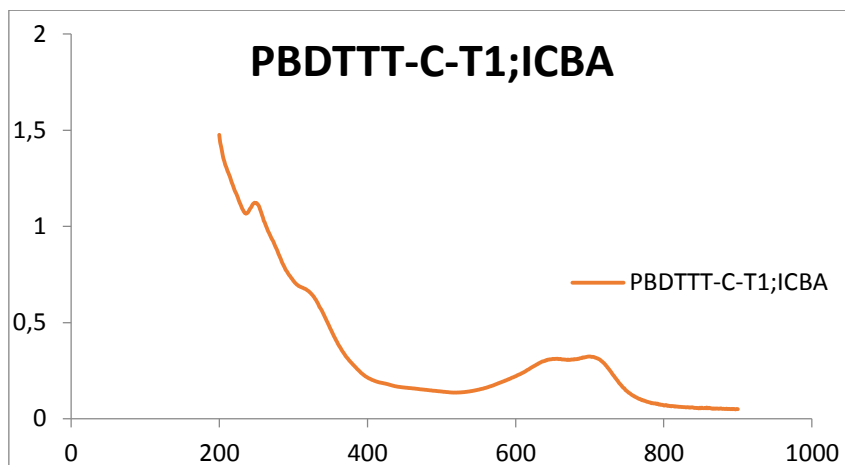


Figure 95 Absorption spectra for PBDTTT-C-T with IC<sub>60</sub>BA.

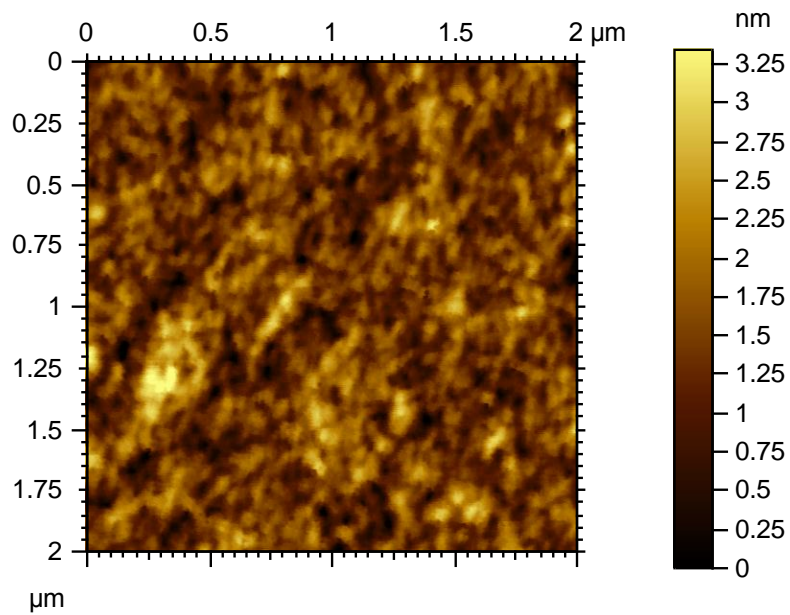
At  $\lambda=200$  nm a value of 1.5 can be observed when there is PBDTTT-C-T with IC<sub>60</sub>BA.



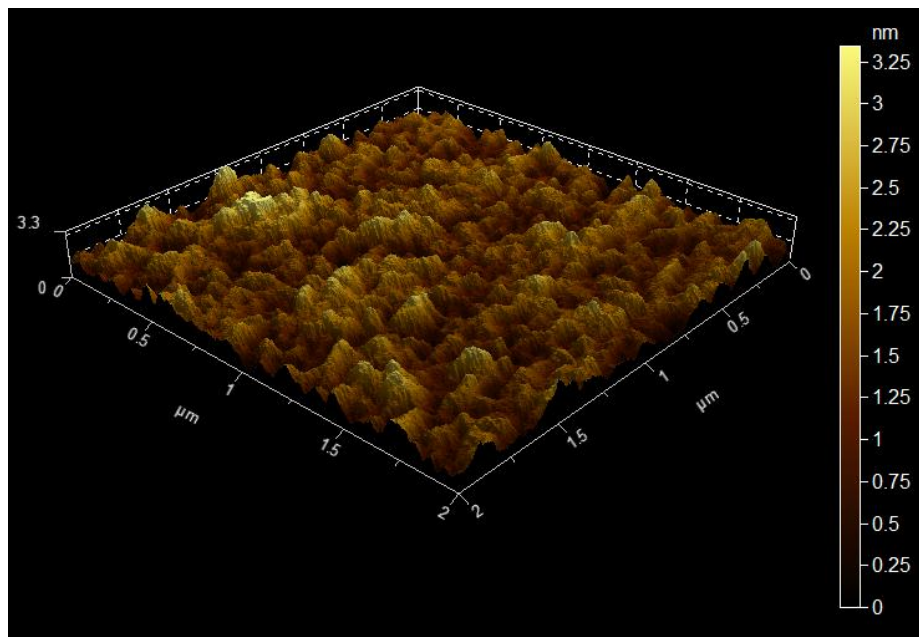
### *3.3 Surface morphology (AFM)*

A scanning probe microscopy (Figura 20) is used to probe the properties of the surface morphologies of the active layers that form interfaces with the cathode. This is important since interfaces between the cathode and the layer affect the properties of the solar cell. With the atomic force microscopy (AFM), the surface composition, as well as the topography can be observed. The AFM is formed by a tip joined to a cantilever and it has three operational modes that are: noncontact mode, contact (where the tip of the cantilever is close to the surface of the sample) and tapping (where the cantilever is oscillated at a frequency, it is a useful method for organic solar cells).

