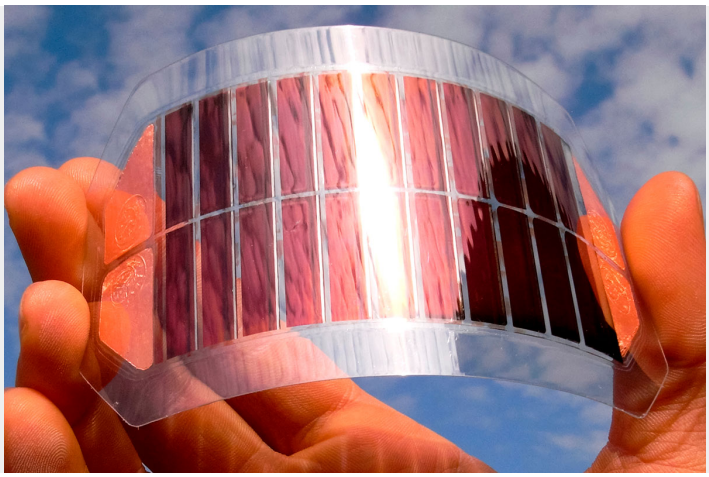
POLI(3-HEXILTIOFENO) EN CELDAS SOLARES ORGÁNICAS: SIMPLE, ESTABLE Y ASEQUIBLE

Posted on 27 febrero, 2020 by Marisol Guizado Rodriguez y Miriam Rangel Ayala



Category: Ciencia
Tag: Ciencias Exactas

El poli(3-hexiltiofeno) (P3HT) es un homopolímero semiconductor que debido a su relativa estabilidad bajo condiciones ambientales, alta cristalinidad, propiedades de transporte de carga aceptables y simplicidad estructural (Figura 1), ha sido ampliamente utilizado como material donador en celdas solares orgánicas .

