

## Optimización numérica de celdas solares de perovskita con capas de transporte alternativas

### Numerical optimization of perovskite solar cells with alternative transport layers

Zain de J. Vázquez-Ramírez <sup>a</sup>, Rodrigo Soriano-Hipólito <sup>b</sup>, José Á. Viveros-Sánchez <sup>c</sup>

#### Abstract:

Perovskite solar cells stand out as a promising photovoltaic technology due to their high efficiency and potential for low-cost fabrication. However, their commercialization is hindered by limitations in transport layers, where  $\text{TiO}_2$  exhibits UV degradation and Spiro-OMeTAD suffers from high cost and instability. To address these issues, this study proposes an alternative lead-free perovskite architecture, employing  $\text{WO}_3$  as the electron transport layer and  $\text{CuSbS}_2$  as the hole transport layer. Through numerical simulations with SCAPS-1D, the impact of HTL thickness, defect density in  $\text{CuSbS}_2$  and its thickness, the metal contact work function, and thermal behavior on device performance was systematically evaluated. The results demonstrate an optimal  $\text{CuSbS}_2$  thickness enabling a maximum efficiency of 20.4%, along with notable tolerance to neutral defects and thermal stability in the 300–350 K range. Additionally, high work function metal contacts, such as iron (~4.8 eV), significantly enhance hole extraction and reduce interfacial losses. These findings establish quantitative criteria for transport layer design and electrode selection, paving the way for more stable, cost-effective, and scalable perovskite solar cells.

#### Keywords:

Solar Cell, Perovskite,  $\text{CuSbS}_2$ , Efficiency, HTL, SCAPS-1D

#### Resumen:

Las celdas solares de perovskita destacan como tecnología fotovoltaica prometedora por su alta eficiencia y potencial de fabricación económica. No obstante, su comercialización se ve limitada por problemas en las capas de transporte, donde el  $\text{TiO}_2$  muestra degradación ante UV y el Spiro-OMeTAD presenta alto costo e inestabilidad. Para abordar estas limitaciones, este estudio propone una arquitectura alternativa de perovskita libre de plomo, utilizando  $\text{WO}_3$  como capa transportadora de electrones y  $\text{CuSbS}_2$  como capa transportadora de huecos. Mediante simulaciones numéricas con SCAPS-1D, se evaluó sistemáticamente el impacto del espesor del HTL, la densidad de defectos en  $\text{CuSbS}_2$  y su espesor, la función de trabajo del contacto metálico y el comportamiento térmico en el rendimiento del dispositivo. Los resultados demuestran un espesor óptimo de HTL que permite alcanzar una eficiencia máxima del 20.4%, junto con una notable tolerancia a defectos neutros y estabilidad térmica en el rango de 300-350 K. Adicionalmente, contactos metálicos de alta función de trabajo, como el hierro (~4.8 eV), mejoran significativamente la extracción de huecos y reducen las pérdidas interfaciales. Estos hallazgos establecen criterios cuantitativos para el diseño de capas transportadoras y selección de electrodos, facilitando el desarrollo de celdas de perovskita más estables, económicas y escalables.

#### Palabras Clave:

Celda solar, perovskita,  $\text{CuSbS}_2$ , eficiencia, HTL, SCAPS-1D

### 1. Introducción

El aumento vertiginoso de la población mundial durante el último siglo de alrededor de 1 650 millones en 1900 a más de 7 800 millones en 2020, ha puesto en jaque los modelos tradicionales de suministro energético y ha hecho evidente la urgencia de sistemas de generación sostenibles, accesibles y escalables. En ese escenario, la energía solar fotovoltaica no es solo una alternativa técnica: es una

palanca para la justicia energética y la mitigación climática, capaz de electrificar megaciudades y comunidades remotas con baja huella ambiental. Las perovskitas híbridas han emergido en las últimas dos décadas como una de las promesas más disruptivas en fotovoltaica: combinan alta respuesta optoelectrónica, procesado a baja temperatura y potencial de fabricación económica, rasgos que podrían permitir una producción masiva más rápida y barata que la del silicio convencional.

<sup>a</sup> Autor de Correspondencia, Benemérita Universidad Autónoma de Puebla | Facultad de Ciencias Físico-Matemáticas | Puebla de Zaragoza-Puebla | México, <https://orcid.org/0009-0004-8011-1508>, Email: [zain.vazquez@outlook.com](mailto:zain.vazquez@outlook.com)

<sup>b</sup> Benemérita Universidad Autónoma de Puebla | Facultad de Ciencias Físico-Matemáticas | Puebla de Zaragoza-Puebla | México, <https://orcid.org/0009-0001-6086-7293>, Email: [rodrigo.soriano@alumno.buap.mx](mailto:rodrigo.soriano@alumno.buap.mx)

<sup>c</sup> Benemérita Universidad Autónoma de Puebla | Facultad de Ciencias Físico-Matemáticas | Puebla de Zaragoza-Puebla | México, <https://orcid.org/0009-0002-6341-0720>, Email: [jose.viverossa@alumno.buap.mx](mailto:jose.viverossa@alumno.buap.mx)

Si la comunidad científica logra resolver sus limitaciones de estabilidad y escalabilidad, las perovskitas podrían acelerar la transición energética global, reduciendo costos, ampliando el acceso y disminuyendo el impacto ambiental de la generación eléctrica.

Las celdas solares basadas en materiales perovskita han mostrado avances acelerados en la última década, alcanzando eficiencias de conversión superiores al 25% gracias a sus favorables propiedades optoelectrónicas, alta absorción de radiación y posibilidades de procesamiento de bajo costo. No obstante, la implementación a gran escala de estas celdas está condicionada por dos limitaciones fundamentales: la estabilidad a largo plazo y la dependencia de materiales de transporte de carga que presentan deficiencias operativas o elevadas barreras económicas. En particular, las capas selectivas de huecos y de electrones desempeñan un papel determinante en la eficiencia, la reproducibilidad y la vida útil del dispositivo, por lo que su optimización resulta esencial para la comercialización de perovskitas de nueva generación (Razmjoo, et al., 2019; Deepthi Jayan, et al., 2021).

En la configuración actual de una celda solar de perovskita la capa transportadora de huecos (HTL), el compuesto orgánico conocido como Spiro-OMeTAD se ha consolidado como estándar experimental debido a su contribución inicial al rendimiento de las celdas. Sin embargo, Spiro-OMeTAD presenta limitaciones relevantes: su síntesis y procesamiento implican costos elevados, requiere dopajes complejos para alcanzar conductividades operativas y muestra degradación frente a condiciones ambientales habituales, lo cual compromete la estabilidad del dispositivo (Madam et al., 2020). De igual manera el óxido de níquel, NiO, ha sido propuesto como alternativa inorgánica debido a su mayor robustez, sin embargo, su desempeño real se ve afectado por defectos intrínsecos y una movilidad de huecos limitada, factores que reducen el voltaje de circuito abierto y la eficiencia global. Estas deficiencias en los HTL convencionales motivan la búsqueda y evaluación de materiales alternativos que ofrezcan estabilidad, bajo costo, menos impacto cuando se degradan en el ambiente y propiedades electrónicas favorables (Moujoud, 2022; Samaki et al., 2023; Obare et al., 2018). De forma análoga, la capa transportadora de electrones (ETL) emplea dióxido de titanio,  $\text{TiO}_2$ , material que facilita la extracción de electrones y es compatible con diversos absorbedores. Aun así,  $\text{TiO}_2$  presenta problemas críticos: degradación bajo irradiación ultravioleta constante, presencia de vacantes de oxígeno que actúan como trampas recombinativas y sensibilidad a las condiciones de procesamiento que puede afectar la reproducibilidad (Samiul Islam et al., 2021).

