

Simulación por computadora de nanomateriales para la conversión de energía solar*

YOSUKE KANAI**

RESUMEN. Las simulaciones por computadora están desempeñando cada vez un papel más amplio en el avance de nuestra comprensión y el diseño de nuevos nanomateriales para aplicaciones fotovoltaicas. En este artículo se discuten algunos ejemplos de cómo estas simulaciones computacionales se utilizan para obtener información importante en la comprensión de nanomateriales existentes y también para predecir nuevos nanomateriales para aplicaciones fotovoltaicas.

PALABRAS CLAVE: simulaciones por computadora, aplicaciones fotovoltaicas, nanomateriales

ABSTRACT. Computer simulations are playing an ever-expanding role in advancing our understanding and design of novel nanomaterials for photovoltaic applications. We discuss a few examples of how these computational simulations are being utilized to gain important insights into understanding existing nanomaterials and also to predict new nanomaterials for photovoltaic applications.

KEY WORDS: computer simulations, photovoltaic applications, nanomaterials.

INTRODUCCIÓN

Durante la segunda mitad del siglo xx, la computación se convirtió en una herramienta indispensable para la ciencia. Su progreso ha permitido que los científicos solucionen ecuaciones matemáticas de alta complejidad con mucha exactitud, lo cual ha conducido a un entendimiento científico muy detallado.¹ En muchas instituciones científicas del mundo, las supercomputadoras han jugado un papel crucial en la solución de grandes retos científicos, desde la comprensión de fenómenos astrofísicos tales como las supernovas, hasta la predicción del plegado de las proteínas. Hoy en día, algunas de las computadoras más veloces consisten en decenas de miles de CPUs (unidades centrales de procesamiento) que realizan tareas en paralelo.² Está en manos de los científicos y de los ingenieros proponer formas ingeniosas de utilizar numerosas CPUs simultáneamente para que las computadoras efectúen tareas en forma eficiente. Esto no sólo requiere de conocimientos profundos en computación, sino también de formulaciones matemáticas que describan los problemas científicos que necesitan solución.

El reto más importante que se nos presenta actualmente es el calentamiento global.³ Se considera que la causa de este alarmante cambio es el enorme aumento de dióxido de carbono en nuestra atmósfera, proveniente de la combustión de combustibles fósiles.⁴ El uso de la energía solar es una de las soluciones más prometedoras

* Traducción de María Isabel Pérez Montfort.

** Berkeley Nanosciences and Nanoengineering Institute, University of California, Berkeley, CA, USA; y Condensed Matter and Materials Division Lawrence Livermore National Laboratory, CA, USA (Dirección actual).

¹ Por ejemplo, ver *Scientific Discovery through Advanced Computing*, website en <http://www.scidac.gov/>.

² Para conocer una revisión reciente, consultar <http://www.top500.org/>.

³ United Nations Framework Convention on Climate Change (<http://unfccc.int>).

⁴ *Ibidem*.

al reto de hacerle frente a esta alarmante tendencia, antes de que sea demasiado tarde. Para que la energía solar realmente sea una alternativa viable de los combustibles fósiles tales como aceites y carbón para la producción de electricidad, debemos desarrollar los fundamentos científicos que permitan un despliegue de la tecnología de energía solar económicamente más competitivo [1]. Al centro de esta tecnología hay un fenómeno científico fundamental llamado el efecto fotovoltaico, que convierte la luz (fotones) en electricidad (flujo de electrones) en los materiales. Hablando conceptualmente, algunos materiales absorben fotones del sol y “excitan” a un electrón, que se desplaza de su lugar original, creando un “hueco”, y estos “electrones excitados” y “huecos” pueden fluir dentro de los materiales y ser recolectados en el extremo opuesto, en donde los materiales están conectados a electrodos metálicos.

A pesar del gran potencial de uso del efecto fotovoltaico para convertir fotones del sol en electricidad, la eficiencia y el costo de utilizar celdas fotovoltaicas todavía es considerablemente más alto por kilowatt-hora que la energía obtenida a partir del carbón, del gas o del aceite [1]. Hoy en día, esta desventaja económica, desafortunadamente, representa un obstáculo significativo para la expansión de las celdas fotovoltaicas. Por lo tanto, una pregunta científica importante es: ¿sería posible realizar la misma tarea en forma más eficiente, utilizando materiales cuya fabricación sea menos costosa que la del silicón cristalino?

