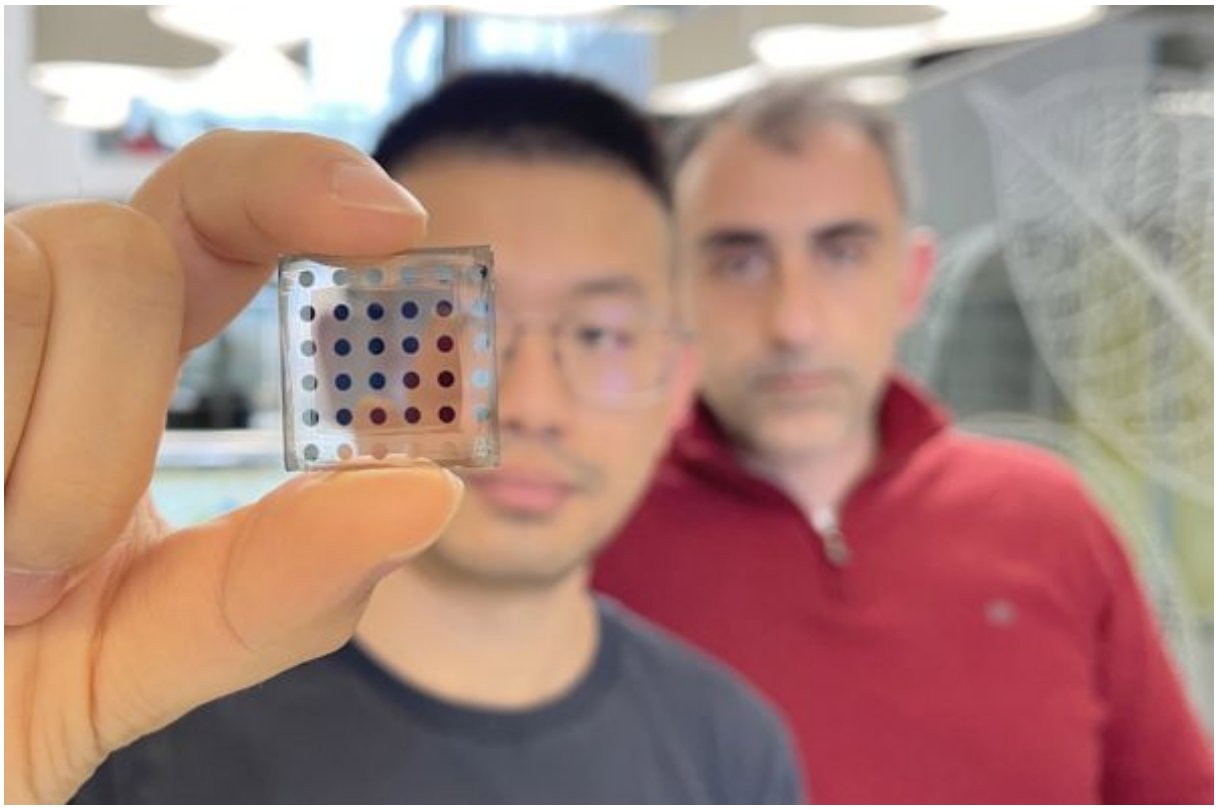


El desorden inducido de los cationes en celulas solares ultrafinas logra un nuevo record de eficiencia

Un equipo internacional de investigadores del ICFO, del University College de de Londres (UCL) y del Imperial College de Londres presentan una nueva tecnica para obtener celulas solares inorganicas con un diseno interno desordenado que logra una eficiencia de conversion de energia sin precedentes

February 14, 2022

Colocados generalmente sobre tejados y distribuidas en granjas solares, los paneles solares de celulas de silicio son, de momento, uno de los sistemas mas eficientes para generar electricidad a partir de la luz solar. Pero su fabricacion tiende a ser costosa, con un alto consumo energetico, ademas de ser pesados y voluminosos. Las posibles alternativas de celulas solares ultra-finas presentadas hasta ahora tampoco han resuelto el problema ya que contienen elementos toxicos, como el plomo o cadmio, o escasos, como el indio o telurio. En la busqueda de nuevas tecnologias para desarrollar sistemas fotovoltaicos delgados, las

celulas solares basadas en nanocristales de AgBiS2 han emergido con fuerza. Son celulas compuestas por elementos no toxicos y abundantes, producidas a bajas temperaturas y con tecnicas de procesamiento de bajo coste. Estos elementos pueden integrarse en celulas solares ultra-finas y han demostrado ser muy estables, evitando asi su degradacion a largo plazo.

