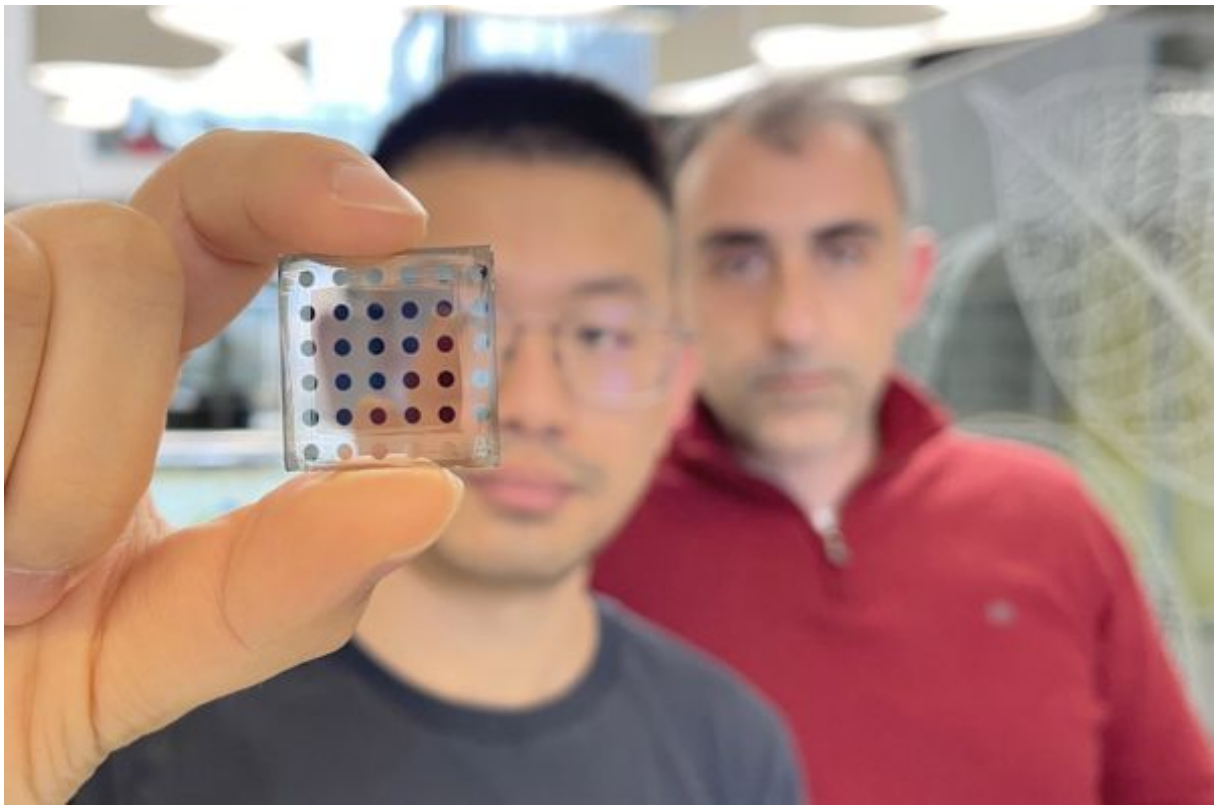


El desordre induit dels cations en cel·lules solars ultrafines aconsegueix un nou record d'eficiencia

Un equip internacional d'investigadors de l'ICFO, de l'University College London i de l'Imperial College London presenta una nova tecnica per a obtenir cel·lules solars inorganiques amb un dissen intern desordenat que permeten una eficiencia de conversi d'energia sense precedents.

February 14, 2022

Generalment col·locades sobre teulades i distribuides a granges solars, els panells solars e cel·lules de silici son, de moment, un dels sistemes mes eficients per generar electricita a partir de la llum del sol, pero la seva fabricacio acostuma a ser molt costosa, amb un lt consum energetic, a mes de ser pesades i voluminoses. Les possibles alternatives de cel·l les solars d'ultrafines presentades fins ara tampoc no han resolt el problema de produccio ja que estan contenen elements toxics, com el plom o cadmi, o escassos, com l'indi o tel·