Por estas razones, es urgente identificar HTL y ETL que preserven, o mejoren, el rendimiento de las perovskitas sin sacrificar estabilidad, costo ni escalabilidad. En el caso de las HTL, el reto consiste en reemplazar materiales orgánicos costosos y sensibles (como Spiro-

OMeTAD) por compuestos inorgánicos o semiconductores solares que combinen buena conductividad de huecos, procesabilidad sencilla y menor impacto ambiental en su ciclo de vida. En cuanto a las ETL, se requieren alternativas a  $\text{TiO}_2$  que resistan mejor la irradiación UV, minimicen trampas de carga y permitan reproducibilidad en procesos de fabricación industrial. Atendiendo a estos criterios, proponemos estudiar la combinación de calcostibita ( $\text{CuSbS}_2$ ) como HTL y trióxido de tungsteno ( $\text{WO}_3$ ) como ETL (Mim et al., 2025). La elección de  $\text{CuSbS}_2$  se apoya en varias ventajas reportadas: es un material tipo-p abundante y de bajo costo, con un ancho de banda directo próximo a 1.5 eV y un alto coeficiente de absorción que favorece la extracción de portadores sin competir excesivamente con el absorbedor perovskita; además, su procesamiento puede realizarse mediante técnicas que no requieren atmósferas de vacío, lo cual reduce barreras económicas y facilita escalado.

Simulaciones y estudios previos han indicado su potencial para obtener voltajes de circuito abierto competitivos, aunque en su mayoría, esos resultados suelen provenir de trabajos centrados en capas aisladas o en configuraciones simplificadas.  $\text{WO}_3$ , por su parte, se plantea como una alternativa a  $\text{TiO}_2$  gracias a su mayor estabilidad frente a irradiación ultravioleta y a la posibilidad de ajustar sus niveles energéticos mediante el control de la estequiometría de oxígeno en la síntesis, lo que permite optimizar el alineamiento de bandas con el absorbedor. No obstante, tanto para  $\text{CuSbS}_2$  como para  $\text{WO}_3$  falta un análisis integral que cuantifique su desempeño combinado dentro de una celda completa y que identifique ventanas de proceso (espesores, densidades de defecto, posiciones de banda) que permitan la extracción eficiente de portadores sin introducir nuevas vías de degradación (Mim et al., 2025).

Este trabajo plantea:

- Realizar un modelado físico-numérico acoplado que evalúe el desempeño de una celda de perovskita con HTL de  $\text{CuSbS}_2$  y ETL de  $\text{WO}_3$ ;
- Identificar rangos óptimos de espesor, densidad de defectos y alineamiento de bandas que maximizan  $J_{sc}$ ,  $V_{oc}$ , FF y eficiencia ( $\eta$ );
- Comparar el desempeño de la combinación  $\text{CuSbS}_2/\text{WO}_3$  con celdas convencionales basadas en Spiro-OMeTAD/ $\text{TiO}_2$ , evaluando mejoras en eficiencia y parámetros clave de rendimiento.

Con este enfoque, se busca no solo aportar resultados numéricos sobre viabilidad y rendimiento, sino también ofrecer criterios prácticos que aproximen las ventajas materiales a requerimientos reales de fabricación.

Si bien las propiedades individuales de  $\text{CuSbS}_2$  y  $\text{WO}_3$  han sido estudiadas, existe una brecha de conocimiento en la literatura respecto al análisis integral de su desempeño de acción combinada dentro de una celda completa. Este trabajo busca llenar ese vacío mediante un modelo físico numérico. El sistema de estudio es una celda solar en arquitectura vertical que incorpora estas capas. El análisis teórico se basa en la resolución acoplada de las ecuaciones de Poisson y de continuidad para electrones y huecos, simuladas en SCAPS-1D, lo que permite determinar los parámetros clave de rendi-

miento ( $J_{sc}$ ,  $V_{oc}$ , FF,  $\eta$ ) y analizar los mecanismos de pérdida para validar la viabilidad de esta configuración innovadora.

El objetivo principal de este trabajo es evaluar mediante simulaciones numéricas la viabilidad de mejorar la eficiencia y la estabilidad de celdas solares de perovskita al reemplazar Spiro-OMeTAD y  $TiO_2$  por  $CuSbS_2$  y  $WO_3$  respectivamente, identificando además parámetros críticos de diseño como espesores de capa, densidad de defectos y alineamiento de bandas que optimicen la extracción de portadores y minimicen las pérdidas por recombinación.

Los resultados aspirarán a ofrecer criterios cuantitativos y recomendaciones de procesamiento que faciliten la transición hacia celdas de perovskita más económicas, estables y comercialmente viables.

## 2. Metodología

### 2.1 Diseño Metodológico y enfoque de investigación

El presente trabajo se aborda como un estudio de simulación numérica de corte descriptivo y de optimización paramétrica, con un enfoque deductivo-cuantitativo orientado a evaluar y mejorar el rendimiento fotovoltaico de la arquitectura:

FTO/ $WO_3$ /MASnBr<sub>3</sub>/CuSbS<sub>2</sub>/Fe

mediante SCAPS-1D. Las simulaciones se realizan de forma transversal, bajo condiciones controladas y en puntos temporales definidos, y adoptan una lógica paramétrica y exploratoria que busca caracterizar de manera sistemática la influencia de variables críticas, espesores de capas, densidad y energía de defectos, función de trabajo del electrodo posterior y temperatura operacional, sobre las magnitudes eléctricas de interés ( $V_{oc}$ ,  $J_{sc}$ , FF y  $\eta$ ) (Farhat et al., 2024; Araújo et al., 2025; Tripathi et al., 2022; Samiul Islam et al., 2021). Los resultados se contraponen con configuraciones y valores reportados en la literatura para validar la coherencia del modelo y calibrar los parámetros de entrada, de modo que la investigación combine la búsqueda de tendencias predictivas con la verificación comparativa necesaria para su interpretación.

Metodológicamente, el dispositivo se implementa en SCAPS-1D especificando propiedades materiales fundamentales, gap, afinidad electrónica, permitividad, movilidades, densidades de estados y espesores, procedentes de fuentes bibliográficas y bases de datos. Las condiciones de referencia incluyen espectro AM 1.5G,  $P_{in} = 100 \text{ mW}\cdot\text{cm}^{-2}$  y temperatura base de 300 K, realizando barridos C-V ( $-0.8 \text{ V}$  y  $+0.8 \text{ V}$ ) para la obtención de los parámetros fotovoltaicos (Samiul Islam et al., 2021). Se ejecutan barridos monovariantes que permiten identificar regiones de operación óptimas y zonas de sensibilidad fuerte frente a variaciones en los parámetros; cada simulación se documenta exhaustivamente, registrando los archivos de entrada, los supuestos empleados y los criterios de postprocesado para garantizar la trazabilidad y la reproducibilidad de los

resultados por parte de terceros. La elección de la simulación numérica se sustenta en su capacidad predictiva y en el control monofactorial que ofrece frente a la complejidad experimental, permitiendo priorizar combinaciones materiales prometedoras antes de invertir recursos en fabricación (Madam et al., 2020; Noel et al., 2014; Samiul Islam et al., 2021; Samaki et al., 2023).