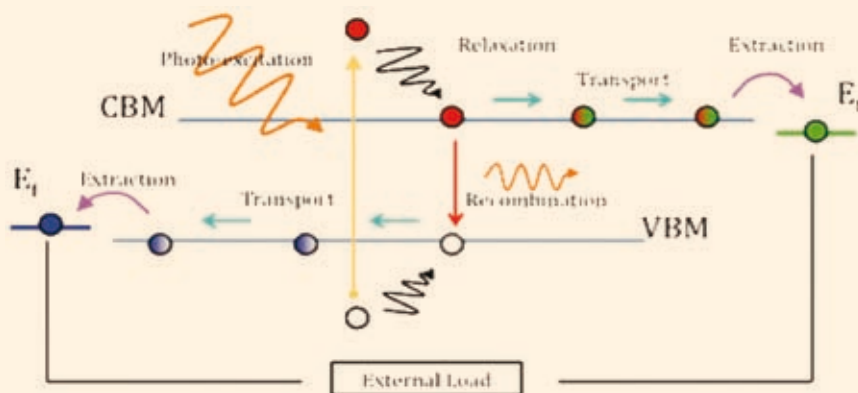
Es aquí donde surge lo emocionante del uso de los nanomateriales. Éstos se caracterizan por tener propiedades a escala nanométrica (nano es 10^{-9}). Cuando los materiales son así de pequeños, se posibilita el control de sus propiedades mediante la modificación de su tamaño, su forma y sus superficies, así como de los materiales que los componen. Una nueva generación de celdas fotovoltaicas, basada en materiales a nanoescala, ha recibido enorme atención en años recientes por su potencial para reducir dramáticamente los costos de convertir la energía solar en electricidad [2]. Estas nuevas oportunidades aparecen por el costo y la densidad de defectos relativamente bajos de los nanomateriales y por avances importantes en nuestra capacidad de controlar las propiedades ópticas, electrónicas y estructurales de materiales inorgánicos y orgánicos a escala nanométrica. Por ejemplo, utilizando los mismos elementos del Seleniuro de Cadmio, pero modificando su tamaño, se pueden controlar las propiedades ópticas de los nanomateriales.⁵ Para comprender por qué la capacidad de controlar las propiedades de los materiales es importante en el diseño de nuevos nanomateriales ideales para las celdas fotovoltaicas, debemos examinar con algún detalle cómo funciona una celda fotovoltaica.

LOS NANOMATERIALES Y LA CELDA FOTOVOLTAICA

La figura 1 ilustra cada uno de los pasos descritos a continuación. El primer paso es la absorción de un fotón solar por material fotovoltaico, lo que resulta en la excitación de un electrón y crea un “hueco” en el material. En el siguiente paso, este electrón excitado y el hueco se “relajan” hacia lo que se llama el mínimo de la banda de conducción (CBM del inglés *conduction band minimum*) y el máximo de la banda de valencia (VBM del inglés *valence band maximum*) [el orbital desocupado de más baja energía (LUMO) y el orbital ocupado de más alta energía (HOMO) se utilizan sinónimamente en

⁵ Ver, por ejemplo, <http://www.nd.edu/~mkuno/>.

FIGURA 1. Esquema de los procesos físicos involucrados en la operación fotovoltaica. Ver texto para más detalles.



los nanomateriales, respectivamente]. En los materiales hay muchos “niveles de energía” que pueden ser ocupados por el electrón excitado y el hueco. El electrón excitado busca ir a niveles de energía más bajos en la banda de conducción (CB) y el hueco busca escalar a los niveles de energía más altos en la banda de valencia (VB), de tal manera que la energía se minimiza. En este proceso, una porción de la energía se pierde como energía térmica de los átomos (de los núcleos, para ser más precisos) de los materiales. En muchos materiales, el relajamiento del electrón excitado y del hueco ocurre muy rápidamente; por ejemplo, en el silicón cristalino este proceso toma del orden de picosegundos o menos.

El electrón excitado y el hueco interactúan, resguardados por otros electrones que los rodean en el material. El concepto de “*excitón*” se utiliza para describir esta interacción de atracción entre las dos partículas, que renormaliza los efectos de los alrededores en una interacción efectiva de dos partículas. En muchos materiales a nanoescala, el electrón excitado y el hueco están estrechamente unidos y, por lo tanto, la atracción es muy fuerte comparada con la que hay en materiales de mayor tamaño. Una cuestión importante de las celdas fotovoltaicas basadas en materiales a nanoescala es que el excitón se debe disociar en dos cargas “libres” (electrón excitado y hueco sin interacción) para poder ser transportadas independientemente y en direcciones opuestas a través de un material hacia los electrodos metálicos. Es hasta entonces que las cargas se pueden extraer de los electrodos metálicos correspondientes.