uri. En la cursa per trobar noves tecnologies per tal de desenvolupar sistemes fotovoltai
s de capa prima les cel·lules solars basades en nanocristalls d'Ag_2BiS_3 han emergit partit amb
forca. Son cel·lules compostes per elements no toxics i abundants, produides a baixe
temperatures i mitjancant tecniques de processament de baix cost. Aquests elements e
poden integrar en cel·lules solars ultrafines i han demostrat ser molt estables, evitant aixi
a seva degradacio a llarg termin
. L'any 2016, en el marc d'una investigacio liderada pel Prof. ICREA de l'ICFO Gerasim
s Konstantatos, es va aconseguir fabricar una cel·lula solar amb un gruix de nomes 35 nm f
ta amb un material semiconductor absorbent basat en nanocristalls d'$AgBiS_2$ es va sintetitzar a
temperatures molt baixes (100ºC) (un ordre de magnitud inferior a les fabricades amb silici)
es va dissenyar la nanoescala, mitjancant un proces de deposicio capa a capa. Aquest
solucio representava una alternativa i¿½verdai¿½ prometedora en comparacio al silici,
ot i que encara no es va assolir un rendiment suficientment rellevant per a la
seva comercialitz
cio. En els darrers anys, molts estudis han buscat formes i tecniques per millorar l'efici
ncia d'aquest tipus de cel·lules i han trobat que el gruix optim d'aquests semicond
ctors absorbents esta estretament relacionat amb els seus coeficients d'absorcio. L'objectiu
ultim de tot aquest esforc seria trobar una cel·lula solar ultrafina capac de tenir una alta efi
iencia d'absorcio, una eficiencia quantica i un maxim rendiment, aconseguint al matei
temps reduir-ne el cost, el pes i la fabricacio. Tot i aixo, en el proces d'intentar dese
volupar cel·lules solars de capa ultrafina, el fet de treballar amb estructures mes primes per
absorbir la llum n'incrementa el cost i afegeix complexitat al problema, perque com mes
prima es l'estructura, mes dificil es aconseguir una absorcio d'energi
optima. Per tal de superar aquest repte, els investigadors de l'ICFO **Yonghui Wang**, **Ignasi Burgues-Ceballos**, en col·laboracio amb el Prof**. David Scanlon** de l'University College London (UCL), el Prof. **Aron Walsh** de l'Imperial College London i Sean Kavanagh (UCL & Imperial), dirigits per el Prof. ICREA de l'ICFO **Gerasimos Konstantatos**, han fet un salt considerable obtenint un resultat innovador. En un nou estudi publicat a la revista Nature Photonics presenten una **tecnica nova per a la fabricacio** d'aquestes **cel·lules solars basades en AgBiS**
que permetuns **coeficients d'absorcio mes** alts comparats amb qualsevol altre material fotovoltaic utilitzat **fins ara**.

El desordre de cations

A l'estudi, els investigadors van dissenyar, de manera molt habil, una capa de nanocristalls dins de la cel·lula solar amb una tecnica nova, anomenada **enginyeria del desordre de cations** dels nanocristalls d'AgBiS2. Mitjancant un proces de coccio suau dels nanocristalls d'AgBiS2 van poder ajustar les posicions atomiques dels cations dins de l'estructura cristal·lina
d'aquesta manera van forcar un**intercanvi de lloc entre els cations** obtenint al mateix temps una **distribucio homogenia dels mateixos cations**. Aplicant diferents temperatures de coccio per aconseguir aixi diferents distribucions de cations a la xarxa cristal·lina, van pode

demostrar que aquest material semiconductor presenta un**coeficient d'absorcio entre 5 i 10 vegades mes gran que qualsevol altre material** actualment utilitzat en tecnologia fotovoltaica i fins i tot al llarg d'un major rang espectral que va des de **l'ultravioleta (400nm) fins a l'infraroig (1000nm).** Per aconseguir aquest resultat, els investigadors van haver de dissenyar una nova tecnica de quimica de superficie per a aquest nou material amb l'objectiu de preservar la qualitat optoelectronica dels nanocristalls despres de la coccio. Per fer aixo, els autors de l'estudi van utilitzar acid mercaptopropionic com a lligand de passivacio per a conservar la qualitat del material durant la coccio.