Este procedimiento se inscribe en un paradigma positivista y en modelos físicos clásicos de semiconductores, ecuación de Poisson y ecuaciones de continuidad, que facilitan la extracción de conclusiones cuantitativas y reproducibles (Araújo et al., 2025); no obstante, se reconocen las limitaciones inherentes al enfoque numérico, tales como la representación empírica de defectos, la agregación de mecanismos de recombinación, la ausencia de efectos tridimensionales y la no modelación explícita de procesos de degradación a largo plazo, aspectos que serán discutidos y acotados en la sección de resultados (Saidarsan, 2025). En último término, la metodología propuesta busca equilibrar rigor y exploración: ofrecer predicciones cuantificables y transparentes que orienten futuras validaciones experimentales y permitan optimizar de forma eficiente el diseño de la celda propuesta.

### 2.2 Fundamentos de SCAPS-1D y Validación del Modelo.

#### 2.2.1 Justificación y Capacidades del Software.

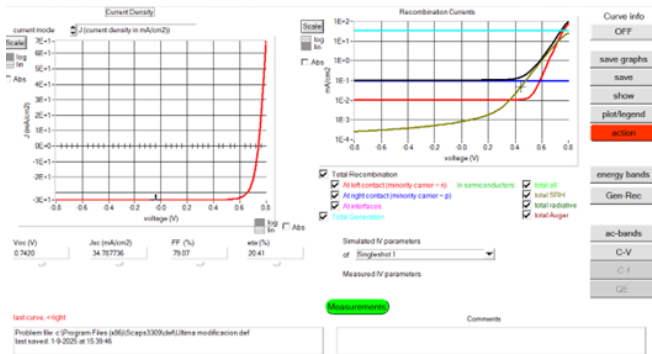
La simulación numérica de celdas solares híbridas y semiconductores emergentes se ha vuelto esencial para la optimización de dispositivos fotovoltaicos antes de su desarrollo experimental (Singh, et al., 2021; Sharma, et al., 2022; Dubei, et al., 2022; Araújo et al., 2025; Mim, 2025; Samiul Islam, et al., 2021). Entre los softwares de simulación disponibles, SCAPS-1D ha sido ampliamente utilizada debido a su capacidad para modelar celdas solares de estado sólido, permitiendo analizar parámetros críticos como movilidad de portadores, densidad de defectos, afinidad electrónica y energía de banda prohibida (Araújo, et al., 2025).

El uso de SCAPS-1D en este trabajo es crucial por su capacidad de predecir y comparar el desempeño de celdas solares basadas en perovskitas y materiales alternativos de transporte de carga (como  $WO_3$  y  $CuSbS_2$ ) de manera rápida y reproducible, sirviendo como guía para futuros estudios experimentales y optimización numérica (Tan, et al., 2018). SCAPS-1D permite además la definición explícita de múltiples capas con propiedades eléctricas y ópticas diferenciadas (gap, afinidad, permitividad, movilidades, coeficientes de absorción y espesores) y la inclusión de estados defectuosos puntuales y distribuidos tanto en volumen como en interfaces, lo que resulta determinante para estudiar heteroestructuras híbridas y materiales emergentes (Swarnkar et al., 2016; Devi, et al., 2019; Ma, et al., 2018; Samiul Islam, et al., 2021; Valeti, et al., 2023).

Su capacidad para parametrizar contactos, función de trabajo, barreras y selectividad, facilita el análisis de estrategias de ingeniería de interfaces orientadas a mejorar la extracción o bloqueo selectivo de portadores. La herramienta entrega salidas diagnósticas complementarias, curvas J-V, perfiles de banda, mapas de generación y recombinación, densidades

de portadores y respuesta espectral (EQE/IQE), que permiten desagregar pérdidas por absorción, transporte e interfaces y, con ello, proponer intervenciones de diseño concretas (Firdaus et al., 2021; Moser 2023).

Operativamente, SCAPS-1D favorece la reproducibilidad y la trazabilidad mediante la posibilidad de ejecutar barridos paramétricos automáticos, guardar y exportar archivos de entrada/salida y documentar bitácoras de simulación; estas funciones son esenciales para realizar análisis de sensibilidad, definir tolerancias de fabricación y comparar sistemáticamente configuraciones alternativas. Adicionalmente, el software admite la incorporación de dependencias con temperatura, resistencias serie/paralelo y modelos empíricos de recombinación (Choi et al., 2014; Islam et al., 2024), lo que permite estudiar no solo la eficiencia máxima sino también la robustez del diseño frente a variaciones operacionales y de proceso.



**Figura 1. Interfaz con parámetros de salida de SCAPS-1D.** Burgelman, M., Nollet, P., & Degraeve, S. (2021). SCAPS-1D (Versión 3.3.09) [Software]. University of Gent

Por buenas prácticas en este estudio, se documenta de manera precisa la versión de SCAPS-1D empleada (SCAPS-1D 3.3.09), se vincula cada parámetro a su correspondiente fuente bibliográfica o medición experimental y se realiza una fase inicial de calibración mediante la reproducción de configuraciones previamente reportadas en la literatura (Mim, 2025; Samiul Islam et al., 2021; Valeti et al., 2023). Este procedimiento garantiza que el modelo numérico se sustente en una línea base verificable y consistente, de modo que los barridos paramétricos posteriores no solo reflejen tendencias teóricas, sino que también conserven validez comparativa frente a resultados experimentales y numéricos previos, fortaleciendo así la confiabilidad y reproducibilidad de las predicciones obtenidas.

### 2.2.2 Bases Físico – Matemáticas.

SCAPS-1D resuelve las ecuaciones fundamentales de transporte de carga y Poisson (Devi et al., 2019; Ma et al., 2018; Araújo et al., 2025), considerando las propiedades asignadas a cada capa y las interfaces, lo que permite estudiar la recombinación, el perfil de bandas y transporte de portadores en dispositivos tipo n-i-p y p-i-n. Las ecuaciones utilizadas son:

Ecuación de Poisson para un semiconductor (Araújo et al., 2025).

$$\nabla^2 \varphi = q\varepsilon(n - p + N_A - N_D) \quad (1)$$

Donde  $N_A$  es la concentración de dopaje del aceptor y  $N_D$  la concentración de dopaje del donador y  $\varphi$  es el potencial electrostático.

Ecuación de continuidad de electrones y huecos (Araújo et al., 2025).

$$\nabla \cdot J_n - q \frac{\partial n}{\partial t} = +qR \quad (2)$$

$$\nabla \cdot J_p - q \frac{\partial p}{\partial t} = -qR \quad (3)$$

Estas ecuaciones permiten evaluar y estudiar el desempeño de la celda bajo condiciones de iluminación estándar (AM 1.5G, 100mW/cm²) y temperatura de operación de 300K, así como analizar la influencia de defectos, dopaje, espesores de capa y barreras de energía en la eficiencia fotovoltaica (Araújo et al., 2025; Tripathi et al., 2022; Mim, 2025; Samiul Islam et al., 2021).

En la práctica, la resolución de este sistema acoplado describe cómo los campos eléctricos internos influyen en la distribución de portadores, cómo la recombinación afecta la extracción de corriente y cómo los perfiles de energía determinan la eficiencia de transferencia entre capas. El formalismo matemático se implementa mediante discretización espacial y resolución iterativa de las ecuaciones de Poisson y continuidad, garantizando la convergencia en presencia de gradientes abruptos de potencial o densidad de portadores (Lupke, 2023). SCAPS-1D permite además refinar la malla en regiones críticas, como interfaces o capas ultradelgadas, para lograr mayor precisión numérica (Samaki et al., 2023). De este modo, las ecuaciones no solo describen el balance de cargas y corrientes en el interior de la celda, sino que también constituyen la base para evaluar parámetros macroscópicos de desempeño ( $V_{oc}$ ,  $J_{sc}$ , FF,  $\eta$ ) a partir de fenómenos microscópicos de transporte y recombinación, logrando un vínculo directo entre física fundamental y métricas fotovoltaicas.

