

CURSO DE MAESTRÍA-POSTGRADO

FUNDAMENTOS, MODELIZACIÓN Y CARACTERIZACIÓN EXPERIMENTAL DE CÉLULAS SOLARES DE NUEVA GENERACIÓN

Juan Antonio Anta,
Nanostructured Solar Cells Group,
(<https://www.upo.es/investiga/ccs/>)
Universidad Pablo de Olavide de Sevilla
E-41013, Sevilla, España
e-mail: anta@upo.es

Objetivos del Curso

Este curso está dirigido a estudiantes e investigadores interesados en iniciarse en el estudio de tecnologías fotovoltaicas emergentes, las llamadas células solares de nueva generación. La principal seña de identidad de este tipo de dispositivos, es que están construidas a partir de materiales nanoestructurados y/o orgánicos, con el objetivo de reducir costes de fabricación y ampliar los nichos de mercado y de aplicación, como es el caso de la fotovoltaica adaptada a edificios, los dispositivos transparentes, los dispositivos flexibles, alimentación de dispositivos móviles, etc.

Por este motivo el enfoque del curso es diferente a cursos tradicionales de fotovoltaica y células solares, centrados en la descripción de dispositivos de primera y segunda generación con semiconductores inorgánicos (silicio mono y policristalino, elementos III-V, calcogenuros, etc.). Este curso está más centrado en entender el funcionamiento de conceptos tales como las células solares nanoestructuradas de colorante (células Grätzel), descubiertas a principios de los años 90^{1,2}, y las células solares orgánicas.^{3,4} Finalmente, mención especial tendrá el nuevo concepto que está revolucionando la fotovoltaica desde hace una década, las células solares de perovskita.⁵⁻⁷

Dados los principios de conversión fotovoltaica en este tipo de dispositivos, el enfoque del curso será fundamentalmente fisicoquímico (frente al tradicional basado en la física de semiconductores). Especial atención se dedicará a la comprensión y utilización de modelos analíticos y numéricos, así como al aprendizaje de las bases de técnicas

experimentales de caracterización, como la voltametría, y técnicas fotoelectroquímicas de pequeña perturbación.

Estructura y dinámica del Curso

El curso está estructurado en cuatro módulos. A cada uno de ellos se dedicará una semana de clases teóricas (7.5 o 6 horas, a razón de 1.5 horas al día) y una práctica de laboratorio de 3 horas. El curso se extenderá entonces por 4 semanas (dos semanas en la segunda quincena de abril y dos semanas en la segunda quincena de julio) y tendrá 27 horas de clases teóricas y 24 horas prácticas.

El curso se impartirá en español, pero toda la documentación y presentación audiovisual estará escrita en inglés. Las clases teóricas de cada día tendrán un descanso de 5-10 minutos, es decir, estarán divididas en bloques de 45 minutos. En las clases teóricas se presentará a los estudiantes con una serie de ejercicios voluntarios para apuntalar la adquisición de los conocimientos teóricos.

El profesor estará disponible para resolver dudas el resto del día o por e-mail entre Abril y Julio (¡pero no se garantiza respuesta rápida!).

Course contents (tentative)

Module 1 (7.5 hours, 1.5 hours/day): *Introduction and fundamental properties of solar cells based on nanostructured materials*⁸⁻¹²

Lesson 1: Introduction to emerging technologies in photovoltaics: nanostructured, organic and hybrid solar cells. [Lunes 15 Abril 2019](#)

Lesson 2: Conditions for efficient photovoltaic conversion. Primary and Secondary Charge Separation. Thermodynamics of Solar Cells: the origin of the photovoltage, electrochemical potential, quasi-Fermi level splitting. Thermodynamic limit and radiative limits of the photovoltage. [Martes 16 Abril 2019](#)

Lesson 3: Kinetics in Solar Cells: the origin of the photocurrent. Revision of chemical kinetics: rate law, reaction order, lifetime, Arrhenius law. Tafel's law and Marcus model. [Miércoles 17 Abril 2019](#)

Lesson 4: Secondary charge separation: charge transport and recombination. Thermodynamic driving force. Transport equations: diffusion and drift. Mobility and Einstein relation. Microscopic formulation and mechanisms of charge transport in disordered materials. Microscopic formulation and mechanisms of recombination in disordered materials. Recombination kinetics and definition of recombination lifetimes. [Jueves 18 Abril 2019](#)

