

LA CARRERA POR LAS CÉLULAS DE PEROVSKITA

Grupos de investigación brasileños contribuyen al rápido avance del conocimiento sobre un tipo de material prometedor para la producción de energía solar fotovoltaica

Frances Jones

En la frenética búsqueda mundial de la ciencia por nuevos materiales para producir energía limpia en forma más barata y eficiente, una estructura cristalina ha despuntado como semiconductor y, según las empresas del sector, está a punto de convertirse en la principal materia prima de una nueva generación de paneles solares fotovoltaicos, que transforman la luz solar en energía eléctrica. Los módulos de perovskita, tal como se le denomina a este nuevo material, producidos en laboratorio a partir de compuestos químicos tales como bromuro de plomo, yoduro de plomo y bromuro de cesio, son altamente capaces de convertir la energía fotónica en electricidad. Los esfuerzos por entender y explicar sus inusuales propiedades comenzaron en 2009, cuando un artículo científico que salió publicado en la revista *Journal of the American Chemical*

Pequeños módulos solares de perovskita desarrollados en el laboratorio del Instituto de Química de la Unicamp



Society demostró, por primera vez, su utilidad como componente de una célula solar fotoelectroquímica. Desde entonces, este material ha sido objeto de estudio de innumerables grupos de investigación de todo el mundo.

El rápido avance en el conocimiento y el desarrollo de las células de perovskita desató una carrera entre científicos y *startups* para viabilizar su uso comercial. En menos de 15 años, el índice de eficiencia en la conversión de la luz solar en energía eléctrica mediante células, también llamadas celdas solares—que pueden ser flexibles, livianas y transparentes— pasó de un 3,8 % al 26,1 % actual. Estos resultados se obtuvieron en módulos de superficie reducida. La eficiencia de los paneles solares comerciales dominantes, a base de silicio, alcanza entre un 15 % y un 20 %.

Una tecnología más reciente, con una celda solar de perovskita superpuesta a otra de silicio, llamada célula solar en tándem, ha registrado en laboratorio una eficiencia del 33,7 %. El récord se logró en junio de 2023 en la Universidad de Ciencia y Tecnología Rey Abdalá (Kaust), de Arabia Saudita. El Laboratorio Nacional de Energías Renovables (NREL), de Estados Unidos, mantiene una tabla pública y actualizada con las mejores cifras alcanzadas y confirmadas por distintos centros de investigación del mundo en los últimos años.

Empresas y *startups* chinas, estadounidenses y europeas prometen iniciar en los próximos meses la producción a gran escala de módulos solares con perovskita. Es el caso de la británica Oxford Photovoltaics, surgida a partir de la Universidad de Oxford, que posee una fábrica dedicada a la producción de celdas del tipo tándem en Alemania. En Estados Unidos, Caelux está construyendo una planta para aumentar su producción de vidrio fotovoltaico de perovskita, que podrá utilizarse para fabricar módulos solares a partir de este año. La empresa china GCL-SI presentó en 2023 un módulo de perovskita de 320 vatios que alcanza una eficiencia del 16 %, e informa que está siendo producido a escala piloto.

En Brasil, el que está más cerca de obtener un modelo comercial con células de perovskita es Oninn, un instituto privado sin fines de lucro con sede en Belo Horizonte [Minas Gerais], que hasta 2022 se llamaba CSEM Brasil. En la iniciativa participan investigadores de la Universidade Estadual Paulista (Unesp) y del Centro de Innovación en Nuevas Energías (Cine), un Centro de Investigaciones en Ingeniería (CPE) creado en 2018 por la FAPESP y Shell Brasil. Sin embargo, aún queda mucho por hacer hasta que pueda fabricarse una célula solar nacional técnica y económicamente viable.

Con base en su experiencia en el desarrollo de paneles solares con tecnologías basadas en células fotovoltaicas orgánicas, Oninn ahora está trabajando

para ganar escala en sus células a base de perovskita. El objetivo es aumentar el tamaño de estos dispositivos, cuyas dimensiones a escala de laboratorio van de milímetros a centímetros cuadrados (cm²), hasta alcanzar módulos más grandes, de centenas de cm², el tamaño que demanda la industria.

“Fabricamos el primer prototipo de un panel solar de perovskita de 800 cm², pero nuestro panel estándar, aún en desarrollo, es algo menor, de 500 cm²”, dice el físico italiano Diego Bagnis, director científico de la organización, quien trabaja en Brasil desde hace nueve años. “Estamos en la etapa de prototipos, con las primeras aplicaciones bajo condiciones reales para validar la tecnología”. Su meta es contar con una línea piloto de fabricación instalada para 2026 y sacar el producto al mercado en 2028, inicialmente para pequeñas aplicaciones.