En 2016, en el marco de una investigacion liderada por el Prof. ICREA del ICFO Gerasimos Konstantatos se logro fabricar una celula solar de 35 nm de espesor y con una eficiencia de alrededor del 6%. Esta celula estaba hecha con un material semiconductor absorbente basado en nanocristales de AgBiS2. Se sintetizo a temperaturas muy bajas (100ºC) (un orde de magnitud inferior a la temperatura en la que se fabrican las celulas de silicio) y se diseno la nanoescala, mediante un proceso de deposicion capa-por-capa. Esta solucio representaba una alternativa i¿½verdei¿½ prometedora frente al silicio aunque aun o se consiguio lograr un rendimiento lo suficientemente relevante para su comercializa ion. En los ultimos anos, muchos estudios han buscado formas y tecnicas de mejor r el rendimiento de este tipo de celulas y han encontrado que el espesor optimo de stos semiconductores absorbentes esta estrechamente relacionado con sus coeficient s de absorcion. El objetivo de todo este esfuerzo es encontrar una celula solar ultra-fina co una alta eficiencia de absorcion, una eficiencia cuantica y un maximo rendimiento, reducien o al mismo tiempo su coste, peso y fabricacion. Sin embargo, en el proceso de int ntar desarrollar celulas solares ultra-finas, el hecho de trabajar con estructuras complejas para atrapar la luz incrementa el coste y anade complejidad al problema. Hay que tene que cuenta que cuanto mas delgada es la estructura, mas dificil es obtener una absorci n de energia op

ima. Para salvar este desafio, los investigadores del ICFO **Yongjie Wang**, **Ignasi Burgues-Ceballos**, en colaboracion con el Prof. **David Scanlon** del University College London, el Prof. **Aron Walsh** del Imperial College London y **Sean Kavanagh** (UCL & Imperial), dirigidos por el Prof. ICREA del ICFO **Gerasimos Konstantatos**, han logrado dar un salto considerable consiguiendo un resultado innovador. En un nuevo estudio publicado en Nature Photonics, presentan una **nueva tecnica para la fabricacion** de estas **celulas solares basadas en AgBiS2** con unos **coeficientes de absorcion mas altos** comparados con cualquier otro material fotovoltaico utilizado **hasta ahora**.

Desorden de Cationes

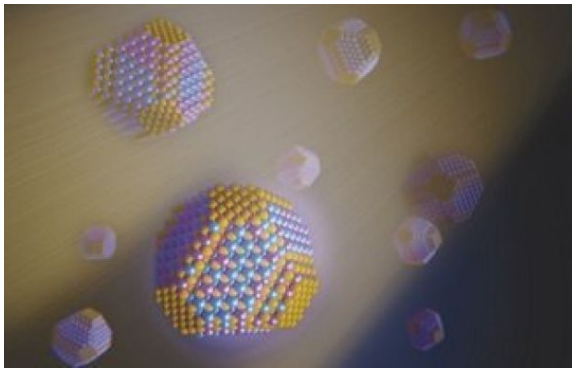
En el estudio, los investigadores disenaron, de manera muy habil, una capa de nanocristales en el interior de la celula solar con una nueva tecnica, llamada **ingenieria del desorden de cationes**. Mediante un proceso de coccion suave de los nanocristales de AgBiS2, ajustaron las posiciones atomicas de los cationes dentro de la red cristalina. De esta manera, forzaron el intercambio de lugar entre los cationes obteniendo una distribucion homogenea de estos. Aplicando diferentes temperaturas de coccion para obtener distribuciones de cationes en la red cristalina, los autores demostraron que este material semiconductor tiene un **coeficiente**

