

## El desordre induït dels cations en cel·lules solars ultrafines aconsegueix un nou record d'eficiència

Un equip internacional d'investigadors de l'ICFO, de l'University College London i de l'Imperial College London presenta una nova tècnica per a obtenir cel·lules solars inorgàniques amb un disseny intern desordenat que permeten una eficiència de conversió d'energia sense precedents.

February 14, 2022

---

Generalment col·locades sobre teulades i distribuïdes a granges solars, els panells solars i cel·lules de silici són, de moment, un dels sistemes més eficients per generar electricitat a partir de la llum del sol, però la seva fabricació acostuma a ser molt costosa, amb un alt consum energètic, a més de ser pesades i voluminoses. Les possibles alternatives de cel·lules solars d'ultrafines presentades fins ara tampoc no han resolt el problema de producció ja que estan contenen elements tòxics, 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 fotovoltaics de capa prima les cel·lules solars basades en nanocristalls d'AgBiS<sub>2</sub> han emergit partit amb força. Son cel·lules compostes per elements no tòxics i abundants, produïdes a baixa temperatura i mitjançant tècniques de processament de baix cost. Aquests elements es poden integrar en cel·lules solars ultrafines i han demostrat ser molt estables, evitant així a seva degradació a llarg termini.

L'any 2016, en el marc d'una investigació liderada pel Prof. ICREA de l'ICFO Gerasimos Konstantatos, es va aconseguir fabricar una cel·lula solar amb un gruix de només 35 nm feta amb un material semiconductor absorbent basat en nanocristalls d'AgBiS<sub>2</sub>. Es va sintetitzar a temperatures molt baixes (100°C) (un ordre de magnitud inferior a les fabricades amb silici) es va dissenyar la nanoescala, mitjançant un procés de deposició capa a capa. Aquesta solució representava una alternativa *1/2*verda*1/2* prometedora en comparació al silici, tot i que encara no es va assolir un rendiment suficientment rellevant per a la seva comercialització.

En els darrers anys, molts estudis han buscat formes i tècniques per millorar l'eficiència d'aquest tipus de cel·lules i han trobat que el gruix òptim d'aquests semiconductors absorbents està estretament relacionat amb els seus coeficients d'absorció. L'objectiu últim de tot aquest esforç seria trobar una cel·lula solar ultrafina capaç de tenir una alta eficiència d'absorció, una eficiència quàntica i un màxim rendiment, aconseguint al mateix temps reduir-ne el cost, el pes i la fabricació. Tot i això, en el procés d'intentar desenvolupar cel·lules solars de capa ultrafina, el fet de treballar amb estructures més primes per absorbir la llum n'incrementa el cost i afegeix complexitat al problema, perquè com més prima és l'estructura, més difícil és aconseguir una absorció d'energia òptima. Per tal de superar aquest repte, els investigadors de l'ICFO **Yongjie Wang, Ignasi**

**Burgues-Ceballos**, en col·laboració 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 **tècnica nova per a la fabricació** d'aquestes **cel·lules solars basades en AgBiS<sub>2</sub> que permet uns coeficients d'absorció més alts** comparats amb qualsevol altre material fotovoltaic utilitzat  **fins ara**.

### **El desordre de cations**

A l'estudi, els investigadors van dissenyar, de manera molt hàbil, una capa de nanocristalls dins de la cel·lula solar amb una tècnica nova, anomenada **enginyeria del desordre de cations** dels nanocristalls d'AgBiS<sub>2</sub>. Mitjançant un procés de cocció suau dels nanocristalls d'AgBiS<sub>2</sub> van poder ajustar les posicions atòmiques dels cations dins de l'estructura cristal·lina d'aquesta manera van forçar un **intercanvi de lloc entre els cations** obtenint al mateix temps una **distribució homogènia dels mateixos cations**. Aplicant diferents temperatures de cocció per aconseguir així diferents distribucions de cations a la xarxa cristal·lina, van poder

demostrar que aquest material semiconductor presenta un **coeficient d'absorció entre 5 i 10 vegades més 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 tècnica de química de superfície per a aquest nou material amb l'objectiu de preservar la qualitat optoelectrònica dels nanocristalls després de la cocció. Per fer això, els autors de l'estudi van utilitzar àcid mercaptopropiònic com a lligand de passivació per a conservar la qualitat del material durant la cocció.

