

# Avance y Perspectiva

Revista de divulgación del CINVESTAV

## Perovskitas y kesteritas: Un camino hacia un futuro energético sostenible

Karina Galache · Saturday, March 25th, 2023

Categorías: Ciencias Exactas, Zona Abierta

### Introducción

El consumo de energía eléctrica en el mundo se incrementa cada año. Se estima que en 2019 su consumo fue cerca de 23,500 TWh. En 2020, a raíz de las medidas de confinamiento y restricciones por la pandemia de COVID-19, el consumo global cayó cerca del 0.7%. Sin embargo, para el 2021 el consumo creció un 5.5 %, alcanzando los 25,000 TWh [1], siendo China el país que concentró el 31 % del consumo global. Uno de los grandes problemas de ello, es que la mayor parte de la energía producida proviene de la quema de combustibles fósiles. Esto implica que, por un lado, una gran cantidad de gases contaminantes y de efecto invernadero se liberan a la atmósfera, provocando problemas ambientales y de salud. Por otro lado, la cantidad disponible de estos recursos es limitada, por lo que en un futuro sus costos de extracción no serán rentables. Estas condiciones plantean retos tecnológicos para encontrar fuentes de energía que sean sostenibles a largo plazo. Además, estas alternativas deberán ser implementadas de modo que permitan bajos costos de producción, menor impacto ambiental y sean capaces de satisfacer la demanda energética. Dentro de las fuentes de energía renovables, la fotovoltaica destaca como una de las más rentables, ya que la luz solar está disponible prácticamente en todo el planeta y provee una enorme cantidad de energía, pues se estima que cubriendo solo un porcentaje pequeño de las áreas desérticas se tendría la energía suficiente para satisfacer la demanda global de energía eléctrica.

### Fundamentos de celdas solares

Una celda solar es un dispositivo que convierte la energía solar en electricidad a través de un proceso llamado “efecto fotovoltaico”. Las celdas solares utilizan materiales semiconductores que interactúan con los fotones (luz) provenientes del sol para generar corriente eléctrica. Los semiconductores son materiales sólidos cristalinos que tienen dos bandas de energía permitida para los electrones: la banda de valencia (BV) y la banda de conducción (BC), separadas por una brecha energética conocida como “banda prohibida”. Cuando la luz incide sobre el semiconductor, los fotones excitan a los electrones y algunos obtienen la energía suficiente para saltar de la BV a la BC, creando un espacio vacío en la BV. Éste se conoce como “hueco” y se considera una partícula

de carga positiva. Las celdas solares se constituyen fundamentalmente por la unión de por lo menos dos capas de materiales con diferentes niveles de carga eléctrica, una con exceso de electrones (semiconductor tipo n) y otra con exceso de huecos (semiconductor tipo p), lo que genera un campo eléctrico en la región de la unión de las dos capas, llamada región de agotamiento. Los pares electrón-hueco generados principalmente en la región de agotamiento, son separados y obligados a fluir en una dirección particular por efectos del campo eléctrico, creando así una corriente eléctrica. En la figura 1 se muestra un esquema del funcionamiento de una celda solar de silicio de unión tipo p y tipo n (P-N).



Figura 1. Esquema general del funcionamiento de una celda solar de silicio.

### Antecedentes de celdas solares

Se calcula que cerca del 80% del mercado de energía fotovoltaica corresponde a la tecnología del silicio. Actualmente, las celdas solares de silicio cristalino han reportado eficiencias de conversión de energía solar a energía eléctrica cercana al 27.6 %; a este tipo de celdas se les conoce como “Celdas solares de primera generación”. El silicio es un material semiconductor de banda óptica indirecta y tiene un coeficiente de absorción bajo (entre  $10^3$  y  $10^4$   $\text{cm}^{-1}$ ), por lo que se requiere de espesores superiores a los 200  $\mu\text{m}$  para poder absorber la mayor cantidad de la radiación solar aprovechable. También, para lograr incrementar su eficiencia se requiere que su crecimiento sea por la técnica de Czochralski en forma de lingotes monocristalinos (Si-c) con una dirección de crecimiento especificada previamente y de alta pureza; posteriormente se necesita un proceso de corte en obleas de 200 – 400  $\mu\text{m}$  de espesor. Sin embargo, este proceso es muy complicado pues se desperdicia hasta un 40 % del Si-c, en el corte y eliminación de residuos, lo que representa un aumento considerable en los costos de producción. Teniendo en cuenta estos antecedentes, se inició la búsqueda de materiales novedosos con propiedades fotovoltaicas para superar estos problemas.