Es importante mencionar que estos procesos físicos de operación de la celda fotovoltaica compiten con el proceso indeseado de que el electrón excitado se combine con el hueco y se “desexcite” el material. Por lo tanto, estos procesos deben ocurrir tan eficientemente como sea posible para que pueda efectuarse el proceso de recombinación.

Discutiremos ahora las ventajas y los retos de utilizar estos nanomateriales. Como es fácil de imaginar, un material óptimo para la operación de una celda fotovoltaica debe ser capaz de realizar varias tareas distintas. Por ejemplo, debe poder absorber fotones solares eficientemente y que la pérdida de energía durante la absorción sea limitada. Asimismo, el material debe ser capaz de transportar al electrón excitado y al hueco eficientemente. También es importante que el material tenga buen contac-

to con el metal de los electrodos. Una de las razones por las cuales hay entusiasmo por el uso de nanomateriales es que podemos controlar sus propiedades para cumplir estos requerimientos, manteniendo bajos los costos de procesamiento (al contrario que con el silicón cristalino). Sin embargo, existen algunos retos en el uso de nanomateriales para la operación de celdas fotovoltaicas. Esto es, dado que en los nanomateriales el electrón excitado y el hueco están estrechamente unidos, se deben separar de alguna manera, pues si no, las cargas no se pueden mover independientemente y terminarán recombinándose. Este proceso de “separación de cargas” es una de las cuestiones importantes que se pueden analizar utilizando la simulación por computadora para aumentar nuestro conocimiento del mecanismo y mejorar la eficiencia de las celdas fotovoltaicas [3].

Antes de entrar en materia sobre cómo la simulación por computadora se utiliza para comprender y predecir la llamada “separación de cargas” del electrón excitado y el hueco en los nanomateriales, necesitamos analizar un asunto más. El electrón excitado y el hueco no son partículas común y corrientes como pelotas de tenis. Por el contrario, estas partículas se comportan según las leyes de la mecánica cuántica, cuya explicación excede el ámbito de este artículo y pueden consultarse en excelentes libros de texto [4]. Lo único que necesitamos saber en este momento, es que estas partículas no tienen una posición fija en el espacio como podría pensarse a partir de la figura 1. Su posición se describe como una distribución de probabilidades en función del espacio. Tienen una cierta probabilidad de estar en un sitio específico, pero no se puede asegurar que la partícula realmente esté allí.⁶ Aunque es éste un concepto extraño, todos los experimentos indican que es verdadero cuando se trata con objetos realmente pequeños, como los electrones.

SEPARACIÓN DE CARGA EN LOS NANOMATERIALES

Una idea interesante y prometedora es la de utilizar materiales orgánicos, por ejemplo, polímeros, en lugar de materiales inorgánicos como el silicón [5]. Sin embargo, como mencionamos anteriormente, el electrón excitado y el hueco deben separarse una vez que el fotón solar sea absorbido para que las cargas puedan transportarse independientemente hacia los electrodos. Para lograr esto, los científicos han producido una interfaz entre el polímero P3HT y el fullereno, una molécula con forma de balón de fútbol (figura 2).

Gracias a los niveles de energía (descritos en la figura 3) que se encuentran en esta interfase, el electrón excitado salta hacia el fullereno [6]. Es importante recordar que el electrón excitado se mueve hacia niveles más bajos, mientras que el hueco se mueve hacia niveles más altos para minimizar la energía, tal y como se describió anteriormente. La idea de introducir algún otro material para lograr la separación de cargas ha dado buenos resultados.

Una pregunta interesante es la siguiente: ¿cómo podemos mejorar este arreglo del polímero/fullereno? Para contestarla, debemos tomar en cuenta que el electrón excitado debe saltar del fullereno a otra molécula y así logre llegar al electrodo. Existen materiales unidimensionales y elongados llamados nanotubos de carbono (NTC) que son afines a las moléculas de fullereno (figura 4). Hay de distintos tamaños y tienen propiedades electrónicas diversas. Con simulación por computadora se ha es-

⁶ Copenhagen interpretation of quantum mechanics.

tudiado la interfaz entre el polímero y los NTC. Por ejemplo, se ha encontrado que, si se utiliza un tipo específico de NTC [5, 7], la interfaz con el polímero P3HT forma el alineamiento ideal de niveles de energía para lograr la separación de las cargas (descrita en la figura 3) [7]. A partir de la simulación por computadora, podemos predecir la fuerza que percibe un electrón adicional en la interfaz (figura 4) y otras propiedades importantes, difíciles de probar experimentalmente por la nano-escala de la interfaz.