Pristine PBDTTT-C-T polymer



*Figure 96 Topography image PBDTTT-C-T.*



*Figure 97 3D mapping of the topography 2x2 μm of PBDTTT-C-T.*

From the Figure 36 and Figure 37 the mean roughness  $R_s=0.506$  nm is obtained.

PBDTTT-C-T: PC<sub>70</sub>BM

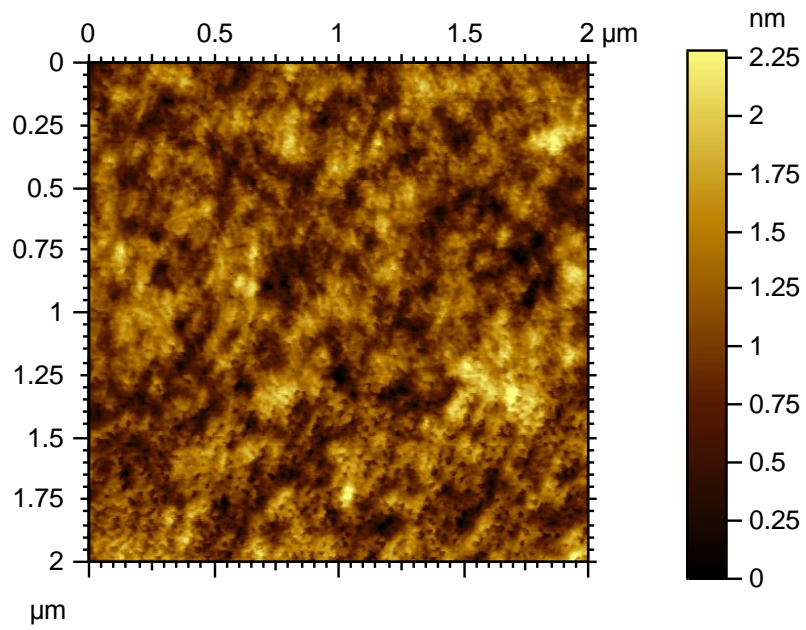


Figure 98 Topography image PBDTTT-C-T with PC<sub>70</sub>BM.

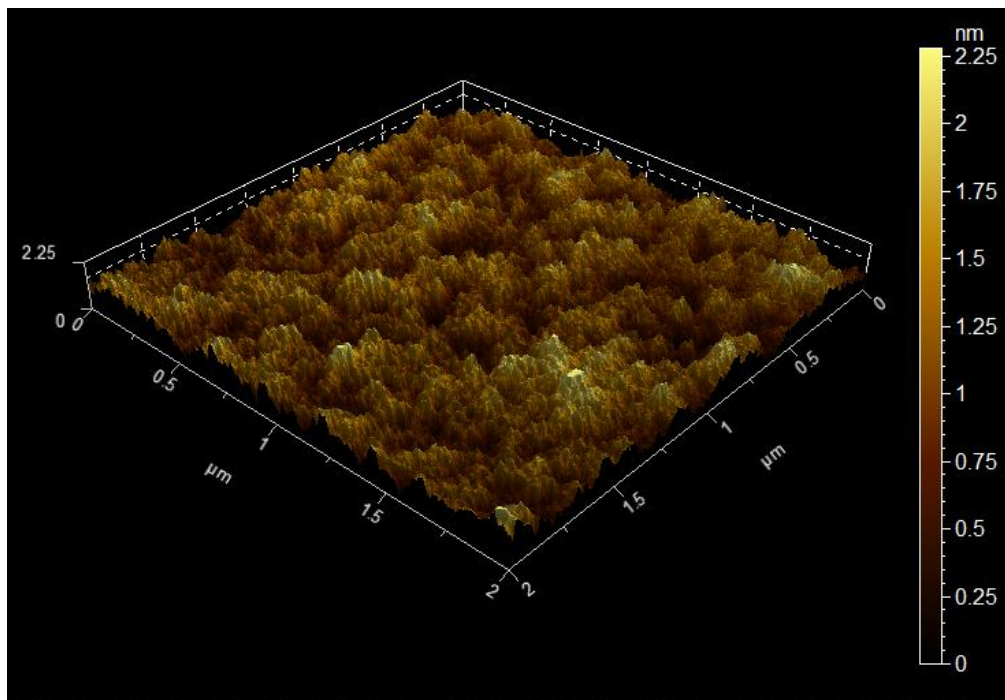


Figure 99 3D mapping of the topography 2x2 μm of PBDTTT-C-T with PC<sub>70</sub>BM.