Como una alternativa surgen las llamadas “Celdas solares de segunda generación”, que consisten en películas delgadas de materiales con altos coeficientes de absorción, permitiendo absorber la mayor parte de la radiación solar con espesores menores a 5  $\mu\text{m}$ . Como materiales absorbentes para celdas solares se plantea principalmente el uso de películas delgadas de silicio amorfo hidrogenado (a-Si:H) y materiales basados en calcogenuros metálicos (sulfuros, telurios y seleniuros), como el telurio de cadmio (CdTe), el cobre-indio-selenio (CIS), el cobre-indio-galio-selenio (CIGS), destacando el cobre-indio/galio-selenio/azufre (CIGSSe). Los compuestos de calcogenuros metálicos son semiconductores de banda óptica directa, por lo que presentan altos coeficientes de absorción ( $10^5$   $\text{cm}^{-1}$ ), es decir que tienen una mayor capacidad de absorber luz y generar portadores de carga eléctrica. Celdas basadas en CdTe han logrado alcanzar eficiencias de conversión de 22.1 % y las celdas de películas delgadas de CIGSSe, de 23.4%. Aunque éstas tienen grandes avances en su desarrollo, presentan algunos inconvenientes. En primer lugar, están compuestas de materiales no muy abundantes en la corteza terrestre, como el galio y el indio, por lo que su baja disponibilidad incrementa sensiblemente sus costos de producción, lo que dificulta su uso para una producción a gran escala que sea económicamente viable. Otro inconveniente es que el selenio se considera un elemento tóxico, por lo que la generación de subproductos durante su fabricación, así como el manejo y desecho de las celdas al concluir su vida útil, son un problema ambiental y de salud.

## Celdas basadas en perovskitas y kesteritas

Para superar estas limitaciones, en años recientes se ha trabajado en el desarrollo de celdas con diferentes enfoques novedosos. En estas tecnologías emergentes conocidas como “Celdas solares de tercera generación”, se encuentran las celdas sensibilizadas con tintes, las basadas en perovskitas y kesteritas, puntos cuánticos y celdas orgánicas/inorgánicas.

Dentro de esta tecnología, destacan las celdas basadas en perovskitas, material semiconductor con un alto coeficiente de absorción ( $10^4$ - $10^5$   $\text{cm}^{-1}$ ) y movilidad elevada de los portadores de carga, lo que permitió que en la última década estas celdas fueran las de mayor avance en eficiencia. Se conocen como perovskitas a los materiales con la misma estructura cristalina del titanato de calcio ( $\text{CaTiO}_3$ ). Tienen una composición química del tipo  $\text{ABX}_3$ , donde A y B son cationes (ion con carga eléctrica positiva) de diferentes tamaños y X es un anión (ion con carga eléctrica negativa) unido a ambos. En la Figura 2 se presenta la estructura cristalina general de las perovskitas.

Si bien es la estructura cristalina la que da el nombre de perovskita a estos materiales, su composición elemental puede ser muy diversa, llegando incluso a introducir cationes orgánicos como el metilamonio ( $\text{CH}_3\text{NH}_3^+$ ) o el formamidinio ( $\text{NH}_2\text{-CH}_2\text{=NH}_2^+$ ) como parte de su estructura. En celdas con cationes de plomo y metilamonio y con aniones de yodo se ha alcanzado una eficiencia récord de 25.7 %, mientras que en celdas tipo tándem de perovskita/silicio ha sido posible alcanzar eficiencias de hasta 32.5%. Con estos niveles de eficiencia se han hecho algunas estimaciones de que con 35 kg de este material se podría generar la misma cantidad de energía que con 7 toneladas de silicio. Sin embargo, uno de los grandes retos tecnológicos para celdas de este tipo es extender su tiempo de vida útil, ya que es un material muy susceptible a degradarse en condiciones ambientales, además de que para su preparación se utiliza una gran cantidad de solventes orgánicos, muchos de ellos extremadamente tóxicos.