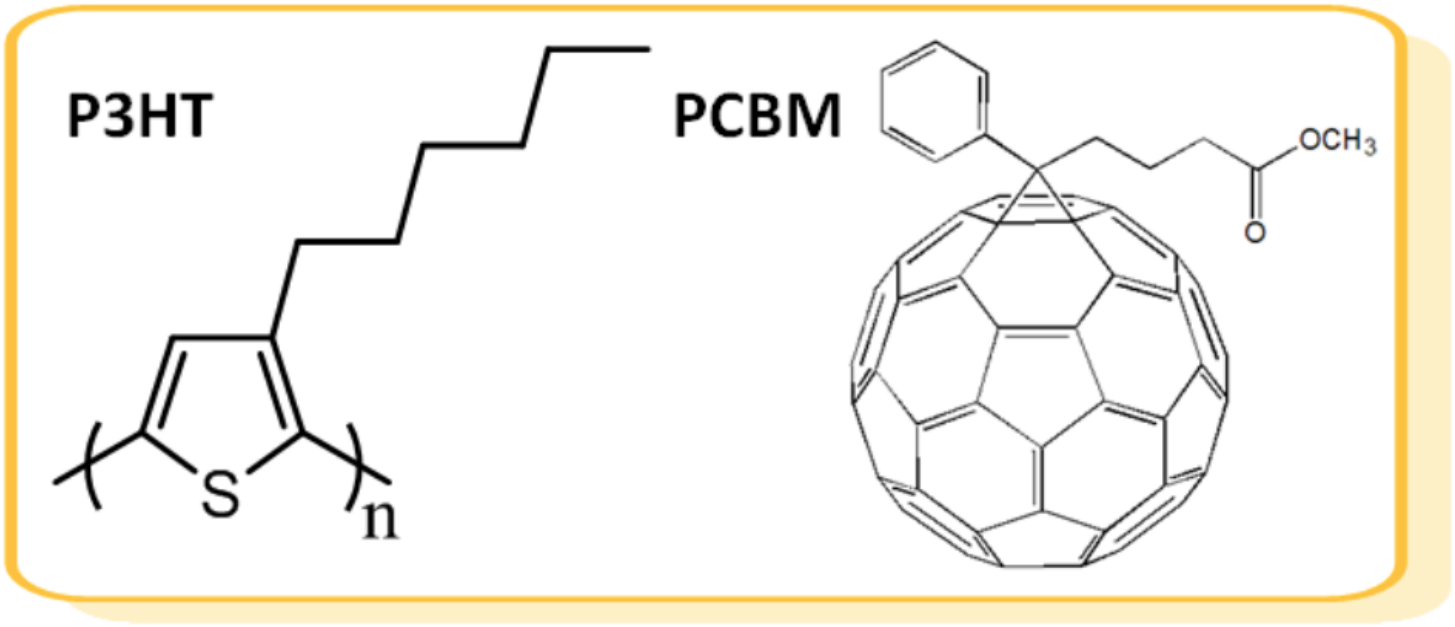


Figura 1. Estructura del P3HT y del aceptor fullereno PCBM.

El P3HT puede ser sintetizado por diversos métodos, sin embargo, los más comunes implican la generación de subproductos metálicos considerados como tóxicos; recientemente, la síntesis de polimerización por arilación directa se ha desarrollado como una vía ambientalmente amigable, viable para la producción a gran escala, con un menor número de pasos en la síntesis y de bajo costo para la fabricación de estos polímeros semiconductores. Aunque en sus inicios esta metodología fue limitada para la aplicación en OPVs (Orgánicos fotovoltaicos, por sus siglas en inglés), debido a que genera defectos de ramificaciones en la estructura polimérica (defectos beta), diversas investigaciones han demostrado que, bajo las condiciones adecuadas, se pueden generar polímeros de alta calidad estructural para su aplicación en estos dispositivos .

Las primeras celdas orgánicas consistían en una estructura de una sola capa alcanzando una eficiencia muy por debajo del 1%, lo que dio paso a estructuras bicapa o de heterounión plana, formadas por una capa de un material donador y otra de un aceptor, logrando una eficiencia cercana al 1%. Al inicio de la década de 1990, se demostró la transferencia efectiva del electrón de un polímero conjugado a un material fullereno (Figura 1) , lo que desplegó el estudio de múltiples grupos de investigación relacionados con las celdas orgánicas basadas en la mezcla polímero conductor-fullereno. En 1995, se propuso la estructura de heterounión de volumen (BHJ), en la cual se disuelve la mezcla binaria del donador y el aceptor en el mismo disolvente, formando una red bicontinua en la que se aumenta el área de contacto entre las fases y se mejora el transporte de las cargas . Una desventaja de esta estructura con polímeros semiconductores es que las capas deben ser muy delgadas (100 nm) para conseguir la colección de cargas, lo que limita la absorción. Con la

finalidad de sobrepasar esta limitante, se diseñaron celdas de estructura tándem que consisten en múltiples capas con absorciones complementarias, mejorando así las PCEs (hasta 17.3 %). Debido a la complejidad de estas últimas, surgieron nuevas propuestas, como las celdas ternarias, que consisten en una mezcla BHJ de tres componentes. La Figura 2 muestra las diferentes estructuras de los dispositivos.