La simulación por computadora puede utilizarse no sólo para comprender los nanomateriales ya conocidos, sino también para diseñar nuevos. Como mencionamos en la sección anterior, un aspecto del uso de los nanomateriales es que podemos proyectar sus propiedades en la nanoescala. Si tomamos en cuenta que las propiedades electrónicas de los nanomateriales se pueden afinar a partir de su tamaño, forma y superficies, también es posible controlar las propiedades intrínsecas de un nanomaterial individual para inducir la separación de cargas sin utilizar la interfaz, como es el caso del polímero/fulereno o del polímero/CNT. Inclusive un material bastante convencional como el silicio exhibe un amplio rango de conductas interesantes en la nanoescala. Motivados por la observación experimental de que los nano-alambres de silicio crecidos mediante la técnica llamada de vapor-líquido-sólido se hacen más estrechos, los científicos han explorado los aspectos fundamentales de cómo se puede modificar estructura electrónica de los nanotubos de Si al controlar su morfología a nanoescala [8]. Un aspecto medular de este trabajo es que el rompimiento de la simetría a lo largo del eje del alambre podría afectar los estados electrónicos LUMO y HOMO en forma distinta y puede llevar a que estos estados se encuentren en distintos sitios en el espacio.

El esquema superior de la figura 5 muestra, en simulación por computadora, que el electrón excitado y el hueco se pueden separar y se localizar en principalmente en extremos opuestos del nanotubo. Se pueden separar naturalmente conforme el electrón excitado y el hueco se mueven hacia abajo y hacia arriba, respectivamente, para minimizar la energía (figura 6). El campo actual de investigación computacional propone este nuevo e interesante enfoque para la separación de cargas, utilizando la capacidad de control intrínseca de los nanomateriales para celdas fotovoltaicas.

FIGURA 2. Modelo de interfaz entre el polímero P3HT (verde) y el fullereno (azul) utilizado para la separación de cargas en la celda fotovoltaica. (Véase la referencia 6 (b) para más detalles).

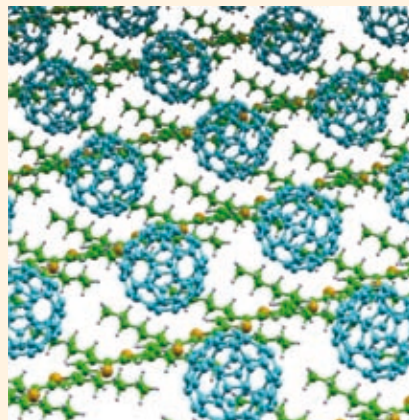


FIGURA 3. Esquema del proceso de separación de cargas en una interfaz ideal entre dos materiales distintos con alineamiento escalonado de los niveles de energía (tipo II). Los círculos rojos y blanco representan un electrón excitado y un hueco, respectivamente.

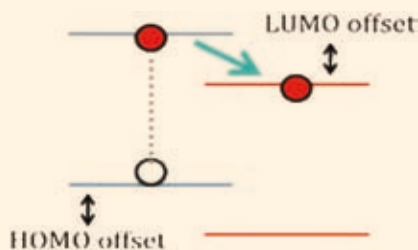


FIGURA 4. Modelo de interfaz entre el polímero P3HT (verde) y el CNT (morado) utilizado para la separación de cargas en celdas fotovoltaicas (izquierda). El potencial de atracción inducido para un electrón en la interfaz (derecha). (Véase la referencia 7 (b) para más detalles).

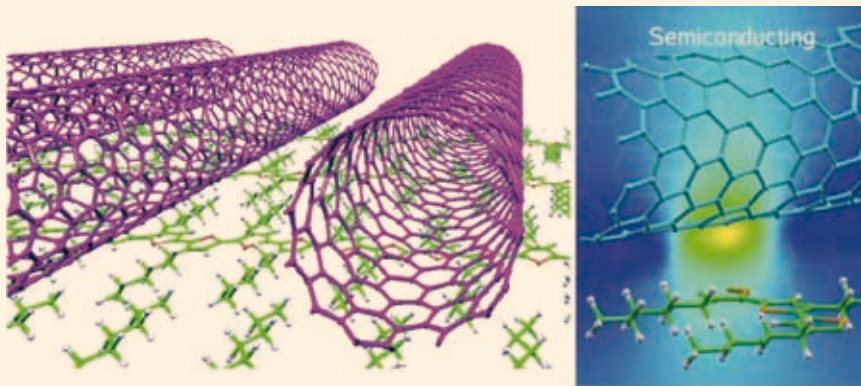


FIGURA 5. Separación LUMO (verde) y HOMO (azul) en un nanomaterial individual por control morfológico en un nanotubo que se estrecha.