La empresa no trabaja con celdas en tándem. “Nos hemos enfocado en lo que se denomina *single junction*, es decir, células con una capa única de perovskita”, informa Bagnis. “En Europa, tiene más sentido trabajar con la tecnología en tándem, combinando perovskita y silicio, porque allá la tecnología del silicio está afianzada y ese tipo de paneles se producen localmente. En Brasil eso no sucede”. El material de los paneles solares que se usan en el país es importado y los módulos a base de silicio solamente se ensamblan aquí.

A pesar de los avances de los últimos años y las promesas de lanzamiento de modelos comerciales a la brevedad, los investigadores brasileños entrevistados para la elaboración de este reportaje dicen que aún hay mucho que aprender sobre los fundamentos de este material emergente, principalmente acerca de la estabilidad de las celdas—su capacidad de mantenerse intactas durante largos períodos— y cómo extrapolar la eficiencia energética obtenida a pequeña escala, en módulos de laboratorio, a una escala mayor.

“También existen retos científicos y tecnológicos que demandan inversiones, tiempo y personal calificado para poder superarlos”, dice el físico Carlos Frederico de Oliveira Graeff, de la Facultad de Ciencias de la Unesp, en su campus de Bauru, quien trabaja con células solares de perovskita y es uno de los colaboradores de Oninn.

“Desde el punto de vista de la física y la ingeniería, el silicio es un material relativamente simple, con una estructura cristalina conocida, mientras que la perovskita presenta una gran complejidad, tanto física como química. Por lo general, se trata de un material compuesto por una parte orgánica y otra inorgánica, con diversos elementos y presenta una intensa movilidad iónica”, dice el experto. Uno de los proyectos más recientes de

Graeff, financiado por la FAPESP, se centra en el estudio de la estabilidad de estas células solares.

El físico Gustavo Dalpian, del Instituto de Física de la Universidad de São Paulo (USP), hace hincapié en que hay una serie de propiedades fundamentales de la estructura cristalina del material que aún no se comprenden totalmente. “Es bastante diferente de lo que vemos en otros materiales. En el silicio cristalino, por ejemplo, los átomos tienden a ocupar posiciones bien definidas, pero en las perovskitas su movilidad es alta. Se cree que éste es uno de los motivos por los que son tan inestables.”

La inestabilidad de la perovskita hace que ésta se degrade mucho más rápido que el silicio, y representa uno de los grandes retos por superarse. El módulo de silicio puede durar hasta 30 años sin grandes pérdidas de eficiencia, mientras que las celdas fabricadas con el nuevo material, como mucho, duran poco más de un año. Inicialmente se degradaban en horas o días. La humedad, el calor, el oxígeno e incluso la luz solar pueden causarles daño.

“Una vez que logremos comprender las propiedades fundamentales de la estructura de estos materiales y sus defectos, podremos elaborar o pensar en las maneras de evitar que se degraden con tanta rapidez como ocurre hoy en día”, dice Dalpian. El grupo de investigación bajo su liderazgo se especializa en la simulación de materiales por computadora y utiliza en estos estudios herramientas de *big data* y aprendizaje automático.

El investigador estuvo recientemente en Colombia, en el marco de un proyecto Sprint de la FAPESP, desde donde habló con *Pesquisa FAPESP*. “Estamos evaluando nuevos proyectos conjuntos centrados en las perovskitas con gente

de dos universidades de Medellín, que formarán parte de esta iniciativa”, dice el investigador, quien también mantiene colaboraciones con un grupo experimental de la Universidad Federal del ABC (UFABC), institución en la que trabajó como docente hasta 2023, cuando asumió como profesor titular en la USP.

LUZ SINCROTRÓN Y PEROVSKITA

Un equipo del Cine fue pionero en la investigación del material en profundidad al observarlo con la ayuda de una de las fuentes de luz sincrotrón de Sirius, operada por el Laboratorio Nacional de Luz Sincrotrón (LNLS) del Centro Nacional de Investigaciones en Energía y Materiales (CNPEM), de Campinas. El Cine está integrado por investigadores de la Universidad de Campinas (Unicamp), de la USP y del Instituto de Investigaciones Energéticas y Nucleares (Ipen).

“La investigación sobre el uso de la perovskita en el campo de la energía solar fotovoltaica ha sido la de mayor crecimiento en el mundo, y nuestros experimentos con luz sincrotrón nos permitieron posicionarnos en un entorno supercompetitivo”, relata la química Ana Flávia Nogueira, directora del Cine y docente del Instituto de Química de la Unicamp, quien trabaja con materiales fotovoltaicos emergentes desde 1996 y en 2015 empezó a investigar los del tipo de las perovskitas.