### 2.2.3 Parámetros de Salida y Métricas de Desempeño.

SCAPS-1D proporciona la salida de parámetros clave de la celda, tales como el voltaje en circuito abierto ( $V_{oc}$ ), la corriente de cortocircuito ( $J_{sc}$ ), el factor de forma (FF) y la eficiencia de conversión ( $\eta$ ), los cuales se calculan a partir de la curva J-V simulada mediante la ecuación (Moser, 2023):

$$FF = \frac{J_{mp} V_{mp}}{J_{sc} V_{oc}} \quad (4)$$

$$\eta = \frac{J_{sc} V_{oc} FF}{P_{in}} \quad (5)$$

Donde  $J_{mp}$  y  $V_{mp}$  corresponden a la corriente y el voltaje en el punto de máxima potencia, y  $P_{in}$  es la potencia de entrada de la luz incidente. Cada uno de estos parámetros tiene un significado físico fundamental: el  $V_{oc}$  refleja las pérdidas por recombinación y la alineación energética de las capas; el  $J_{sc}$  depende directamente de la absorción óptica y de la eficiencia de recolección de portadores; el FF está condicionado por resistencias parásitas internas y externas, y determina cuán ideal es la curva J-V; finalmente, la  $\eta$  integra todos los efectos anteriores y constituye la métrica global de desempeño

ño. El uso de SCAPS-1D en este trabajo es crucial por su capacidad de predecir y comparar el desempeño de celdas solares basadas en perovskitas y materiales alternativos de transporte de carga (como  $\text{WO}_3$  y  $\text{CuSbS}_2$ ) de manera rápida y reducible, sirviendo como guía para futuros estudios experimentales y optimización numérica.

Más allá de las métricas convencionales, SCAPS-1D ofrece resultados intermedios, como perfiles de energía, distribuciones de densidad de portadores, tasas de recombinación espacialmente resueltas y curvas de respuesta espectral (EQE/IQE) (Araújo et al., 2025; Samaki et al., 2023), que enriquecen la interpretación del comportamiento eléctrico y óptico del dispositivo. Estas salidas permiten localizar cuellos de botella en el transporte de carga, identificar interfaces críticas donde se concentran defectos y evaluar la contribución relativa de cada capa a la absorción y a la extracción de portadores. En este sentido, la utilidad del software no se limita a cuantificar parámetros globales de eficiencia, sino que proporciona un marco de análisis integral que vincula fenómenos microscópicos (como trampas electrónicas o barreras interfaciales) con métricas macroscópicas de desempeño, fortaleciendo el carácter predictivo y comparativo del modelo.

### 2.3 Estructura de la Celda Solar Propuesta

En este estudio se consideró una configuración de celda solar tipo n-i-p, ampliamente reportada en la literatura para dispositivos de perovskita de alta. La arquitectura propuesta incluye como capa de transporte electrónico (ETL) al trióxido de tungsteno ( $\text{WO}_3$ ) debido a su amplia ventana óptica, estabilidad y adecuada alineación de bandas con la perovskita. Por otro, se seleccionó como capa de transporte de huecos (HTL) la calcostibita ( $\text{CuSbS}_2$ ), un material tipo p con propiedades de alta absorción y bajo costo, el cual ha sido reportado como un candidato alternativo al convencional Spiro-OMeTAD y al  $\text{NiO}$  (Devi et al., 2019).

La capa absorbente está compuesta por perovskita libre de plomo  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnBr}_3$  ( $\text{MASnBr}_3$ ) seleccionada por sus propiedades semiconductoras prometedoras, tales como una energía de banda prohibida de aproximadamente 1.8-2.0 eV, adecuada para las aplicaciones en dispositivos tandem, además de una elevada absorción en el rango visible y una menor toxicidad en comparación con las perovskitas basadas en plomo (Samiul Islam et al., 2021). La estructura es  $\text{FTO}/\text{n-}\text{WO}_3/\text{i-}\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnBr}_3/\text{p-CuSbS}_2/\text{Fe}$ , como se muestra en la figura 2.

La alineación de bandas se verificó a partir de los valores de energía reportados en la literatura, considerando la ecuación de eficiencia cuántica externa (EQE), la cual relaciona la respuesta espectral con la absorción de la perovskita y la recolección de portadores en las capas de transporte como se muestra en la ecuación siguiente (Moser, 2023):

$$EQE(\lambda) = \frac{J_{ph}(\lambda)}{q \cdot \phi_{ph}(\lambda)} \quad (6)$$

Donde  $J_{ph}(\lambda)$  es la densidad de corriente fotogenerada,  $q$  la carga elemental y  $\phi(\lambda)$  el flujo de fotones incidentes a la longitud de onda  $\lambda$ .

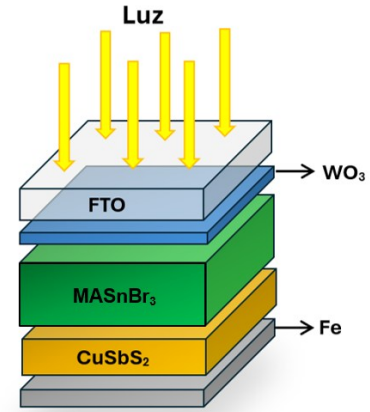


Figura 2. Arquitectura de la celda solar estudiada. Nota: Elaboración propia de los autores.

En este sentido, la inclusión de la ecuación (6) permite establecer un marco cuantitativo para evaluar la contribución espectral de la perovskita en la generación de portadores y su posterior extracción en las capas de transporte (Firdaus et al., 2021).

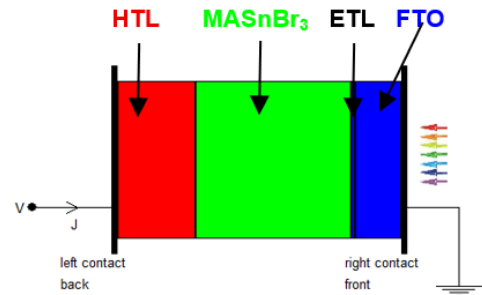


Figura 3. Visualización de la celda propuesta en la interfaz de SCAPS-1D. Burgelman, M., Nollet, P., & Degraeve, S. (2021). SCAPS-1D (Versión 3.3.09) [Software]. University of Gent

De esta manera, la eficiencia cuántica externa no solo proporciona un criterio de validación de la alineación de bandas previamente descrita, sino que también constituye un vínculo directo entre las propiedades ópticas del absorbedor y el desempeño eléctrico del dispositivo.

Así, el análisis de la EQE se convierte en una herramienta fundamental para correlacionar los parámetros de diseño estructural con la respuesta fotoeléctrica global de la celda.

### 2.4 Parámetros de la simulación

La arquitectura de la celda fue implementada en SCAPS-1D mediante la definición de los espesores, energías de banda prohibida y niveles de afinidad electrónica, entre otros parámetros reportados para cada capa, siguiendo estrategias similares a las presentadas en trabajos previos. La tabla 1 comprende los parámetros de material definidos para la simulación.



Tabla 1. Parámetros de Simulación en SCAPS-1D (FTO, WO<sub>3</sub>, MASnBr<sub>3</sub>, CuSbS<sub>2</sub>).