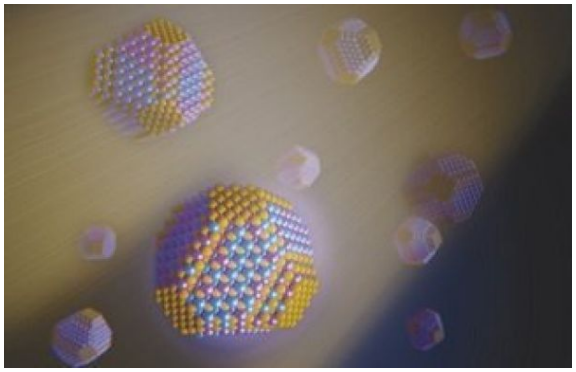
Per predir i verificar les hipotesis del treball, els autors van realitzar diferents calculs basats en la Teoria de Densitat Funcional que van confirmar l'evidencia experimental. **Sean Kavanagh**, coautor de l'estudi i investigador d'UCL i de l'Imperial College London, explica i¿½La importancia del desordre atomic a les cel·lules solars inorganiques es actualmen un tema candent de discussio en aquest camp d'estudi. Les nostres investigacions teorique de la termodinamica i els efectes optics i electronics del desordre de cations en l' Ag_2BiI_5 van revelar tant l'accessibilitat a la redistribucio de cations com el seu efecte sobre les propietats optoelectroniques del material. Els nostres calculs van mostrar que una distribucio homogenia de cations produiria un rendiment optim de les cel·lules solars en aquest materials desordenats, cosa que corrobora els descobriments experimentalsi¿ ?. Amb aquests resultats, l'equip d'investigadors va construir una cel·lula solar ultraf na, processada en solucio, i va dipositar els nanocristalls d'Ag_2BiI_5 capa per capa sobre ITO/Glass, un dels substrats d'oxid transparent conductors mes utilitzats avui dia Posteriorment, van recobrir els dispositius amb una solucio de politriarilamina i, quan va il·luminar el dispositiu amb llum solar artificial, van registrar una**eficiencia de conversio d'energia solar a electricitat** en exces al 9% per a un dispositiu amb un gruix total inferior als 100 nanometres (nm), entre 10 i 50 vegades mes prim que les tecnologies fotovoltaiques ultrafines actuals i 1000 vegades mes prim que les cel·lules fotovoltaiques de silici Un dels millors dispositius fabricats per l'equip va ser enviat a a Newport(EUA), a un laborator de calibratge fotovoltaic (PV) acreditat, que va certificar una eficiencia de conversio de 8,85%, sota il·luminacio solar completa d'AM 1,5G. Tal i com comenta l'investigador de l'IC O i primer autor de l'estudi **Yongjie Wang**: i¿½Encara que notem un enfosquiment fort de l s nostres pel·licules primes despres d'una lleu coccio i degut a l'augment de l'absorcio, al principi va ser un repte fabricar uns dispositius tan prims. Despres d'aconseguir controlar el proces i l'optimitzacio de la cel·lula de manera completa, inclosa l'optimitzacio de les c pes de transport d'electrons i buits, vam trobar finalment una estructura altament reproduible per a cel·lules solars eficients amb una estabilitat millorada. Es realment emocionant veur que un dispositiu de 30 nm ofereix una densitat de corrent de curtcircuit tan alt, de fins a 27 mA/cm^2, i una eficiencia de fins al 9%.i¿ ? Finalment, com subratlla el Prof. ICREA de l'ICFO **Gerasimos Konstantatos**, i¿½els dispositi s fabricats per a aquest estudi han establert un**record entre les cel·lules solars inorganiques**

en termes d'estabilitat, factor de forma i rendiment, fabricades de manera i¿½verdai¿½ i a baixa temperatura, amb metodes de processament en solucio. L'enginyeria del desordr de cations en nanocristalls d'AgBiS2 per a sistemes multinaris ha demostrat oferir un coeficient d'absorcio superior a qualsevol altre material fotovoltaic utilitzat fins ara, fet que permet aconseguir **dispositius fotovoltaics absorbents extremadament prims i altament eficients**. Estem molt contents amb els resultats i continuarem avancant en aquesta linia d'estudi per explorar i explotar les seves intrigants propietats per a l'energia fotovoltaica aixi com per altres dispositius optoelectronicsi¿?

. ******

* Aquest estudi ha estat possible gracies al financament aportat per la **Fundacio Joan Ribas Araquistain (FJRA)**, aixi com el provinent de fons competitius europeus, com ara els Euopean Research Council (ERC).

###



Il·lustracio artistica de la distribucio homogenia de cations aconseguida dins dels nanocristalls AgBiS2. ©ICFO / Scixel.



Imatge de l'esquerra: Gerasimos Konstantatos, Yongjie Wang (ICFO) i Sean Kavanaugh (UCL/ICL)