Figura 2. Estructura cristalina de perovskitas.

Otra de las alternativas más prometedoras para el desarrollo de celdas solares son las kesteritas, que son minerales de sulfuro, siendo el sulfuro-estaño de cobre zinc (CZTS por sus siglas en inglés) uno de los de mayor interés en la actualidad. La composición química del CZTS puede variar, pero en general, es un material de bajo costo y de fácil acceso, ya que los elementos que la constituyen son abundantes en la corteza terrestre. Asimismo, el CZTS está compuesto por elementos no tóxicos, con lo que también se tiene un impacto ambiental mucho menor durante la fabricación y desecho de las celdas solares. En la Figura 3 a) se muestra la estructura cristalina del CZTS. A diferencia de otros materiales empleados en celdas solares, como el silicio, el CZTS es más fácil de obtener por una gran variedad de métodos tanto físicos como químicos, por ejemplo: depósito químico en fase vapor, depósito por láser pulsado, erosión catódica, rocío pirolítico, depósito electroquímico, etcétera. En la Figura 3 b) se muestra una película de CZTS depositada por rocío pirolítico.

Además de su disponibilidad y bajo impacto ambiental, el CZTS también destaca por sus propiedades físicas que lo hacen un material prometedor para la producción de celdas solares. El

CZTS tiene un alto coeficiente de absorción, entre  $10^4$  y  $10^5$   $\text{cm}^{-1}$ , dependiendo de su estequiometría y calidad cristalina. También su estructura cristalina es más estable que la de otros compuestos, lo que lo hace menos propenso a la degradación con el tiempo. Las celdas solares basadas en CZTS han alcanzado eficiencias del 13%, que se ha logrado al sustituir parte del azufre con selenio. A pesar de sus ventajas, el uso del CZTS en la producción de celdas solares todavía presenta algunos desafíos importantes. Su eficiencia se encuentra aún por debajo de su límite teórico estimado de 28% debido a que al tratarse de un material cuaternario resulta complicado tener un control preciso en su composición y estructura cristalina. Por otro lado, aunque el CZTS es más estable que otros materiales y menos tóxico, es necesario realizar más trabajo de investigación con el objetivo de mejorar su estabilidad, alargar su tiempo de vida útil y sobre todo, incrementar los valores de eficiencia de conversión. Todo esto abre un gran panorama de investigación con múltiples posibilidades de mejora para nuevos investigadores en el área.



Figura 3. a) Estructura cristalina de kesterita de CZTS y b) película de CZTS depositada sobre vidrio por la técnica de rocío pirolítico.

## Conclusiones

Las investigaciones en el desarrollo de celdas solares basadas en perovskitas y kesteritas continúan hoy en día, ya que tienen un alto potencial como alternativa a los materiales convencionales. Además, considerando el poco tiempo que se tiene explorando sus capacidades, hay un espacio importante para innovar en su desarrollo y abre un abanico de posibilidades para jóvenes investigadores en el área de celdas solares con nuevos enfoques e ideas novedosas.

\*Todos los datos de las eficiencias reportadas fueron tomados de la tabla de mejores eficiencias en celdas de investigación presentada por *The National Renewable Energy Laboratory (NREL)*, actualizada a enero de 2023 [2].

## Referencias

[1] Enerdata, Anuario estadístico mundial de energía 2022

<https://datos.enerdata.net/electricidad/datos-consumo-electricidad-hogar.html>

[2] NREL, Best Research-Cell Efficiency Chart | Photovoltaic Research | NREL.  
<https://www.nrel.gov/pv/cell-efficiency.html>

This entry was posted on Saturday, March 25th, 2023 at 10:41 pm and is filed under [Ciencias Exactas](#), [Zona Abierta](#)

You can follow any responses to this entry through the [Comments \(RSS\)](#) feed. Both comments and pings are currently closed.