La infraestructura científica del CNPEM hizo posible que los investigadores realizaran un mapeo del material a escala nanométrica. “Llevamos al equipo que produce la película de perovskita –un disco rotativo denominado *spin-coater*, similar al que se utiliza para fabricar los CD– a la línea de rayos X”, comenta Nogueira. Era la primera vez que se hacía esto. Pero, ¿cuál es la ventaja de este

CÓMO FUNCIONA LA CÉLULA

Está compuesta por materiales semiconductores que transforman la luz solar en una corriente eléctrica

1. ABSORCIÓN DE LA LUZ

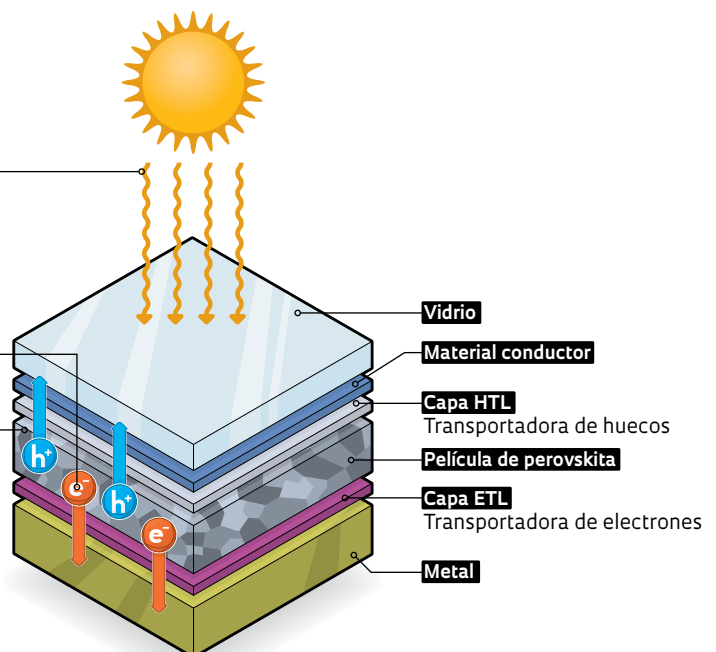
La luz solar atraviesa el sustrato de vidrio y es absorbida por la película de perovskita

2. SEPARACIÓN DE CARGAS

La energía de la luz absorbida (fotones) provoca la separación de las cargas eléctricas: la capa ETL transporta **electrones** (cargas negativas), la HTL, los **huecos** (cargas positivas)

3. GENERACIÓN DE CORRIENTE

Los huecos migran hacia el material conductor de la celda y los electrones llegan al metal, generando una corriente eléctrica



Célula de perovskita en preparación para realizar los ensayos en el acelerador de partículas Sirius



experimento *in situ*? “Mientras se iba produciendo la película de perovskita, los rayos X incidían sobre la muestra y proporcionaban información importante sobre la estructura y la cristalización de la película en sus diferentes etapas”, relata Nogueira.

Este y otros ensayos destinados a analizar la degradación del material también mediante técnicas *in situ* en Sirius dieron gran visibilidad a los investigadores del Cine, tanto es así que fueron invitados a escribir un artículo de revisión sobre el tema para la revista científica *Chemical Reviews*. El texto, de 77 páginas, salió publicado a principios de 2023. “La invitación a redactar un artículo de revisión para una revista de altísimo impacto corona la labor que hemos hecho en los últimos años”, destaca Nogueira. Además de investigar la perovskita para su uso en células solares, el grupo también estudia el empleo del material en dispositivos emisores de luz, como ledes y láseres.

PARA ENTENDER CÓMO FUNCIONA

En Sirius, los experimentos se centran ahora en entender el funcionamiento de la célula solar de perovskita, y no solo en el material en sí. Son lo que se denomina experimentos *operando*. Uno de los retos que plantea este tipo de análisis es que la propia radiación sincrotrón puede causar transformaciones indeseables en el material.

“Estamos investigando los efectos de la dosis de radiación necesaria para estudiar estos dispositivos y cómo mitigarlos. Hemos creado dispositivos que permiten simular las condiciones de operación de la celda solar fotovoltaica y obtuvimos los primeros resultados”, subraya el físico Helio Cesar Nogueira Tolentino, jefe de la División de Materia Heterogénea y Jerárquica del LNLS. “Pretendemos encontrar las condiciones de trabajo ideales para obtener la información, utilizando la luz sincrotrón y sin degradar el material fotovoltaico. O degradándolo, pero de manera controlada”.

Según explica Nogueira Tolentino, la estructura cristalina de la perovskita se asemeja a un cubo, pudiendo variar en función del método de preparación o de las vías de síntesis adoptadas. En el primer experimento *operando*, los investigadores observaron el efecto de la luz solar sobre la estructura atómica del material. “Aún no tenemos una interpretación firme, pero hay evidencias de que las variaciones lumínicas alteran la estructura del material”.