From the Figure 50 and Figure 38 the mean roughness  $R_s=0.371$  nm is obtained.

PBDTTT-C-T: IC<sub>60</sub>BA

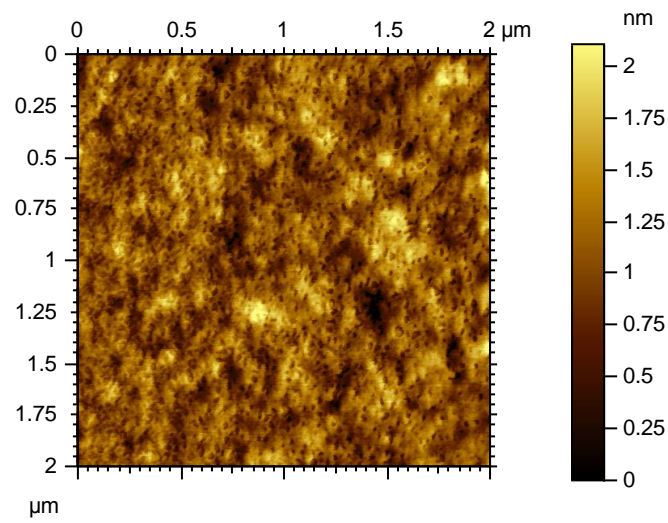


Figure 100 Topography image PBDTTT-C-T with IC<sub>60</sub>BA.

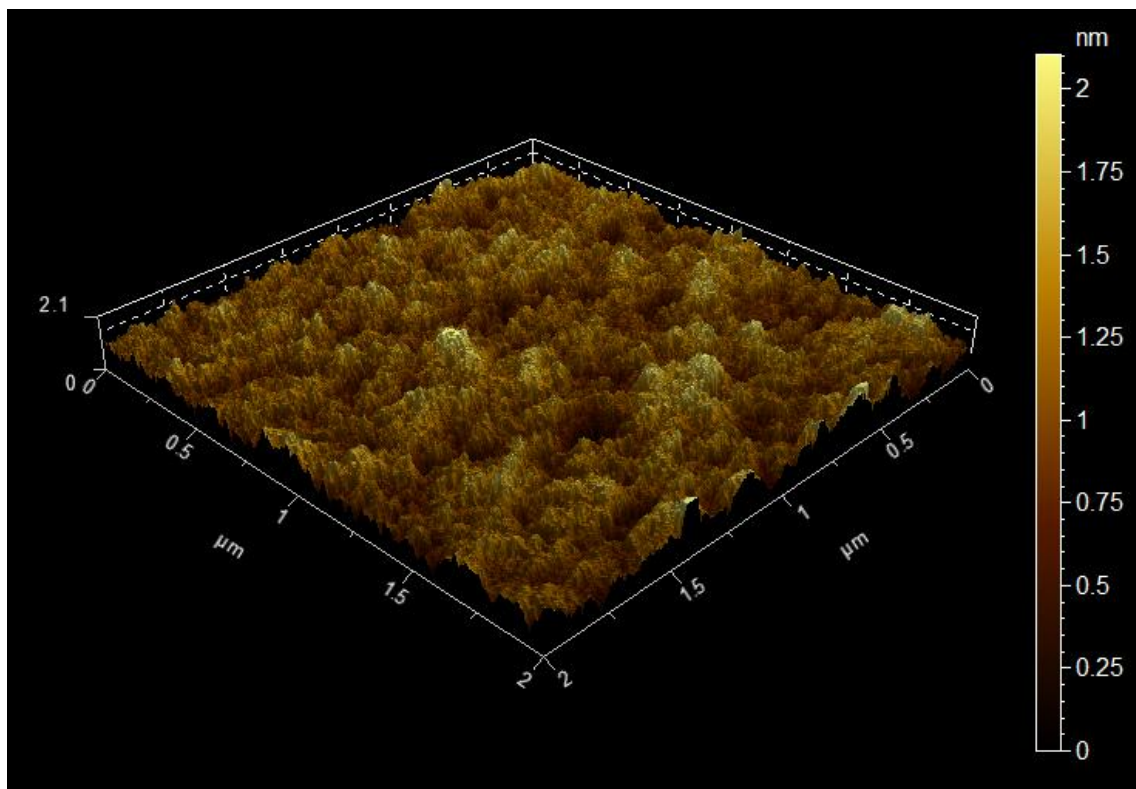


Figure 101 3D mapping of the topography 2x2 μm of PBDTTT-C-T with IC<sub>60</sub>BA.

From the Figure 39 and Figure 40 the mean roughness  $R_s=0.317$  nm is obtained.

### 3.4 Thickness measurement

The thickness of the organic solar cell is an important parameter. The thickness of the film samples can be measured by using a Dektak XT stylus surface profiler (Figura 10). Stylus tips are placed in contact with the surface of the film and the tips moves across the surface while a trace is collected and a step profile is obtained (Figura 41). This is a quite destructive method and the film can be damaged after its thickness is measured.