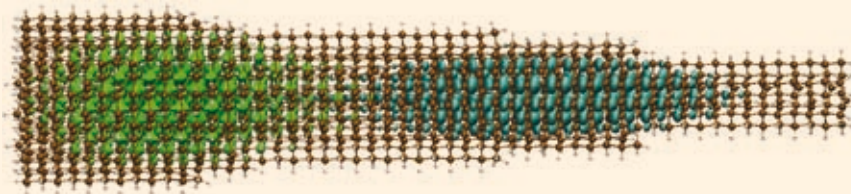
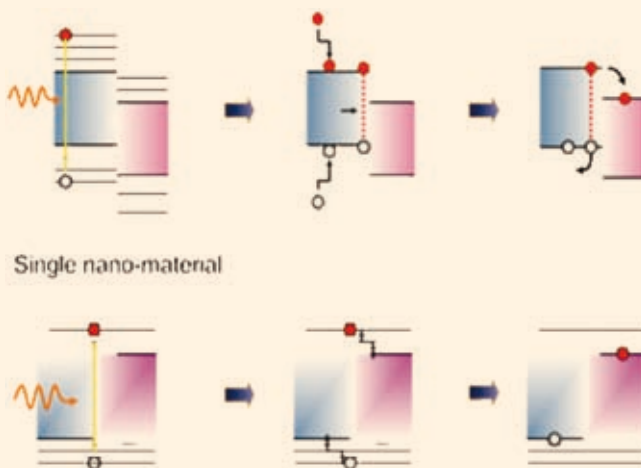


FIGURA 6. Esquemas de dos procesos distintos de separación de cargas: en la interfaz de dos nanomateriales (esquema superior) y en un nanomaterial individual diseñado, como el nano-tubo que se estrecha (figura 5) (esquema inferior).



CONCLUSIONES

Se examinan algunos de los aspectos más interesantes de la simulación por computadora para la comprensión de los nanomateriales y su uso en celdas fotovoltaicas. Como complemento de la investigación experimental, la investigación computacional puede contribuir extensamente al entendimiento de los mecanismos fundamentales involucrados en las celdas fotovoltaicas y descubrir nuevos caminos para aumentar la eficiencia de estas celdas, usando nanomateriales. Este campo de investigación científica se está expandiendo rápidamente y todavía quedan pendientes muchos descubrimientos inesperados. Esperamos que muchos alumnos se unan a nuestra convocatoria de avanzar la frontera del conocimiento en este campo de la investigación computacional.

REFERENCIAS

- [1] C. Wadia, A. P. Alivisatos, D. M. Kammen. 2009. *Env. Sci. Tech.*, 43, 2072.
- [2] Huynh, W.; Dittmer, J. J.; Alivisatos, A. P. 2002. *Science*, 295, 2425; Brabec, C. J.; Sariciftci, N. S.; Hummelen, J. C. 2001. *Adv. Funct. Mater.* 11, 15.; Coakley, K. M.; Liu, Y.; Chiatzun, G.; McGehee, M. D. 2005. *MRS Bull.* 30, 37. *Mater.* 2005, 15, 1617.
- [3] Y. Kanai, Z. Wu, J. C. Grossman, J. Mater. Chem. En prensa.
- [4] Ver, por ejemplo, D. J. Griffiths, *Introduction to Quantum Mechanics*
- [5] Forrest, S. R. 2005. *MRS Bull.* 30, 28.
- [6] (a) N. S. Sariciftci, L. Smilowitz, A. J. Heeger, F. Wudl, 1992. *Science* 258, 1474.; (b) Y. Kanai and J. C. Grossman, *Nano. Lett.*, 2007. 7, 1967.
- [7] (a) J. Geng, T. Zeng, 2006. *J. Am. Chem. Soc.* 128, 16827; (b) Y. Kanai and J. C. Grossman, 2008. *Nano. Lett.*, 8, 908.
- [8] Z. Wu, J. B. Neaton, J. C. Grossman. 2008. *Phys. Rev. Lett.*, 100, 246804.