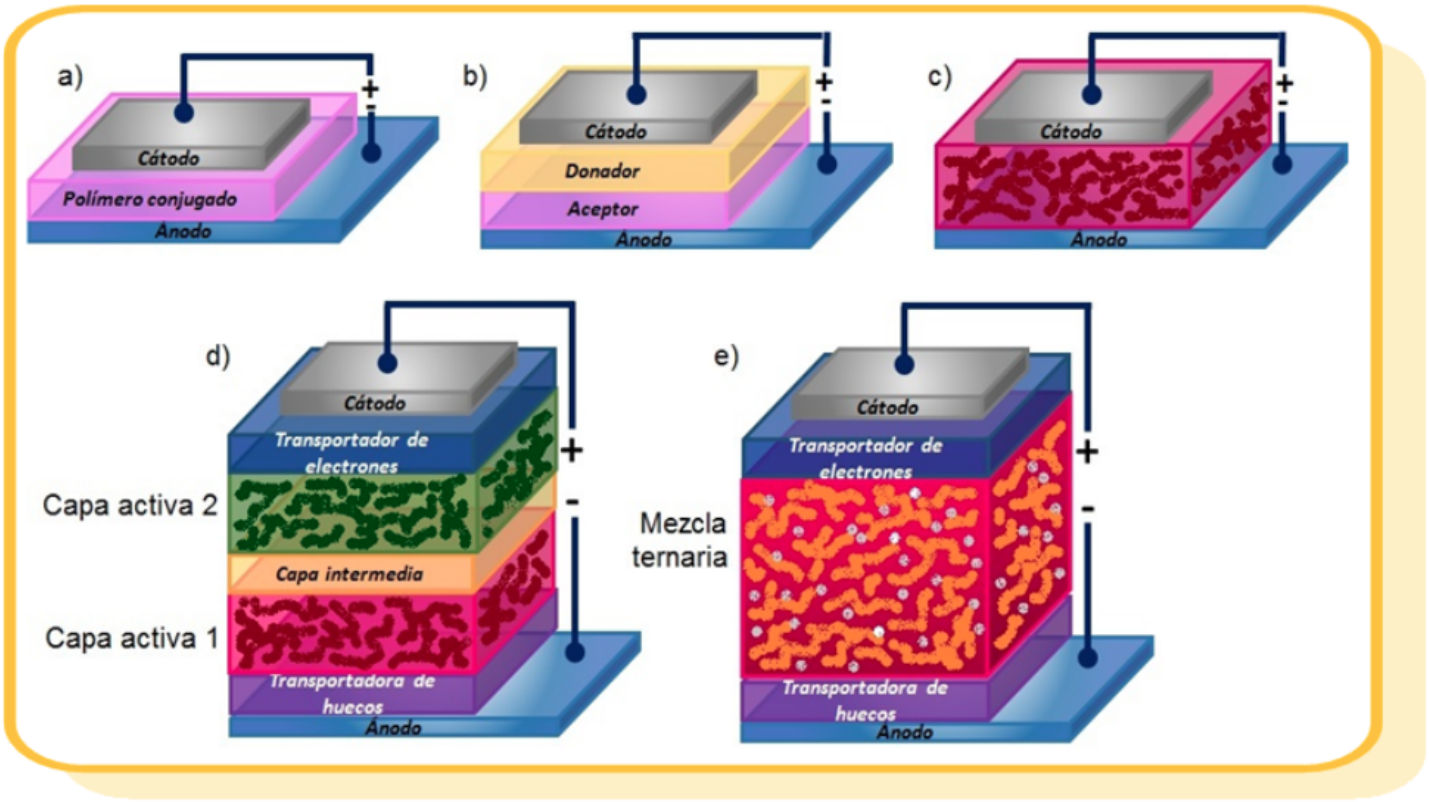


Figura 2. Estructuras de OPVs: a) monocapa, b) bicapa y BHJ, c) binaria. d) tándem, y e) ternaria.

La capa activa de una estructura BHJ está formada por la mezcla de un material electrodonador y uno electroaceptor; en esta capa se lleva a cabo el proceso fotovoltaico, es decir, la transformación de la energía solar en electricidad. Los principales componentes de las celdas orgánicas (Figura 3) son:

1. Sustrato recubierto con un material transparente y conductivo (usualmente ITO)
2. Capa delgada transportadora de huecos (generalmente PEDOT: PSS)
3. Capa activa
4. Capa delgada transportadora de electrones (por ejemplo, PFN)
5. Cátodo metálico

El mecanismo de funcionamiento de estos dispositivos se puede resumir en cuatro etapas básicas;

primero, el polímero donador absorbe un fotón generando la excitación de un electrón hacia el aceptor y se forma un par electrón-hueco denominado excitón; la segunda etapa consiste en la difusión de este excitón hasta la interfase del donador-aceptor en donde se separa en huecos y electrones libres; posteriormente, estas cargas libres se transportan por separado en los dominios del polímero donador y el fullereno; finalmente, los huecos se colectan en el ánodo y los electrones en el cátodo, convirtiendo así la radiación solar en electricidad.