de absorcion entre 5-10 veces mayor que cualquier otro material utilizado hoy en dia en tecnologia fotovoltaica e incluso a lo largo de un mayor rango espectral que va desde el **ultravioleta (400nm) hasta el infrarrojo (1000nm)**. Para lograr este resultado, los investigadores tuvieron que disenar una nueva tecnica de quimica de superficie para el nuevo material que preservara la calidad optoelectronica de los nanocristales tras su coccion. Para ello, los investigadores utilizaron acido mercaptopropionico como ligando de la pasivacion, el cual ayudo a preservar la calidad del material durante la coccion.
Para predecir y verificar las hipotesis del trabajo, los autores del estudio realizaron diferentes calculos basados en la Teoria de Densidad Funcional que confirmaron la evidencia experimental. **Sean Kavanagh**, coautor del estudio e investigador del UCL y del Imperial College, explica: i¿½La importancia del desorden atomico en las celulas solares inorganicas es actualmente un tema candente de discusion en el area. Nuestras investigaciones teoricas sobre la termodinamica y los efectos opticos/electronicos del desorden de cationes en AgBiS2 revelaron tanto la accesibilidad en la redistribucion de cationes asi como su efecto sobre las propiedades optoelectronicas del material. Nuestros calculos mostraron que una distribucion homogenea de cationes produciria un rendimiento optimo de las celulas solares en estos materiales desordenados, lo que corrobora los descubrimientos experimentalesi¿½.
Con estos resultados, el equipo construyo una celula solar ultrafina, procesada en solucion, y deposito capa por capa los nanocristales de AgBiS2 sobre ITO/Glass, uno de los sustratos de oxido transparentes conductores mas utilizados hoy en dia. Recubrieron los dispositivos con una solucion de PTAA (poly triaryl amine) y, al iluminar el dispositivo con luz solar artificial, registraron una eficiencia de **conversion de energia solar a electricidad en exceso al 9%** para un dispositivo con un grosor total inferior a los 100 nm, entre 10 y 50 veces mas delgado que las tecnologias fotovoltaicas ultra-finas actuales y 1000 veces mas delgado que las celulas fotovoltaicas de silicio.
Uno de los mejores dispositivos fabricados por el equipo fue enviado a Newport (EE. UU), a un laboratorio de calibracion fotovoltaico (PV) acreditado, que certifico una eficiencia de conversion del 8,85 %, bajo iluminacion solar completa de AM 1,5G. Como comenta el investigador del ICFO y primer autor del estudio, **Yongjie Wang**: i¿½Aunque notamos un fuerte oscurecimiento de nuestras peliculas delgadas tras una leve coccion, debido al aumento de la absorcion, al principio fue un desafio fabricar unos dispositivos tan delgados. Despues de lograr controlar el proceso y la optimizacion de la celula de manera completa, incluida la optimizacion de las capas de transporte de electrones y sus huecos, encontramos finalmente una estructura altamente reproducible para celulas solares eficientes con una estabilidad mejorada. Es realmente emocionante ver que un dispositivo de 30 nm ofrece una densidad de corriente de cortocircuito tan alta, de hasta 27 mA/cm2, y una eficiencia de hasta el 9%.i¿
? Finalmente, como recalca el Prof. ICREA del ICF**Gerasimos Konstantatos**, i¿½los dispositivos fabricados para este estudio han establecido un record entre las celulas solares

inorganicas en terminos de estabilidad, factor de forma y rendimiento, fabricadas de manera i¿½verdei¿½ y a baja temperatura, con metodos de procesado en solucion. La ingenieria del desorden de cationes en nanocristales de AgBiS2 para sistemas multinarios ha demost ado ofrecer un coeficiente de absorcion superior a cualquier otro material fotovoltaico utili ado hasta la fecha, lo que permite conseguir **dispositivos fotovoltaicos absorbentes extremadamente delgados y altamente eficientes**. Estamos muy contentos con los resultados y continuaremos avanzando en esta linea de estudio para explorar y explotar sus intrigantes propiedades para la energia fotovoltaica asi como para otros dispositivos optoelectronicosi¿?

****

* Este estudio ha sido posible gracias a la financiacion de la **Fundacio Joan Ribas Araquistain (FJRA),** asi como fondos competitivos europeos, como los European Research Council (ERCs), entre otros.



Ilustracion artistica de la distribucion cationica homogenea lograda dentro de los nanocristales de AgBiS2. ©ICFO / Scixel.



Imagen de izquierda a derecha: Gerasimos Konstantatos y Yongjie Wang (ICFO) y Sean Kavanaugh (UCL/ICL)