Parámetros	FTO	WO <sub>3</sub>	MASnBr <sub>3</sub>	CuSbS <sub>2</sub>
Espesor (μm)	0.30	0.02	1.00	Variable
E <sub>g</sub> (eV)	3.50	2.60	1.30	1.58
Afinidad electrónica (eV)	4.00	3.80	4.17	4.20
Permitividad dieléctrica (relativa)	9.00	4.80	10.0	14.60
Densidad efectiva de estados de CB (1/cm <sup>3</sup> )	2.2×10 <sup>18</sup>	2.2×10 <sup>21</sup>	2.2×10 <sup>18</sup>	2×10 <sup>18</sup>
Densidad efectiva de estados de VB (1/cm <sup>3</sup> )	1.8×10 <sup>19</sup>	2.2×10 <sup>21</sup>	1.8×10 <sup>18</sup>	2.2×10 <sup>19</sup>
Velocidad térmica del electrón (cm/s)	10 <sup>7</sup>	10 <sup>7</sup>	10 <sup>7</sup>	10 <sup>7</sup>
Velocidad térmica del hueco (cm/s)	10 <sup>7</sup>	10 <sup>7</sup>	10 <sup>7</sup>	10 <sup>7</sup>
Movilidad del electrón (cm <sup>2</sup> /Vs)	20.0	30.0	1.60	49.0
Movilidad del hueco (cm <sup>2</sup> /Vs)	10.0	30.0	1.60	49.0
Densidad de donantes uniforme y superficial ND (1/cm <sup>3</sup> )	2×10 <sup>19</sup>	6.35×10 <sup>17</sup>	10 <sup>13</sup>	0
Densidad de aceptores uniforme y superficial NA (1/cm <sup>3</sup> )	10 <sup>15</sup>	0	10 <sup>13</sup>	1.38×10 <sup>18</sup>
Densidad de defectos Nt	10 <sup>13</sup>	10 <sup>15</sup>	10 <sup>15</sup>	10 <sup>14</sup>
Referencia	Sharma et al., 2022	Mim, 2025	Samiul Islam et al., 2021	Valeti et al., 2023

Las simulaciones se realizaron considerando condiciones estandarizadas ampliamente reportadas en la literatura para caracterización fotovoltaica (Swarnkar et al., 2016; Moujoud, 2022).

Se implementó un espectro de iluminación AM 1.5G con una densidad de potencia incidente de 100 mW/cm<sup>2</sup>, correspondiente a las condiciones estándar de prueba (STC). La temperatura de operación se fijó en 300 K como caso base, con análisis adicionales que consideraron variaciones térmicas en el rango de 250–350 K para evaluar el comportamiento termoestable del dispositivo. El barrido de voltaje aplicado se configuró desde -0.8 V hasta +0.8 V con incrementos de 0.01 V, permitiendo la obtención de curvas de densidad de corriente-voltaje (J-V) con adecuada resolución para la identificación precisa del punto de máxima potencia. Todos los parámetros críticos de material, dimensiones de capa, propiedades de transporte y defectos utilizados en las simulaciones se resumen de manera estandarizada en la Tabla 2, la cual consolida valores reportados en literatura especializada y asegura la trazabilidad de los datos de entrada.

La validación inicial se llevó a cabo mediante la simulación de perovskita MASnBr<sub>3</sub>, usando los parámetros

estudiados por Samiul Islam et al., 2021, considerando su HTL y ETL reportados como referencia (Spiro-OMeTAD y NiO). Esta validación permitió establecer una línea base confiable y verificar la correcta implementación de los modelos físicos en SCAPS-1D antes de introducir las modificaciones propuestas.

Tabla 2. Parámetros Estandarizados usados en SCAPS-1D.

Parámetros Estándar	Valores
Temperatura (K)	300
Frecuencia (Hz)	10 <sup>6</sup>
Iluminación	AM1.5G
Acción	C-V
V1 (V)	-0.8
V2 (V)	0.8
Número de puntos	81
Incremento (V)	0.02
Contacto Izquierdo (eV)	4.7
Referencias	(Sharma et al. 2022; Madan et al. 2020; Noel et al., 2014)

La validación inicial se llevó a cabo mediante la simulación de perovskita MASnBr<sub>3</sub>, usando los parámetros estudiados por Samiul Islam et al., 2021, considerando su HTL y ETL reportados como referencia (Spiro-OMeTAD y NiO). Esta validación permitió establecer una línea base confiable y verificar la correcta implementación de los modelos físicos en SCAPS-1D antes de introducir las modificaciones propuestas. En este estudio se sustituyeron dichas capas por alternativas más estables y económicas, empleando CuSbS<sub>2</sub> como capa transportadora de huecos (HTL) en sustitución de Spiro-OMeTAD y NiO, y WO<sub>3</sub> como capa transportadora de electrones (ETL) en reemplazo de TiO<sub>2</sub>. Esta selección se fundamenta en las limitaciones reportadas para el TiO<sub>2</sub>, el cual presenta degradación bajo exposición continua a radiación UV, así como en la mayor estabilidad térmica y química ofrecida por el WO<sub>3</sub>.

Tabla 3. Comparación de parámetros eléctricos de HTL para Spiro-OMeTAD, NiO y CuSbS<sub>2</sub>

HTL	Spiro-OMeTAD	NiO	CuSbS <sub>2</sub>
E <sub>g</sub> (eV)	2.88	3.6	1.58
Afinidad electrónica (eV)	2.05	1.8	4.20
Permitividad dieléctrica (relativa)	3	11.7	14.60
Referencia	Singh et al. 2021	Samiul Islam et al., 2021	Valeti et al., 2023

El objetivo de esta comparativa fue evaluar el desempeño fotovoltaico de la misma perovskita MASnBr<sub>3</sub> bajo diferentes combinaciones de transporte de carga, obteniendo parámetros clave como voltaje en circuito abierto, corriente de cortocircuito, factor de forma y eficiencia. El análisis comparativo sistemático permitió cuantificar la efectividad de las nuevas capas de transporte frente a la configuración convencional reportada por Islam et al., asegurando que las simulaciones fueran coherentes y comparables con resultados previamente publicados. Además, SCAPS-1D permitió analizar la influencia de parámetros críticos como la densidad de defectos en la perovskita y el HTL, la movilidad de portadores, el espesor de las capas y la temperatura de operación, facilitando la evaluación integral del rendimiento del dispositivo en relación con la configuración propuesta de HTL y ETL.

### 2.5 Flujo de Trabajo para Simulación Fotovoltaica con SCAPS-1D.

La simulación se implementó en el entorno SCAPS-1D, un software validado para dispositivos fotovoltaicos de película

delgada. SCAPS-1D resuelve las ecuaciones de Poisson y continuidad acopladas, determinando la distribución espacial del potencial y los perfiles de carga, y obtiene directamente la curva corriente-voltaje bajo iluminación estándar. A partir de la curva J-V simulada se calculan los parámetros de desempeño ( $V_{oc}$ ,  $J_{sc}$ , factor de llenado FF y eficiencia  $\eta$ ) mediante las fórmulas fotovoltaicas convencionales. A continuación, se detallan los pasos seguidos, con justificación técnica de cada uno para asegurar la reproducibilidad:

1. Implementación de la estructura en SCAPS-1D: Se definió la estructura n-i-p propuesta (FTO/ $WO_3$ / $CH_3NH_3SnBr_3$ /CuSbS<sub>2</sub>/Fe) en SCAPS. A cada capa se le asignaron espesor, brecha de banda y afinidad electrónica de acuerdo con valores reportados en la literatura (ver Tabla 1). Asimismo, se establecieron las movilidades de portadores, densidad efectiva de estados y concentraciones de dopaje (Na, Nd) siguiendo las referencias previas, de modo que la simulación refleje características realistas de cada material.
2. Condiciones estándar de simulación: Se empleó iluminación AM 1.5G con intensidad de 100 mW/cm<sup>2</sup> a temperatura T=300 K. El voltaje aplicado al dispositivo se barrió desde -0.8 V hasta +0.8 V para trazar la curva J-V completa. Estas condiciones replican protocolos comunes en simulaciones fotovoltaicas y permiten extraer de forma directa  $V_{oc}$ ,  $J_{sc}$ , FF y  $\eta$ . Adicionalmente se evaluó el comportamiento térmico variando la temperatura hasta 350 K para estudiar la estabilidad del dispositivo.
3. Validación del modelo (calibración inicial): Previo a los estudios propuestos, se simuló la celda de referencia con absorbedor  $CH_3NH_3SnBr_3$  usando Spiro-OMeTAD como HTL y  $TiO_2$  como ETL (configuración de Islam et al.). Se compararon los parámetros fotovoltaicos obtenidos con los valores publicados y, de ser necesario, se ajustaron parámetros de recombinación no radiativa o densidades de defectos superficiales para reproduciendo el resultado experimental. Sólo tras validar la consistencia con el caso base se reemplazaron Spiro-OMeTAD y  $TiO_2$  por CuSbS<sub>2</sub> y  $WO_3$ , respectivamente. Este paso asegura que las simulaciones sean coherentes con la literatura previa y que cualquier mejora responda a los cambios intencionados.
4. Estudios paramétricos sistemáticos: Con el modelo validado, se realizaron barridos variando un parámetro a la vez, manteniendo fijos los demás:
  - Espesor de HTL (CuSbS<sub>2</sub>): se varió de 0.03 a 0.50  $\mu m$  para identificar el rango óptimo.
  - Densidad de defectos neutros en CuSbS<sub>2</sub>: se exploró desde  $1 \times 10^{10}$  hasta  $1 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$  (pasos logarítmicos), evalu-

ando la tolerancia del material a defectos estructurales.

- Función de trabajo del contacto metálico: se simulon metales con  $\phi=4.63, 4.74, 4.80, 4.81 \text{ eV}$  (correspondientes a Nb, Ag, Ta, Fe), analizando el efecto en la alineación de bandas y las pérdidas en la interfaz metal/semiconductor.
  - Temperatura de operación: se consideraron valores de 300 K hasta 350 K, para valorar el comportamiento térmico del dispositivo.
5. Extracción y análisis de resultados: Para cada simulación, SCAPS generó la curva J-V completa desde la cual se obtuvieron  $V_{oc}$ ,  $J_{sc}$ , FF y  $\eta$  mediante las ecuaciones estándar. Adicionalmente, se examinó el diagrama de bandas energéticas y la distribución de portadores en cada capa bajo iluminación normal. Este análisis de perfiles de banda y de carga permitió interpretar los mecanismos de recombinación y transporte internos según los cambios de parámetros. Finalmente, se correlacionaron las variaciones paramétricas con las tendencias en el rendimiento (por ejemplo, identificando el rango de espesor óptimo de CuSbS<sub>2</sub> donde la eficiencia se maximiza), estableciendo así criterios cuantitativos de optimización del dispositivo.

La secuencia metodológica seguida en este estudio obedece a una lógica de validación y optimización progresiva. En primera instancia, la calibración con un dispositivo de referencia reportado en la literatura aseguró la coherencia del modelo y estableció un punto de comparación verificable. Posteriormente, la incorporación de  $WO_3$  y CuSbS<sub>2</sub> como capas de transporte se justificó por su potencial como alternativas de bajo costo, mayor estabilidad y compatibilidad con perovskitas, lo que refuerza el valor innovador del análisis.

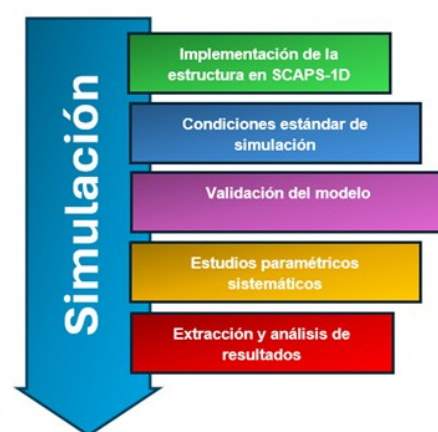


Figura 4. Esquema de flujo de trabajo en la simulación con SCAPS-1D. Nota: Elaboración propia de los autores

El orden de los barridos paramétricos respondió a una estrategia de aislamiento sistemático: primero se exploraron variables intrínsecas al material, como el espesor y la densidad de defectos, para después abordar factores extrínsecos como la función de trabajo del contacto y la temperatura de operación. Este enfoque permitió identificar intervalos óptimos de desempeño, evaluar sensibilidades crí-

críticas y, en consecuencia, establecer vínculos claros entre las propiedades microscópicas de los materiales y las métricas macroscópicas de eficiencia, dotando de solidez a las conclusiones numéricas y aportando una base razonada para su eventual validación experimental. No obstante, el protocolo de simulación incorpora limitaciones inherentes al marco numérico empleado que deben ser expuestas con rigor. SCAPS-1D, al ser una herramienta de modelado unidimensional, no captura heterogeneidades tridimensionales ni fenómenos espaciales complejos tales como irregularidades morfológicas a escala micrométrica, migración iónica transitoria o procesos de degradación ambiental que afectan la estabilidad operativa de celdas basadas en perovskitas y materiales emergentes; estas ausencias pueden inducir discrepancias significativas entre predicciones numéricas y comportamientos experimentales (Saidarsan et al., 2025). Del mismo modo, la dependencia de parámetros de entrada extraídos mayoritariamente de la literatura o de estimaciones bibliográficas introduce un nivel de idealización que puede no reflejar variaciones reales de síntesis y procesamiento, limitando la generalidad de los valores cuantitativos obtenidos. Por tanto, los resultados deben interpretarse como predicciones orientativas y criterios de priorización para experimentación subsecuente, y no como determinaciones absolutas de rendimiento en condiciones de fabricación. En apoyo a esta cautela, la literatura reciente discute ejemplos y prácticas para identificar y mitigar predicciones no realistas en estudios basados en SCAPS-1D (Saidarsan et al., 2025), de modo que las recomendaciones derivadas de los barridos paramétricos se empleen como guías de diseño sujetas a validación experimental y a análisis complementarios de modelado multidimensional.

## 2.6 Técnicas de Análisis de Datos y Procesamiento de Resultados

El análisis sistemático de resultados incluyó:

Procesamiento de curvas J–V: Extracción automática de parámetros fotovoltaicos ( $V_{oc}$ ,  $J_{sc}$ , FF,  $\eta$ ) mediante algoritmo de punto de máxima potencia, con verificación de consistencia en curvas y ausencia de discontinuidades.

Validación comparativa: Cálculo de error porcentual relativo frente a datos de referencia de Samiul Islam et al., 2021 mediante la ecuación obtenida en el trabajo de Moser, 2023:

$$Error(\%) = \frac{|P_{sim} - P_{ref}|}{P_{ref}} \times 100 \quad (7)$$

Criterios de optimización: Maximización de eficiencia (PCE) como objetivo principal, con criterios de calidad FF>75% y estabilidad numérica verificada en triplicados. La identificación de óptimos se realizó mediante interpolación polinómica en regiones de máximo desempeño.