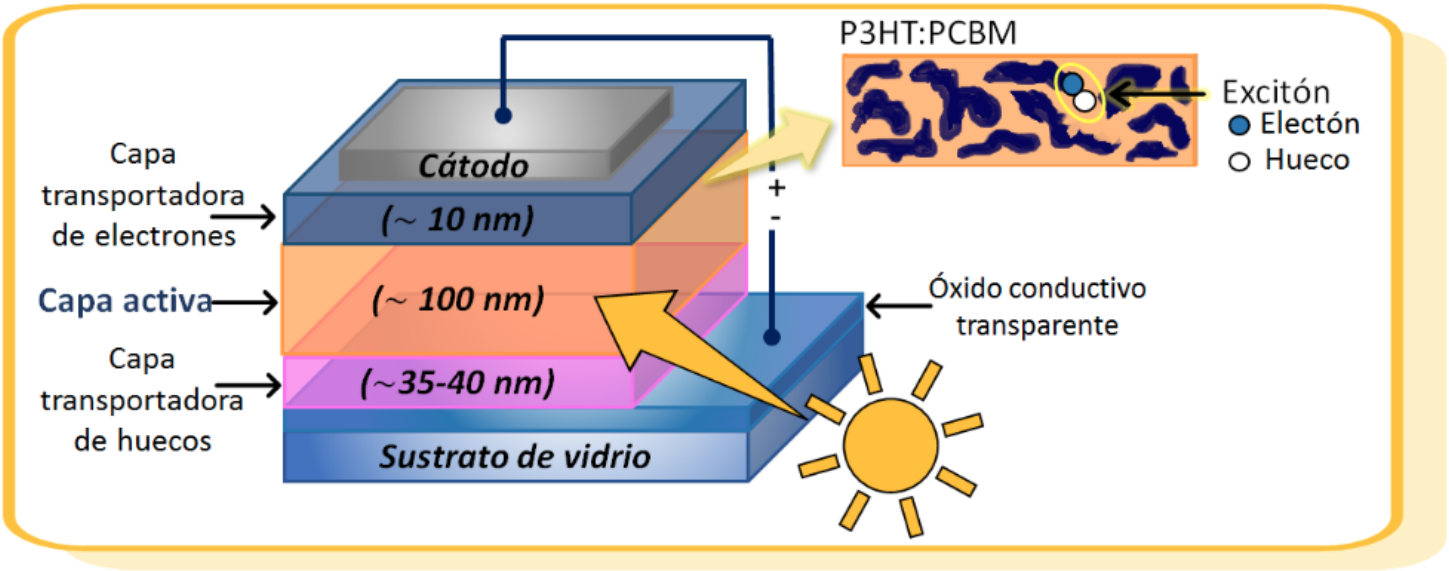


Figura 3. Componentes de las celdas solares orgánicas.

Las más altas eficiencias de conversión empleando el P3HT con el aceptor PCBM son de 4 % hasta 5 % en algunos casos y el promedio general reportado es de alrededor de 3.5 %. En nuestro grupo de investigación alcanzamos una eficiencia máxima de 3.6 % en celdas BHJ utilizando un P3HT de bajo peso molecular (~ 5 kDa), sin defectos estructurales (sin defectos beta y 94 % de regio-regularidad) y alta cristalinidad (tamaño de cristal de 24 nm, orientación edge on); este polímero se obtuvo a través del ventajoso método antes mencionado de arilación directa, en el laboratorio de Química de Nuevos Materiales del Centro de Investigación en ingeniería y Ciencias Aplicadas (CIICAp). Se probaron diferentes condiciones de reacción, y mediante un análisis estructura-propiedad-eficiencia en OPVs, se detectaron las condiciones idóneas en la síntesis (0.05 y 0.075 % mol de catalizador) y las propiedades estructurales que propiciaron los mejores desempeños. Además, utilizando este método de síntesis de un solo paso, se obtuvo un ahorro económico de aproximadamente 70 % con respecto al costo de venta de un P3HT de Sigma Aldrich. En conjunto con el Grupo de Propiedades Ópticas de la Materia (GPOM) del Centro de Investigaciones en Óptica A.C. (CIO), se elaboraron los dispositivos fotovoltaicos con la innovación de que fueron fabricados sin atmósfera controlada y utilizando como cátodo una mezcla eutéctica (32.5 % Bi, 51 % In y 16.5 % Sn) llamada Field´s metal , lo

que implica también dispositivos de bajo costo.