Lesson 5: The current-voltage curve: short-circuit photocurrent, open-circuit photovoltage, fill factor, photoconversion efficiency. Photovoltage and ideality factor. Photovoltage limits revisited. Interplay between transport and recombination: diffusion length. Solution of proposed exercises. [Lunes 22 Abril 2019](#)

- **Laboratory exercise 1:** Measurement of the current-voltage curve of a solar cell. Influence of light intensity, scan rate and scan direction. Extraction of short-circuit photocurrent, open-circuit photovoltage, fill factor, efficiency and ideality factor. **Martes 23 Abril 2019-Por la tarde (3 h aprox.)**

Module 2 (7.5 hours, 1.5 hours/day): **Experimental characterization of solar cells based on nanostructured materials**¹³⁻¹⁵

Lesson 1: Conditions for efficient photovoltaic conversion revisited. Beyond the current-voltage curve. Electron dynamics behind the current-voltage curve. Introduction to small-perturbation optoelectronics techniques: concept and requirement of linearity, causality and stability. Concept of transfer function and types of small perturbation techniques. **Miércoles 24 Abril 2019**

Lesson 2: Introduction to Impedance Spectroscopy. Definition of electrical impedance and admittance. Complex representation of the impedance: Nyquist, Bode and Cole-cole plots. Impedance of simple circuit elements: resistors, capacitor and inductors. RC elements and time constants. Non ideal capacitors. **Jueves 25 Abril 2019**

Lesson 3: Application of Impedance Spectroscopy to the characterization of solar cells. Advantages and drawbacks. Practical implementation and feature identification. Fitting to equivalent circuits. Analysis and common mistakes. A chemist view of impedance spectroscopy. **Viernes 26 Abril 2019**

Lesson 4: Interpretation of the impedance response in solar cells. Series, Shunt and Recombination resistances. Chemical and geometrical capacitances. Extraction of lifetimes and ideality factors. Establishing the physical basis of a given electrical models. Introduction to impedance software (Zview) **Lunes 29 Abril 2019**

Lesson 5: Optical small-perturbation techniques: Intensity modulated photocurrent spectroscopy (IMPS) and Intensity modulated photovoltage spectroscopy (IMVS). Connection with impedance spectroscopy. Extraction of lifetimes and diffusion coefficients. Solutions of proposed exercises **Martes 30 Abril 2019**

- **Laboratory exercise 2:** Impedance spectroscopy measurements and analysis in dye-sensitized solar cells. Experimental setup and measurement. Equivalent circuit fitting and feature extraction. Data analysis. Extraction of lifetimes, series resistance, recombination resistances, chemical capacitance parameters, ideality factor. **Jueves 02 Mayo 2019-Por la tarde (3 h aprox.)**

Module 3 (6 hours, 1.5 hours/day): **Modeling and fundamental description of solar cells based on nanostructured materials**¹⁶⁻²⁰ **Tercera y cuarta semana de Julio 2019 – Fechas exactas por confirmar**

Lesson 1: Introduction to quantum-mechanical methods and density functional theory. Computation of electronic properties, density of states, orbital energies and band gaps. Classical Molecular Dynamics.

Lesson 2: Numerical simulation of charge transport in disordered materials. Mechanisms of electron transport revisited. Random Walk models and Monte Carlo simulations. Computation of diffusion coefficients and lifetimes

Lesson 3: *Device modelling. Analytical models and diode equation. Continuity equations, drift-diffusion models and numerical simulation of the current-voltage curve. Numerical modeling of small-perturbation measurements: equivalent circuits and continuity equations.*

- **Laboratory exercise 3:** *Numerical simulation of the current-voltage curve obtained in Laboratory exercise 1 curve using a drift-diffusion model.*

Module 4 (6 hours, 1.5 hours/day): **Applications in dye solar cell and hybrid perovskite solar cells** *Tercera y cuarta semana de Julio 2019 – Fechas exactas por confirmar*

Lesson 1: *Dye sensitized solar cells: fabrication and working principles. Dyes, metal-oxide semiconductors and electrolytes. Historic evolution and recent progress.*

Lesson 2: *Small-perturbation characterization of dye sensitized solar cells. Impedance spectroscopy characterization: extraction of recombination resistances, chemical capacitances, lifetimes and small-perturbation diffusion length. IMPS/IMVS characterization of dye-sensitized solar cells.*