*Figure 102 Measured step height profile of a film.*

### 3.5 X ray diffraction

For characterising the microstructure in thin films and the details of crystallographic structure Grazing Incidence X-ray diffraction is used. This technique has the advantage of being able to gain insight into the orientation as well as the structure of molecules in the thin film composites (Figura 42). It is an important technique since the performance of organic electronic materials is strictly associated to their molecular confirmation and film thin morphology.

The peaks represent places where a lot of molecules are orientated with the same configuration.

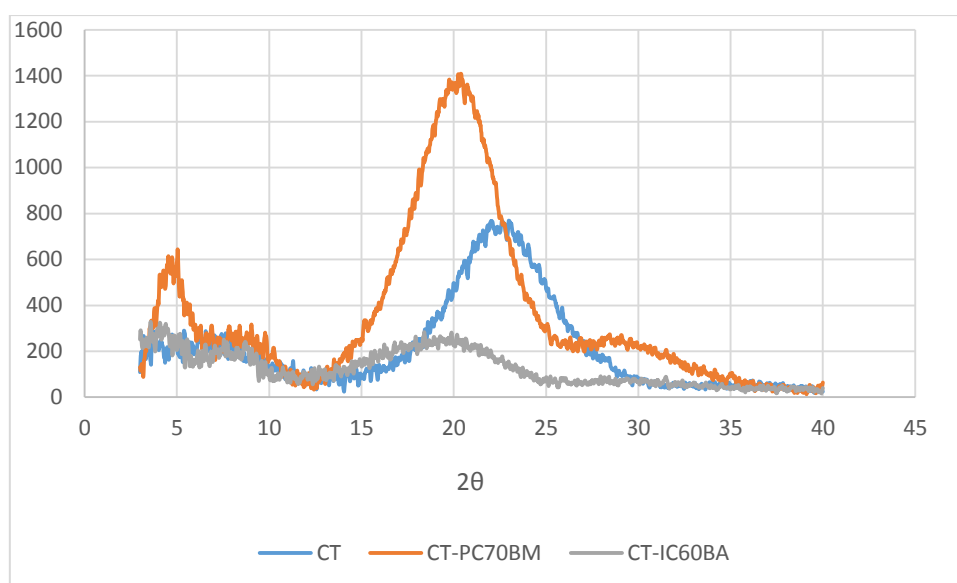


Figure 103 X-ray diffraction pattern of CT, CT-PC70BM and CT-IC60BA.

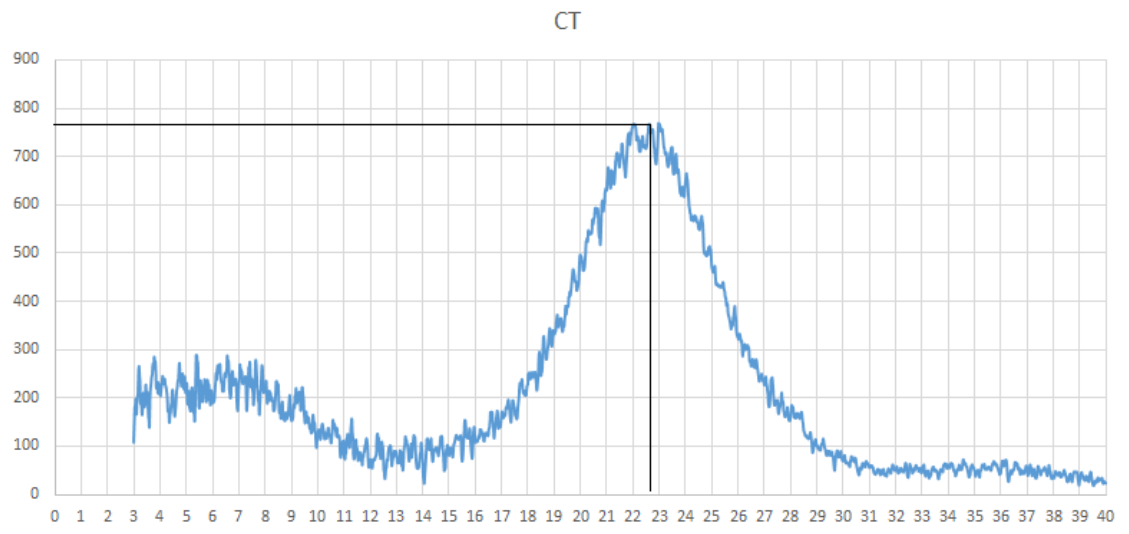


Figure 104 X ray diffraction pattern of PBDTTT-C-T.

In the case of CT without PC<sub>70</sub>BM and without IC<sub>60</sub>BA (Figura 43), the peak value is observed to be at  $2\theta=22.8^\circ$  and its value is around 770.

Therefore, the interplanar spacing can easily be obtained by applying the Bragg's law. Taking the wavelength of the X-ray,  $\lambda$ , as  $0.1542 \text{ nm}=1.542 \text{ \AA}$  and the value of  $n=1$  then:

$$n \times \lambda = 2 \times d \times \sin\theta \rightarrow d = \frac{n \times \lambda}{2 \times \sin\theta} = \frac{1 \times 0.1542}{2 \times \sin 11.4} = 0.39 \text{ nm} \\ = 3.9 \text{ \AA}$$

In addition, the crystallite size can also be obtained by applying the Scherer's relation.