Entre las posibles soluciones presentadas por los investigadores brasileños para corregir las características indeseables del material con la mira puesta en las finalidades pretendidas, existen aditivos, nuevas moléculas, diferencias en el proceso de producción de la película e incluso la aplicación de una delgada capa de perovskita bidimensional (2D) superpuesta a otra capa tridimensional (3D). Pero la inestabilidad que exhibe el material representa tan solo una parte de los desafíos tecnológicos. El mantenimiento de la eficiencia energética obtenida en pequeñas celdas en laboratorio cuando se pasa a una escala mayor, también constituye un rompecabezas.

“A menudo, cuando se pretende extrapolar las celdas a una escala mayor, la película no es homogénea”, explica Nogueira, de la Unicamp. “El proceso de cristalización que se produce cuando se forma la perovskita es distinto al de otros materiales que se utilizan en el sector fotovoltaico”.

Según Graeff, los investigadores están tratando de encontrar fórmulas y procesos que vuelvan a la tecnología económicamente factible. “Necesitamos procesos de producción robustos que puedan utilizarse a gran escala. Mientras tanto, estamos aprendiendo mucha física y química básica. Estos son materiales nuevos y complejos en el área de los dispositivos electrónicos”, dice el investigador de la Unesp de Bauru. “La electrónica de los paneles actuales se basaba en un material muy simple y estable que es el silicio. Ahora disponemos de un material compuesto por diferentes elementos químicos y una estructura compleja”.

Las investigaciones en este campo ofrecen buenos ejemplos de una colaboración fructífera entre científicos teóricos y experimentales. Con base en las simulaciones realizadas por computadora, los teóricos pueden diseñar estructuras nunca fabricadas antes en laboratorio o ahorrar tiempo y dinero en la selección de los elementos por probarse en los experimentos.

“Analizamos distintos materiales e intentamos inferir o aprender sobre sus propiedades”, dice Dalpian, quien lleva publicados al menos cinco artículos científicos con el grupo experimental de la UFABC. “Mantenemos una colaboración muy productiva. Normalmente, son los investigadores experimentales quienes nos formulan pedidos, pero en este caso, es mejor que eso, porque también nos escuchan. En una oportunidad les dijimos que si añadían hierro a la perovskita, el material resultante tendría propiedades magnéticas atractivas. Lo hicieron y el resultado generó un artículo interesante”, dice Dalpian.

En el Cine, científicos teóricos y experimentales trabajan juntos en varios frentes. Uno de ellos es la búsqueda de alternativas que sustituyan el plomo (un elemento tóxico) en la composición de la perovskita. “Hay interés en reducir o eliminar totalmente el componente de plomo presente en estas estructuras”, dice el físico Juárez L. F. Da Silva, del Instituto de Química de São Carlos (IQSC), de la USP, coordinador del programa de ciencia computacional de materiales del Cine.

“La simulación por computadora hace posible el estudio de una gran cantidad de materiales que podrían sustituir a ese elemento en las perovskitas de baja dimensionalidad, tales como el estaño, el germanio o combinaciones de dos sustancias químicas”, explica Da Silva. Hay un conjunto de parámetros a los que el material debe acercarse

lo más posible. “Utilizamos la información de los experimentos para comprobar cuáles materiales tienen este potencial”.

En otro frente, dirigido por los experimentales del Cine, se estudia la interacción de las moléculas con las superficies de perovskitas. Las simulaciones permiten observar qué mecanismos pueden contribuir al proceso que degrada el dispositivo, explica Da Silva. “En las celdas solares, el cable metálico utilizado como contacto para conducir la corriente eléctrica interactúa con la perovskita, generando un proceso de difusión de especies químicas de un lado al otro. Dependiendo de la situación, éstas pueden desestabilizar la estructura del dispositivo”.

Según Dalpian, las células solares de perovskita tendrán espacio en varios frentes distintos, siempre y cuando se produzca un cambio de paradigma en esta área. “Se considera que las celdas solares deben durar de 20 a 25 años. Pero no tiene por qué ser así. Si las celdas fueran mucho más baratas, podrían reemplazarse cuando pierdan eficiencia, como se hace actualmente con las bombillas”, dice Dalpian. “En este caso, es necesario que haya un ecosistema que se ocupe de reciclar los paneles, minimizando el impacto ambiental asociado a su producción”. El objetivo de las investigaciones con las células de perovskita, subraya el científico, no es sustituir por completo los módulos de silicio, sino incorporar a la industria de la energía solar otro material con propiedades y características ventajosas. ■

Los proyectos y los artículos científicos consultados para la elaboración de este reportaje figuran en una lista en la versión *online* de la revista.



Línea de producción de celdas de tipo tándem en la fábrica de Oxford Photovoltaics, en Alemania