Lesson 3: *Hybrid metal-halide perovskite solar cells: fabrication and working principles. Hybrid ionic-electronic character of perovskites. Metal halide perovskites and selective contacts. Historic evolution and recent progress. Ups and downs of the perovskite photovoltaic concept.*

Lesson 4: *Small-perturbation characterization of hybrid metal halide perovskite solar cells. Empirical features in the impedance response. IMPS/IMVS characterization. Low and high frequency regimes. Review of recent theories about the functioning and the small-perturbation response of perovskite solar cells.*

- **Laboratory exercise 4:** *IMPS/IMVS experimental characterization of a dye-sensitized solar cell. Measurement of internal and external quantum efficiencies.*

Referencias

1. O'Regan, B. & Grätzel, M. A Low-Cost, High-Efficiency Solar-Cell Based on Dye-Sensitized Colloidal TiO₂ Films. *Nature* **353**, 737–740 (1991).
2. Grätzel, M. Recent Advances in Sensitized Mesoscopic Solar Cells. *Acc. Chem. Res.* **42**, 1788–1798 (2009).
3. Brabec, C. J., Sariciftci, N. S. & Hummelen, J. C. Plastic solar cells. *Adv. Funct. Mater.* **11**, 15–26 (2001).
4. Janssen, R. A. J. & Nelson, J. Factors Limiting Device Efficiency in Organic Photovoltaics. *Adv. Mater.* **25**, 1847–1858 (2013).
5. Kojima, A., Teshima, K., Shirai, Y. & Miyasaka, T. Organometal Halide Perovskites as Visible-Light Sensitizers for Photovoltaic Cells. *J. Am. Chem. Soc.* **131**, 6050–6051 (2009).
6. Snaith, H. J. Perovskites: The Emergence of a New Era for Low-Cost, High-Efficiency Solar Cells. *J. Phys. Chem. Lett.* **4**, 3623–3630 (2013).
7. Saliba, M. *et al.* Cesium-containing triple cation perovskite solar cells: improved stability, reproducibility and high efficiency. *Energy Env. Sci* **9**, 1989–1997 (2016).
8. Rau, U. Reciprocity relation between photovoltaic quantum efficiency and electroluminescent emission of solar cells. *Phys. Rev. B* **76**, 085303 (2007).
9. Kamat, P. V., Tvrđy, K., Baker, D. R. & Radich, J. G. Beyond Photovoltaics: Semiconductor Nanoarchitectures for Liquid-Junction Solar Cells. *Chem Rev* **110**, 6664–6688 (2010).

10. Tress, W. *et al.* Predicting the Open-Circuit Voltage of CH₃NH₃PbI₃ Perovskite Solar Cells Using Electroluminescence and Photovoltaic Quantum Efficiency Spectra: the Role of Radiative and Non-Radiative Recombination. *Adv. Energy Mater.* **5**, 1400812 (2015).
11. Kirchartz, T. & Rau, U. What Makes a Good Solar Cell? *Adv. Energy Mater.* **0**, 1703385
12. Manser, J. S., Christians, J. A. & Kamat, P. V. Intriguing Optoelectronic Properties of Metal Halide Perovskites. *Chem. Rev.* (2016). doi:10.1021/acs.chemrev.6b00136
13. Peter, L. M. Characterization and modeling of dye-sensitized solar cells. *J. Phys. Chem. C* **111**, 6601–6612 (2007).
14. Fabregat-Santiago, F., Garcia-Belmonte, G., Mora-Seró, I. & Bisquert, J. Characterization of nanostructured hybrid and organic solar cells by impedance spectroscopy. *Phys. Chem. Chem. Phys.* **13**, 9083–9118 (2011).
15. Halme, J., Vahermaa, P., Miettunen, K. & Lund, P. Device Physics of Dye Solar Cells. *Adv. Mater.* **22**, E210–E234 (2010).
16. Anta, J. A. Random walk numerical simulation for solar cell applications. *Energy Environ. Sci.* **2**, 387–392 (2009).
17. Anta, J. A. Electron transport in nanostructured metal-oxide semiconductors. *Curr. Opin. Colloid Interface Sci.* **17**, 124–131 (2012).
18. Ansari-Rad, M., Anta, J. A. & Bisquert, J. Interpretation of Diffusion and Recombination in Nanostructured and Energy-Disordered Materials by Stochastic Quasiequilibrium Simulation. *J. Phys. Chem. C* **117**, 16275–16289 (2013).
19. De Angelis, F., Fantacci, S. & Gebauer, R. Simulating Dye-Sensitized TiO₂ Heterointerfaces in Explicit Solvent: Absorption Spectra, Energy Levels, and Dye Desorption. *J Phys Chem Lett* **2**, 813–817 (2011).
20. Mattoni, A., Filippetti, A. & Caddeo, C. Modeling hybrid perovskites by molecular dynamics. *J. Phys. Condens. Matter Inst. Phys. J.* **29**, 043001 (2017).