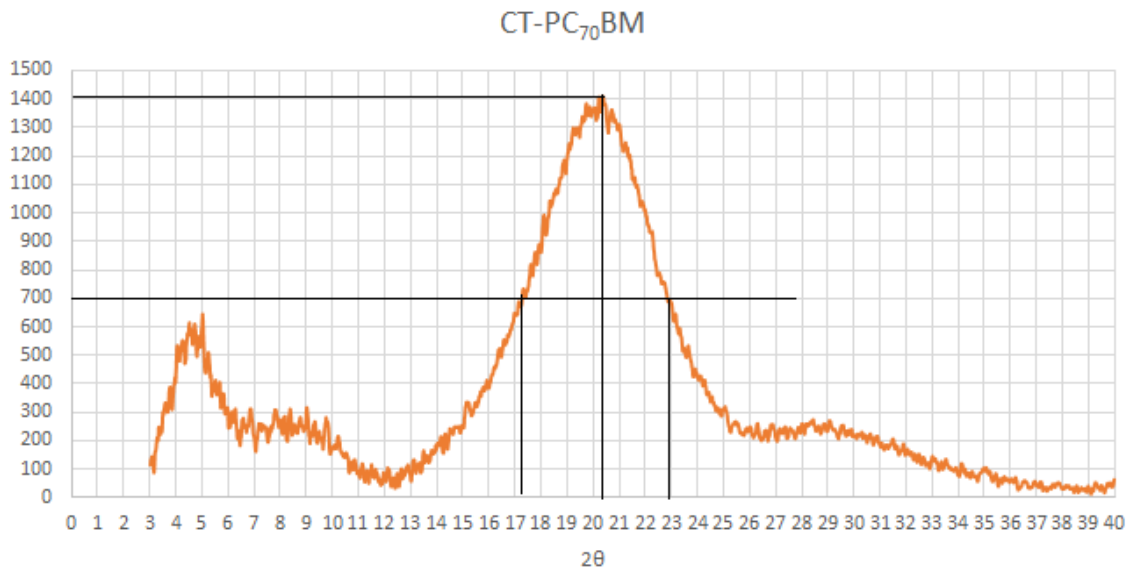
$$L \sim \frac{k \times \lambda}{\Delta_{2\theta} \times \cos\theta}$$

Assuming  $k=0.9$ ,  $\lambda=0.1542 \text{ nm}$  and obtaining the rest of the values from the graph then:

$$\Delta_{2\theta} = 25.5^\circ - 19.5^\circ = 6^\circ = 0.105 \text{ rad}$$

$$L \sim \frac{0.9 \times 0.1542}{0.105 \times \cos 11.4} = 1.348 \text{ nm}$$





*Figure 105 X ray diffraction pattern of CT-PC70BM.*

In the case of CT-PC<sub>70</sub>BM (Figura 44), the peak value is observed to be at  $2\theta=20.2^\circ$  and its value is around 1400.

Therefore, the interplanar spacing can easily be obtained by applying the Bragg's law. Taking the wavelength of the X-ray,  $\lambda$ , as  $0.1542 \text{ nm}=1.542 \text{ \AA}$  and the value of  $n=1$  then:

$$n \times \lambda = 2 \times d \times \sin\theta \rightarrow d = \frac{n \times \lambda}{2 \times \sin\theta} = \frac{1 \times 0.1542}{2 \times \sin 10.1} = 0.44 \text{ nm} \\ = 4.4 \text{ \AA}$$

In addition, the crystallite size can also be obtained by applying the Scherer's relation.

$$L \sim \frac{k \times \lambda}{\Delta_{2\theta} \times \cos\theta}$$

Assuming  $k=0.9$ ,  $\lambda=0.1542 \text{ nm}$  and obtaining the rest of the values from the graph then:

$$\Delta_{2\theta} = 23^\circ - 17.1^\circ = 5.9^\circ = 0.103 \text{ rad}$$

$$L \sim \frac{0.9 \times 0.1542}{0.103 \times \cos 10.1} = 1.369 \text{ nm}$$



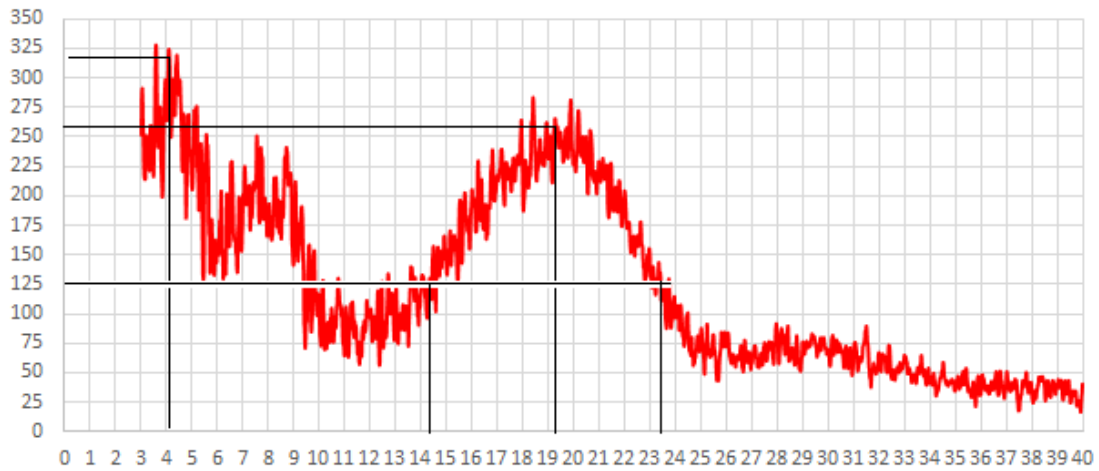
CT-IC<sub>60</sub>BA

Figure 106 X ray diffraction pattern of CT-IC<sub>60</sub>BA.

In the case of CT-IC<sub>60</sub>BA (Figura 45), the peak value is observed to be at  $2\theta=19.2^\circ$  and its value is around 255.

Therefore, the interplanar spacing can easily be obtained by applying the Bragg's law. Taking the wavelength of the X-ray,  $\lambda$ , as  $0.1542 \text{ nm}=1.542 \text{ \AA}$  and the value of  $n=1$  then:

$$n \times \lambda = 2 \times d \times \sin\theta \rightarrow d = \frac{n \times \lambda}{2 \times \sin\theta} = \frac{1 \times 0.1542}{2 \times \sin 9.6} = 0.4623 \text{ nm} \\ = 4.623 \text{ \AA}$$

In addition, the crystallite size can also be obtained by applying the Scherer's relation.

$$L \sim \frac{k \times \lambda}{\Delta_{2\theta} \times \cos\theta}$$

Assuming  $k=0.9$ ,  $\lambda=0.1542 \text{ nm}$  and obtaining the rest of the values from the graph then:

$$\Delta_{2\theta} = 23.2^\circ - 14.2^\circ = 9^\circ = 0.157 \text{ rad}$$

$$L \sim \frac{0.9 \times 0.1542}{0.157 \times \cos 9.6} = 0.897 \text{ nm}$$

## 3.6 Raman spectroscopy and photoluminescence

### 3.6.1 Raman spectroscopy

It is based on the measurement of the shift in frequency of the scattered light following its incidence on the thin film.

A fraction of the scattered light is at a different frequency than the incident light. The difference between the frequency of the scattered light and the frequency of the incident is known as Raman shift.

Initially, the laser beam will be calibrated in an empty box. CT is excited with a laser beam of 514nm and a vibration will be given by the molecules. The grating name is initially selected to be 2400 lumens/mm and the laser power is set to 0.05%. The exposure time is set to 1. With this values is obtained.

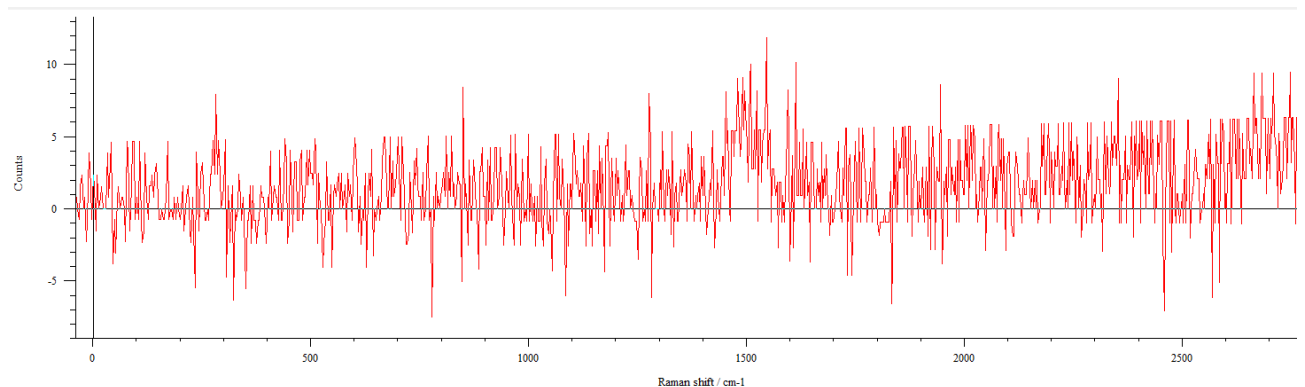


Figure 107 Raman shift with 1200 l/mm and 0.05% of power.

Then the laser power is increased to 0.1% and the exposure time is increased to 10 (Figure 60).