Cuando se emplean otros aceptores fullerenos o moléculas de bajo peso molecular diferentes al fullereno se han reportado eficiencias superiores a 6 % y hasta casi 7% con modificaciones que mejoran el desempeño de una de las otras capas. Pese a su limitada eficiencia de conversión, el P3HT es reconocido como uno de los polímeros semiconductores de costo más efectivo para su aplicación en OPVs , adicionalmente, un análisis teórico sugiere que el P3HT podría alcanzar una eficiencia de hasta 20 % si se encuentra un aceptor ideal , por lo que sigue siendo un polímero atractivo en este campo.

Los polímeros semiconductores como el P3HT, también se caracterizan por ser solubles en disolventes orgánicos, ventaja que es aprovechada para su impresión sobre los sustratos flexibles mediante un método conocido como impresión roll to roll ideal para la fabricación de OPVs en gran escala.

En contraste con las celdas solares de silicio, los materiales OPVs tienen una estructura flexible que puede ser colocada sobre prácticamente cualquier superficie; otro de sus atractivos atributos es que son dispositivos muy ligeros; adicionalmente, son semitransparentes por lo que pueden ser instalados sobre cristales de ventanas; su posibilidad de múltiples colores añade a su funcionalidad un diseño decorativo permitiendo una amplia gama de aplicaciones que va desde mochilas, automóviles, cristales de edificios y hasta techos (Figura 4).