Per predir i verificar les hipòtesis del treball, els autors van realitzar diferents càlculs basats en la Teoria de Densitat Funcional que van confirmar l'evidència experimental. **Sean Kavanagh**, coautor de l'estudi i investigador d'UCL i de l'Imperial College London, explica: «La importància del desordre atòmic a les cel·lules solars inorgàniques és actualment un tema candent de discussió en aquest camp d'estudi. Les nostres investigacions teòriques de la termodinàmica i els efectes òptics i electrònics del desordre de cations en l'AgBi<sub>2</sub>S<sub>3</sub> van revelar tant l'accessibilitat a la redistribució de cations com el seu efecte sobre les propietats optoelectròniques del material. Els nostres càlculs van mostrar que una distribució homogènia de cations produiria un rendiment òptim de les cel·lules solars en aquest material desordenat, cosa que corrobora els descobriments experimentals».

«Amb aquests resultats, l'equip d'investigadors va construir una cel·lula solar ultrafina, processada en solució, i va dipositar els nanocristalls d'AgBi<sub>2</sub>S<sub>3</sub> per capa sobre ITO/Glass, un dels substrats d'oxid transparent conductors més utilitzats avui dia. Posteriorment, van recobrir els dispositius amb una solució de politriarilamina i, quan va il·luminar el dispositiu amb llum solar artificial, van registrar una **eficiència de conversió d'energia solar a electricitat** en excés al 9% per a un dispositiu amb un gruix total inferior als 100 nanometres (nm), entre 10 i 50 vegades més prim que les tecnologies fotovoltaïques ultrafines actuals i 1000 vegades més prim que les cel·lules fotovoltaïques de silici».

Un dels millors dispositius fabricats per l'equip va ser enviat a a Newport (EUA), a un laboratori de calibratge fotovoltaic (PV) acreditat, que va certificar una eficiència de conversió de 8,85%, sota il·luminació solar completa d'AM 1,5G. Tal i com comenta l'investigador de l'ICFO i primer autor de l'estudi **Yongjie Wang**: «Encara que notem un enfosquiment fort de les nostres pel·lícules primes després d'una lleu cocció i degut a l'augment de l'absorció, al principi va ser un repte fabricar uns dispositius tan primers. Després d'aconseguir controlar el procés i l'optimització de la cel·lula de manera completa, inclosa l'optimització de les capes de transport d'electrons i buits, vam trobar finalment una estructura altament reproducible per a cel·lules solars eficients amb una estabilitat millorada. És realment emocionant veure que un dispositiu de 30 nm ofereix una densitat de corrent de curtcircuit tan alt, de fins a 27 mA/cm<sup>2</sup>, amb una eficiència de fins al 9%».

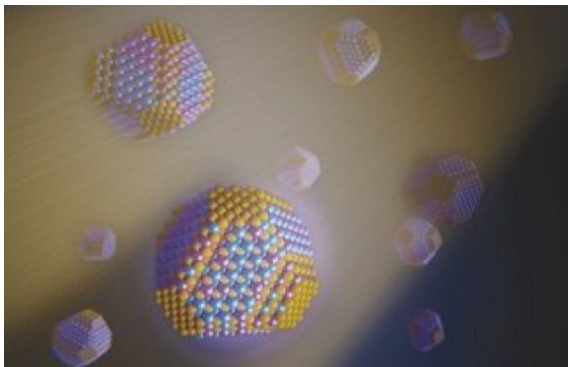
Finalment, com subratlla el Prof. ICREA de l'ICFO **Gerasimos Konstantatos**, «els dispositius fabricats per a aquest estudi han establert un **record entre les cel·lules solars inorgàniques**».

en termes d'estabilitat, factor de forma i rendiment, fabricades de manera i  $\frac{1}{2}$ verdai  $\frac{1}{2}$  i a baixa temperatura, amb mètodes de processament en solució. L'enginyeria del desordre de cations en nanocristalls d'AgBiSe a sistemes multinaris ha demostrat oferir un coeficient d'absorció superior a qualsevol altre material fotovoltaic utilitzat fins ara, fet que permet aconseguir **dispositius fotovoltaics absorbents extremadament prim i altament eficients**. Estem molt contents amb els resultats i continuarem avançant en aquesta línia d'estudi per explorar i explotar les seves intrigants propietats per a l'energia fotovoltaica així com per altres dispositius optoelectronics?

. \*\*\*\*\*

\* Aquest estudi ha estat possible gràcies al finançament aportat per **Fundació Joan Ribas Araquistain (FJRA)**, així com el provinent de fons competitius europeus, com ara els European Research Council (ERC).

###



Il·lustració artística de la distribució homogènia de cations aconseguida dins dels nanocristalls AgBiS<sub>2</sub>.  
©ICFO / Scixel.



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