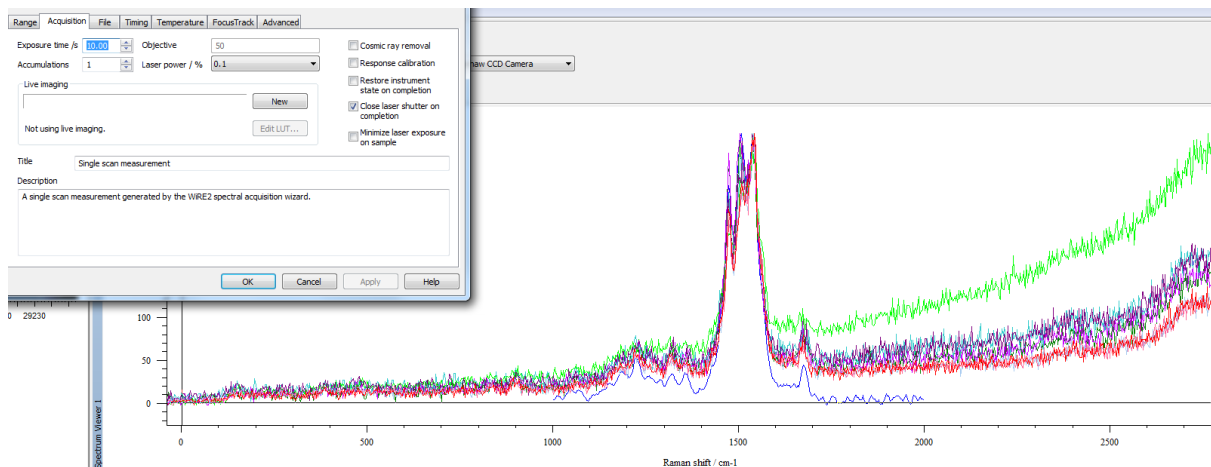
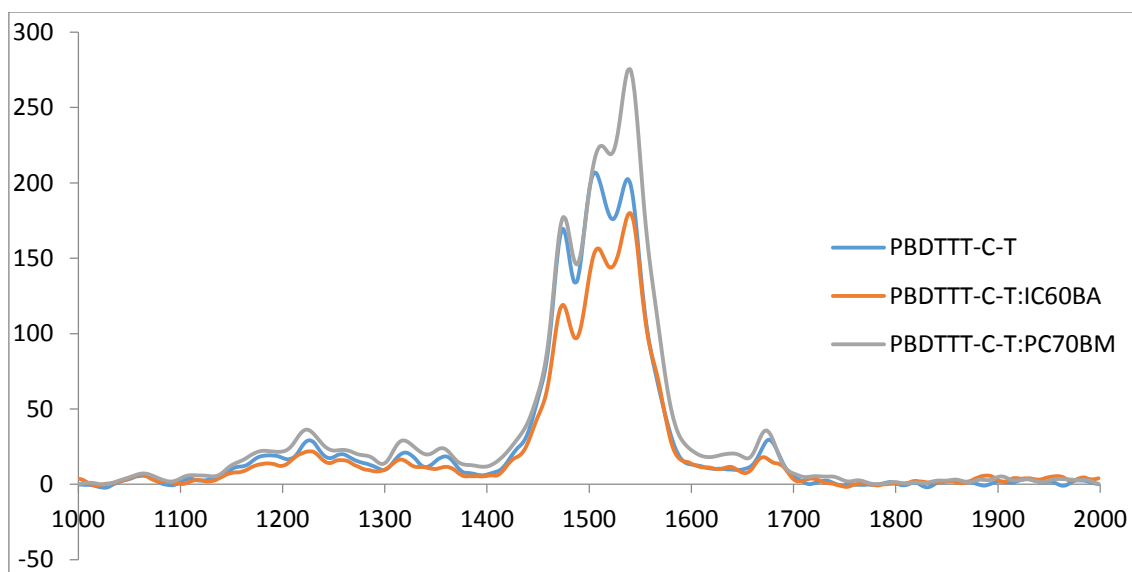


Figure 108 Raman shift with time of 10 and 0.1% of power.

The Raman shift for PBDTTT-C-T, PBDTTT-C-T: IC<sub>60</sub>BA and PBDTTT-C-T: PC<sub>70</sub>BM is represented in Figura 47.



*Figure 109 Raman shift for CT, CT with PC70BM and CT with IC60BA.*

### 3.6.2 Photoluminescence spectroscopy

Photoluminescence is a method usually used to compliment UV-Vis spectra measurement and Raman. It is use to compare emission counts and is indicative of charge transfer from polymer to the small molecule. In addition, the method can be used to evaluate how well composite materials in thin films are intermixed.