Análisis de reproducibilidad: Verificación de consistencia en mínimo 3 ejecuciones consecutivas, con validación

de tendencias cualitativas con reportes experimentales de materiales análogos (Obare et al., 2018).

La implementación práctica de este protocolo siguió un flujo de trabajo automatizado y verificable: primero se exportaron las curvas J–V en formato tabular desde SCAPS-1D y se aplicó un algoritmo de detección del punto de máxima potencia que calcula  $J_{mp}$  y  $V_{mp}$  por búsqueda numérica del producto  $J \cdot V$ ; los valores obtenidos para  $V_{oc}$ ,  $J_{sc}$ , FF y  $\eta$  fueron entonces contrastados con una inspección gráfica rápida para descartar artefactos de convergencia (saltos, discontinuidades u oscilaciones residuales). Las simulaciones con anomalías se re-ejecutaron tras ajustar malla o tolerancias, y sólo las series con residuos numéricos aceptables se incorporaron al análisis estadístico.

Para la validación cuantitativa se calculó el error porcentual relativo respecto a los resultados de Samiul Islam et al., 2021 y se registraron además métricas complementarias para cada curva J–V; se consideraron coherentes con la literatura las configuraciones con Error < 5%, mientras que discrepancias superiores se documentaron y justificaron mediante la comparación de parámetros de entrada (densidades de defecto, offsets de banda, resistencias serie/paralelo). Este procedimiento facilitó respuestas objetivas a revisores y permitió trazar la fuente física de las diferencias observadas. Los criterios de optimización combinaron un objetivo primario (maximizar  $\eta$ ) con condiciones de calidad que sirven como filtros prácticos, por ejemplo, exigir FF>75% elimina soluciones con pérdidas ohmicas significativas aunque presenten  $\eta$  aparente elevada. Además, las condiciones óptimas se verificaron mediante triplicados numéricos y se reportaron medias y desviaciones estándar para las métricas principales, ofreciendo una cuantificación de la incertidumbre numérica.

Adicionalmente, el tratamiento de datos incluyó la organización y análisis de las bases de datos numéricas generadas por SCAPS-1D, que contienen en formato tabular los valores de  $V_{oc}$ ,  $J_{sc}$ , FF,  $\eta$  y parámetros intermedios  $J_{mp}$ ,  $V_{mp}$ , resistencias, densidades de portadores, entre otros). A partir de estas salidas se construyeron gráficas J–V para cada configuración simulada, lo que permitió evaluar de manera directa la calidad de la curva y la consistencia de los parámetros extraídos.

De forma complementaria, se elaboraron gráficas de relación de  $V_{oc}$ ,  $J_{sc}$ , FF y  $\eta$  en función de la variable modificada en cada barrido paramétrico (espesor de la capa de transporte, densidad de defectos, función de trabajo del contacto o temperatura), lo que permitió identificar intervalos de desempeño óptimo y analizar la sensibilidad de cada métrica frente a cambios específicos. Estos resultados se integraron posteriormente en tablas comparativas y gráficas de desempeño, facilitando la interpretación visual y cuantitativa de tendencias globales y el contraste con configuraciones de referencia. De este modo, el procesamiento de bases de datos, curvas J–V y gráficas paramétricas aseguró un análisis sistemático, reproducible y coherente con los estándares metodológicos en simulaciones fotovoltaicas (Guo et al., 2018; Araújo et al., 2025).



### 3. Resultados y Discusión

Para establecer una base confiable para el análisis posterior, se realizó una validación inicial mediante la simulación de la perovskita  $\text{MASnBr}_3$  de Samiul Islam et al., 2021, utilizando su configuración reportada con  $\text{TiO}_2$  como ETL y  $\text{NiO}$  como HTL, los parámetros fotovoltaicos obtenidos ( $V_{oc}$ ,  $J_{sc}$ , FF,  $\eta$ ) mostraron una estrecha concordancia cuantitativa con los resultados publicados por los autores, presentando variaciones inferiores al 2%. Esta alta coherencia entre nuestras simulaciones y los datos experimentales de referencia valida la robustez del modelo numérico implementado en SCAPS-1D y confirma la precisión de los parámetros físicos y de simulación definidos para la capa absorbente de perovskita. Por lo tanto, este paso sirve como un punto de partida confiable para evaluar de manera aislada el impacto de la sustitución de las capas de transporte convencionales por las alternativas propuestas,  $\text{WO}_3$  como ETL y  $\text{CuSbS}_2$  como HTL, asegurando que cualquier cambio en el rendimiento se atribuya correctamente a estas nuevas capas y no a discrepancias en el modelo.

#### 3.1 Efecto del espesor de la capa HTL ( $\text{CuSbS}_2$ ).

La influencia del espesor de la capa de  $\text{CuSbS}_2$  en la arquitectura  $\text{FTO}/\text{WO}_3/\text{MASnBr}_3/\text{CuSbS}_2$  se estudió en el rango de 0.03 a 0.50  $\mu\text{m}$ , evaluando los parámetros fotovoltaicos clave: eficiencia ( $\eta$ ), factor de llenado (FF), densidad de corriente de cortocircuito ( $J_{sc}$ ) y voltaje de circuito abierto ( $V_{oc}$ ), obteniendo los resultados mostrados en la Figura 5. La eficiencia de conversión mostró un incremento inicial, pasando de 15.1 % a 19.67 % al aumentar el espesor de 0.03 a 0.11  $\mu\text{m}$ , alcanzando posteriormente una meseta cercana al 20.4 % para espesores superiores a 0.35  $\mu\text{m}$ . El factor de llenado (FF) alcanzó un máximo en 0.11  $\mu\text{m}$  (81.48 %), seguido de una disminución progresiva hasta 79.07 % en 0.50  $\mu\text{m}$ . El  $J_{sc}$  apenas varió (34.767–34.788  $\text{mA}/\text{cm}^2$ ), mientras que el  $V_{oc}$  aumentó de 0.54 V a 0.74 V en todo el rango de estudio.

Los datos indican que la dependencia de rendimiento con el espesor no es una mera cuestión de absorción óptica, sino el resultado de un compromiso entre generación de portadores y eficiencia de transporte (Lupke, 2023; Obare et al., 2018).

En espesores muy reducidos la cobertura del HTL es incompleta, lo que favorece la recombinación superficial y limita  $V_{oc}$ ; a espesores intermedios, la continuidad eléctrica mejora, reduciendo la resistencia serie y elevando el FF; a espesores mayores la mayor distancia de transporte incrementa la recombinación volumétrica y las pérdidas resistivas, provocando la meseta o ligero retroceso en  $\eta$  (Tripathi et al., 2022).

De manera pertinente para los objetivos del trabajo, identificar condiciones estructurales del HTL que maximicen eficiencia y estabilidad, se determina un intervalo óptimo de espesor en 0.19–0.27  $\mu\text{m}$ . En ese rango se conserva una alta eficiencia ( $\approx 20.4$  %), se minimizan las pérdidas por recombinación de interfaz y

volumen, y se mantiene un FF competitivo, lo que sugiere que dicho espesor ofrece el mejor compromiso entre absorción, pasivación y transporte de carga en la configuración propuesta.