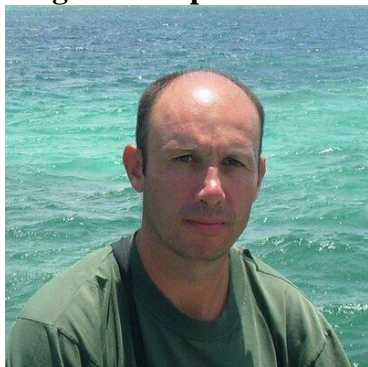
Información adicional

El curso será dictado en la Facultad de Ciencias de la Universidad de Valparaíso, ubicada en Avenida Gran Bretaña 1111, Playa Ancha, Valparaíso.

Inscripciones en el formulario adjunto, los cupos son limitados, particularmente para las prácticas de laboratorio.

Consultas al correo: daniel.ramirez@uv.cl

Biografía del profesor visitante



Dr. Juan Antonio ANTA. Catedrático de Química Física, Departamento de Sistemas Físicos, Químicos y Naturales, Universidad Pablo de Olavide de Sevilla, Carretera de Utrera km. 1, E-41013 Sevilla, España. Email: anta@upo.es. Teléfono: +34 954349314.

El Dr. Juan Antonio Anta se doctoró en 1997 en Ciencias Químicas por la Universidad Complutense de Madrid. Continuó su formación como investigador postdoctoral en la Universidad de Oxford en el Reino Unido en los años 1998 y 1999 (Department of Theoretical Chemistry – Prof. Paul Madden) y posteriormente en el Imperial College London en el grupo del profesor Nick Quirke.

En el año 2000 consiguió una plaza como profesor asociado en la Universidad Pablo de Olavide de Sevilla (UPO), donde continúa a día de hoy su carrera académica como Catedrático en el Área de Química Física. El Dr. Anta inició su carrera investigadora como predoc y postdoc en el campo de la mecánica estadística y la modelización termodinámica de fases condensadas, incluyendo en estas líquidos moleculares y metales líquidos. Estos trabajos de investigación se ampliaron en años posteriores al estudio de sólidos cristalinos, coloides y líquidos iónicos a temperatura ambiente. Durante su segundo postdoc en el Imperial College se incorporó a un proyecto dirigido a la comprensión del transporte electrónico en materiales desordenados, con aplicaciones en óxidos metálicos mesoporosos y células solares de colorante. Ya en Sevilla fundó el grupo de Células Solares Nanoestructuradas (www.upo.es/investiga/ccs), dedicado al estudio de los fundamentos de células solares de nueva generación mediante simulación del transporte de carga, modelado de dispositivos y caracterización eléctrica de células solares. El Dr. Anta trabaja en la actualidad en el análisis de experimentos de espectroscopía de impedancia y otras técnicas optoelectrónicas de pequeña perturbación, con el objetivo de entender la dinámica electrónica y los procesos que transforman la energía lumínica en energía eléctrica en células solares y otro tipo de dispositivos relacionados. Como profesor enseña regularmente Termodinámica, Cinética Química y Química Verde a estudiantes de pregrado y de maestría en Biotecnología y Ciencias Ambientales. Sus intereses actuales de investigación se centran en estudios experimentales y de modelado de células solares de nueva generación, en concreto células solares de perovskita híbrida. Es autor de más de 120 publicaciones científicas en revistas de alto impacto, tiene un índice H de 32 y más de 3000 citas. Ha supervisado 7 tesis doctorales y ha sido investigador principal de cuatro proyectos nacionales. En el ámbito personal Juan Antonio Anta es aficionado al cine, las series y la literatura (<http://rompecabezas69.blogspot.com/>), así como al montañismo, la natación y el ciclismo de montaña.

El curso que dictará en Valparaíso, se ha logrado gracias al **Programa de Cooperación Internacional (PCI)** a través del **Concurso de atracción de capital humano avanzado, modalidad estancias cortas (MEC 2018)** de **CONICYT**. (MEC80180057)