The data obtained are represented in Figura 48:

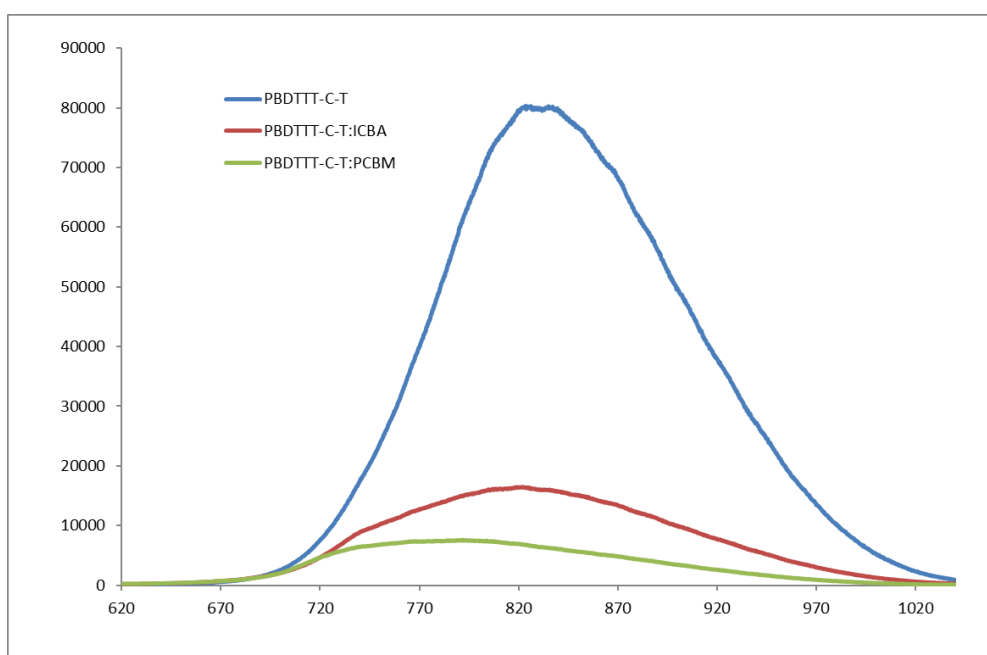


Figure 110 PL spectra of PBDTTT-C-T, PBDTTT-C-T: IC<sub>60</sub>BA and PBDTTT-C-T: PC<sub>70</sub>BM.

As it can be observed in Figura 48 in the case of CT there is a lot of recombine and therefore almost no efficiency. In the case of IC<sub>60</sub>BA the efficiency is higher than in CT but lower than PC<sub>70</sub>BM. With PC<sub>70</sub>BM there is a lot of dissociate.

## 4 Conclusion and Discussion

In this report the different characteristics and efficiency of an organic solar cell were discussed. However, stability was not discussed. The stability and the organic solar cell degradation are quite important properties of the solar cell. In addition, during the procedure for fabricating the device glass was used whereas in real live operations plastic can be more suitable due to its flexibility (Technical University of Denmark (DTU)).

The PCE of the device with blend of PBDTTT-C-T: PC<sub>70</sub>BM is observed to be higher than the one of the IC<sub>60</sub>BA.

According to the AFM test, the blend of PBDTTT-C-T: PC<sub>70</sub>BM has less roughness than the PBDTTT-C-T: IC<sub>60</sub>BA.

Per the optical absorption experiment, the blend of PBDTTT-C-T: PC<sub>70</sub>BM has higher absorption than the PBDTTT-C-T: IC<sub>60</sub>BA.

The blend of PBDTTT-C-T: PC<sub>70</sub>BM has more PL efficient and less recombine than the PBDTTT-C-T: IC<sub>60</sub>BA.

To sum up, if these measurements are considered, PBDTTT-C-T: PC<sub>70</sub>BM is observed to be a better blend material than PBDTTT-C-T: IC<sub>60</sub>BA.

The mesoscopic morphologies are strictly associated to the polymer–fullerene miscibility and to the polymer construction behaviour (Han Yan, 2013).

## 5 References

Han Yan, Denghua Li, Chang He, Zhixiang Wei, Yanlian Yang and Yongfang Li, 2013. *A material combination principle for highly efficient polymer solar cells investigated by mesoscopic phase heterogeneity*. RSC Publishing.

J. G. Sánchez, J. Ferré-Borrull, L. F. Marsal, J. Pallarès, V. S. Balderrama and M. Estrada, "Performance comparison of BHJ organic solar cells based on P3HT with PC70BM and ICBA," *2015 IEEE International Autumn Meeting on Power, Electronics and Computing (ROPEC)*, Ixtapa, 2015, pp. 1-4.

Z. Xiao, Q. Dong, Q. Wang, W. Tian, H. Huang and J. Huang, "Efficiency Enhancement in Polymer Solar Cells With a Polar Small Molecule Both at Interface and in the Bulk Heterojunction Layer," in *IEEE Journal of Photovoltaics*, vol. 5, no. 5, pp. 1408-1413, Sept. 2015.

Utzat, Hendrik; Dimitroy, Stoichko D , 2017, "Charge-Separation in Intermixed Polymer:PC70BM Photovoltaic Blends: Correlating Structural and Photophysical Length Scales as a Function of Blend Composition," *2017 JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY C*, vol 121, no. 18, pp.9790-9801, May 2017

Technical University of Denmark (DTU).

wikipedia foundation, s.f. *Wikipedia*. Available at:

[http://en.m.wikipedia.org/wiki/Organic\\_solar\\_cell#Single\\_layer](http://en.m.wikipedia.org/wiki/Organic_solar_cell#Single_layer)

Thin films technology laboratory (class notes).