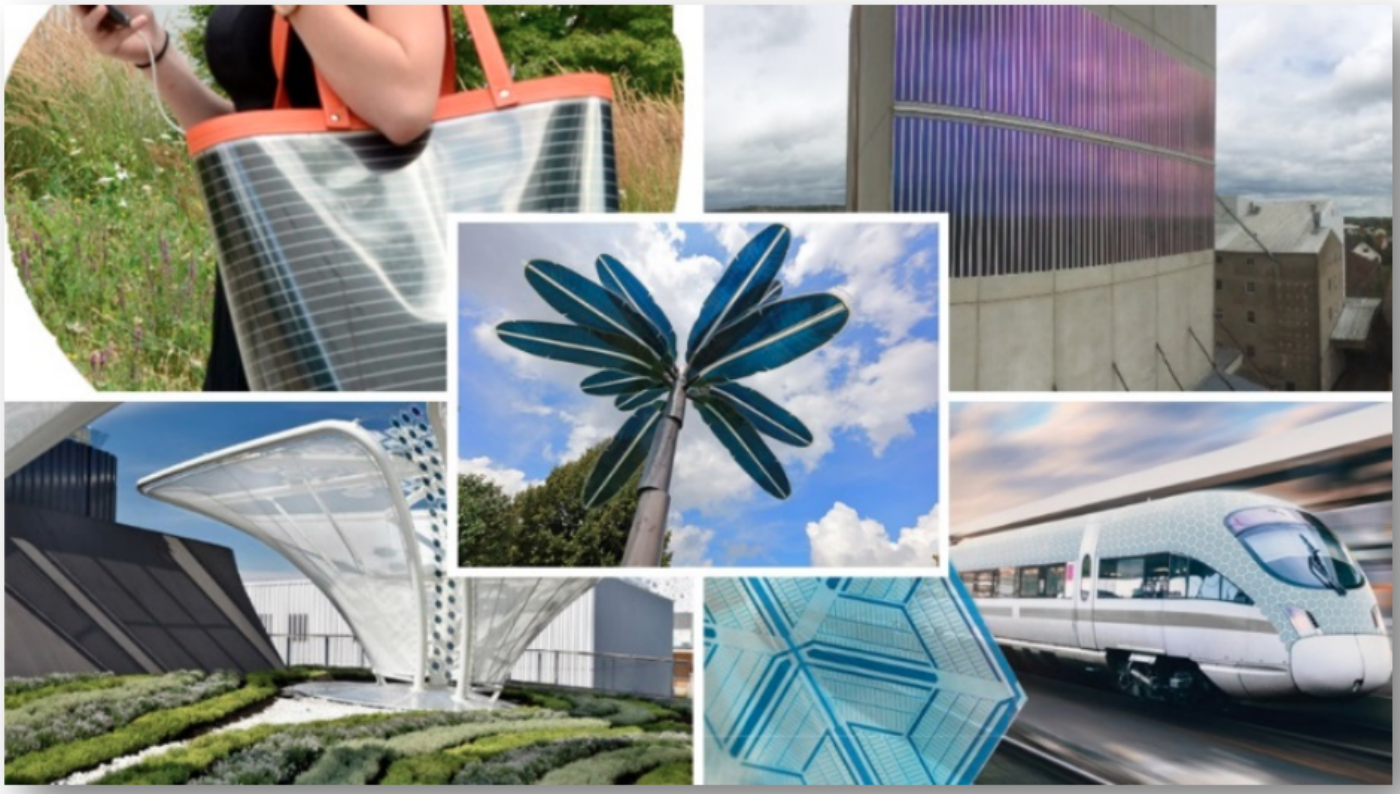


Figura 4. Aplicaciones de OPVs Imágenes tomadas de http://www.opvius.com, https://infinitypv.com, https://www.heliatek.com

Las celdas OPVs tienen un futuro con alto potencial de éxito en la obtención de energía eléctrica a partir de una fuente renovable; actualmente existe una serie de empresas que producen y comercializan OPVs como las compañías alemanas OPVIUS GmbH y Heliatek, la danesa InfinityPV, la americana Lucintech Inc., entre otras. Por otra parte, la compañía francesa Engie instaló las primeras celdas solares orgánicas en la CDMX como parte de su campaña Harmony que busca implementar energía limpia en las grandes urbes . En México, el grupo de investigación GPOM del CIO, ha sido líder en el diseño y fabricación de prototipos de paneles solares basados en materiales orgánicos .

El desarrollo de este tipo de tecnologías es fascinante ya que involucra el diseño, síntesis y caracterización de nuevos materiales; entre ellos polímeros semiconductores como el P3HT, además del diseño y fabricación de nuevas estructuras y materiales de las celdas solares. Aún se requieren grandes esfuerzos en la investigación de los componentes de esta tecnología de tercera generación para lograr costos accesibles que permitan su implementación a gran escala. Actualmente, en México, la comunidad científica y tecnológica está participando para lograr este fin.

C²

Referencias:

Y. Wu, H. Bai, Z. Wang, P. Cheng, S. Zhu, Y. Wang, W. Mac y X. Zhan, "A planar electron acceptor for efficient polymer solar cells," Energy Environ. Sci., vol. 8, p. 3215-3221, 2015.

N. S. Gobalasingham, R. M. Pankow, S. Ekiza y B. C. Thompson, "Evaluating structure–function relationships toward three-component conjugated polymers via direct arylation polymerization (DArP) for Stille convergent solar cell performance," J. Mater. Chem. A, vol. 5, p. 14101–14113, 2017.

N. S. Sariciftci, L. Smilowitz, A. J. Heeger y F. Wudl, "Photoinduced electron transfer from a conducting polymer to buckminsterfullerene," Science, vol. 258, nº 5087, p. 1474-1476, 1992.

P. R. Berguer y M. Kim, "Polymer solar cells: P3HT:PCBM and beyond," J. Renew. Sustain. Energy, vol. 10, p. 013508, 2018.

L. Meng, Y. Zhang, X. Wan, C. Li, X. Zhang, Y. Wang, X. Ke, Z. Xiao, L. Ding, R. Xia, H. L. Yip, Y. Cao y Y. Chen, "Organic and solution-processed tandem solar cells with 17.3% efficiency," Science, vol. 361, p. 1094-1098, 2018.

D. Romero-Borja, J. L. Maldonado, O. Barbosa-García, M. Rodríguez, A. D. León, S. Fernández y E. Pérez-Gutiérrez, "Organic solar cells based on graphene derivatives and eutectic alloysvacuum-free deposited as top electrodes," Carbon, vol. 134, p. 301-309, 2018.

N. S. Gobalasingham y B. C. Thompson, "Direct arylation polymerization: A guide to optimal conditions for effective conjugated polymers," Prog. Polym. Sci., vol. 83, p. 135–201, 2018.

N. Li, I. McCulloch y C. J. Brabec, "Analyzing the efficiency, stability and cost potential for fullerene-free organic photovoltaics in one Figure of Merit," Energy Environ. Sci., vol. 11, p. 1355-1361, 2018.

. Available: https://www.forbes.com.mx/engie-instala-celdas-solares-organicas-en-ciudad-de-mexico/

. Available: http://www.cyd.conacyt.gob.mx/?p=articulo&id=461