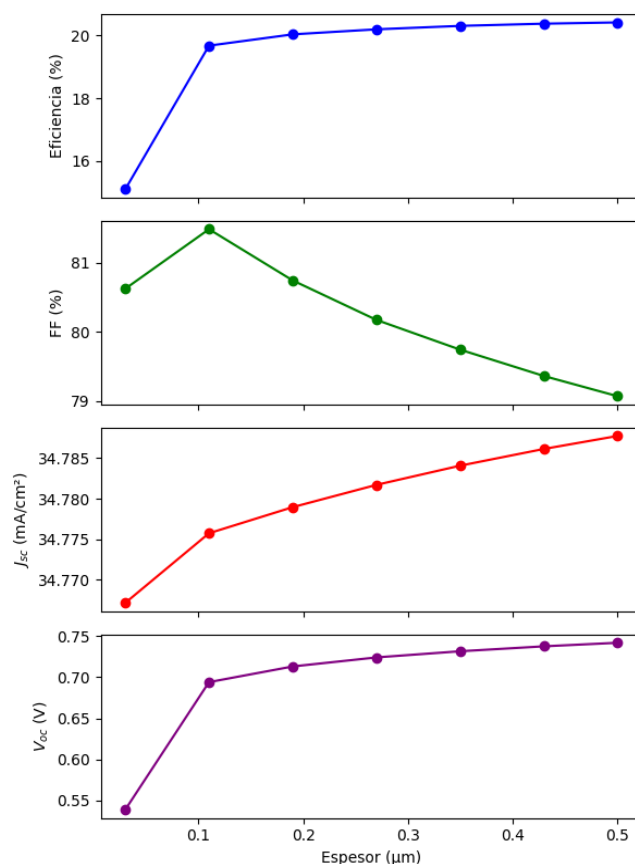


Figura 5. Efecto de la variación de espesor de HTL propuesto en el rendimiento de CS. Nota: Elaboración propia de los autores.

En términos prácticos, estos resultados orientan la ingeniería del HTL: la deposición dirigida a obtener cobertura homogénea y conductividad suficiente en el intervalo 0.19–0.27  $\mu\text{m}$  debería maximizar rendimiento sin incurrir en penalizaciones por recombinación o resistencia. Esto es especialmente relevante si el HTL se compara con soluciones convencionales (Spiro-OMeTAD,  $\text{NiO}$ ), ya que  $\text{CuSbS}_2$  ofrece además ventajas de estabilidad y coste siempre que se controle su espesor y calidad microestructural.

#### 3.2 Efecto de la función de trabajo del contacto metálico sobre el rendimiento de la celda.

La función de trabajo del metal (MWF) en la arquitectura basada en  $\text{MASnBr}_3$  se evaluó con contactos de Nb(112) (4.63 eV), Ag(111) (4.74 eV), Ta(110) (4.80 eV) y Fe(111) (4.81 eV) reportados por Haynes, 2016. Los resultados muestran una correlación directa entre el incremento de la MWF y la mejora del desempeño fotovoltaico.

La eficiencia de conversión ( $\eta$ ) creció casi linealmente de 14.62 % (Nb) a 20.41 % (Fe), impulsada por la reducción de recombinación en la interfaz metal/semiconductor. Una MWF más alta favorece una alineación de bandas más adecuada, disminuye barreras de extracción y facilita un transporte selectivo de portadores.

El factor de llenado (FF) también mejoró, pasando de 74.8 %

a 79.07 %, lo que refleja una menor resistencia de contacto y curvas J–V más cuadradas, atribuibles a una interfaz más favorable para la extracción de cargas en metales de mayor MWF.

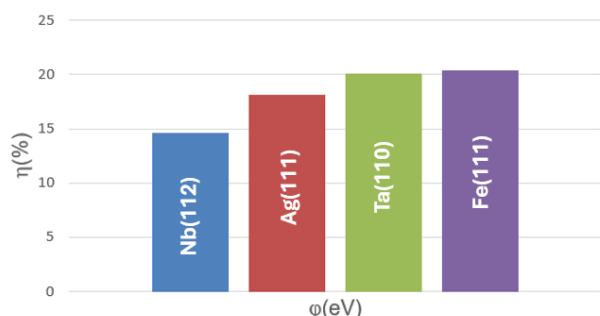


Figura 6. Gráfico de eficiencia alcanzada con diferentes contactos metálicos y su función de trabajo. Nota:

Elaboración propia de los autores.

En contraste, la densidad de corriente de cortocircuito ( $J_{sc}$ ) se mantuvo prácticamente constante ( $\approx 34.787$  mA/cm<sup>2</sup>), confirmando que este parámetro depende de la absorción óptica en CuSbS<sub>2</sub> y no del contacto metálico. Las ligeras variaciones positivas sugieren únicamente una colecta marginalmente más eficiente (Mim et al., 2025).

Tabla 4. Resultados de simulación con variación de función de trabajo de contacto metálico posterior. Valores de MWF obtenidos por Haynes, 2016.

Material	φ (eV)	V <sub>oc</sub> (V)	J <sub>sc</sub> (mA/cm <sup>2</sup> )	FF(%)	η(%)
Nb(112)	4.63	0.562	34.7869	74.80	14.62
Ag(111)	4.74	0.671	34.7875	77.63	18.15
Ta(110)	4.8	0.731	34.7877	78.89	20.09
Fe(111)	4.81	0.742	34.7878	79.07	20.41

El voltaje de circuito abierto ( $V_{oc}$ ) fue el parámetro más sensible, con un aumento de 0.562 V (Nb) a 0.742 V (Fe). Esto se explica porque metales de baja MWF generan barreras Schottky profundas que incrementan la recombinación no radiativa, mientras que metales con alta MWF reducen dicha barrera, favoreciendo la extracción de huecos y elevando el  $V_{oc}$  (Samaki et al., 2023).

En síntesis, aunque la absorción óptica fija el valor de  $J_{sc}$ , los parámetros dependientes de la calidad de la interfaz ( $V_{oc}$ , FF y  $\eta$ ) se optimizan con contactos metálicos de mayor función de trabajo Samiul Islam et al., 2021. Esto convierte al Fe(111), o a metales con valores de MWF similares, en una opción estratégica para maximizar la eficiencia en dispositivos basados en CuSbS<sub>2</sub>.

### 3.3 Relación de densidad de defectos y su efecto sobre el rendimiento de la celda

El análisis del efecto de la densidad de defectos neutros (Nt) en la capa de CuSbS<sub>2</sub> evidencia una alta tolerancia intrínseca del material, manteniendo un desempeño estable hasta concentraciones de  $10^{15}$  cm<sup>-3</sup>. En este rango,  $\eta$ , FF,  $J_{sc}$  y  $V_{oc}$  permanecen prácticamente invariantes, lo que indica que los defectos neutros no generan niveles energéticos profundos capaces de inducir recombinación significativa (Obare et al., 2018). Solo a densidades extremadamente altas ( $\geq 10^{16}$  cm<sup>-3</sup>)

se observan pérdidas apreciables, principalmente en FF y en consecuencia en la eficiencia.

Este deterioro se atribuye a la función de los defectos como trampas de captura–liberación, que incrementan la resistencia efectiva y afectan la curva J–V cerca del punto de máxima potencia (Tan et al., 2018).

Tabla 5. Resultados de la simulación con variación en densidad de defectos neutros de CuSbS<sub>2</sub> como HTL

Nt (cm <sup>-3</sup> )	V <sub>oc</sub> (V)	J <sub>sc</sub> (mA/cm <sup>2</sup> )	FF(%)	η(%)
10 <sup>11</sup>	0.742	34.787738	79.08	20.41
10 <sup>12</sup>	0.742	34.787738	79.08	20.41
10 <sup>13</sup>	0.742	34.787738	79.08	20.41
10 <sup>14</sup>	0.742	34.787738	79.08	20.41
10 <sup>15</sup>	0.742	34.787738	79.08	20.41
10 <sup>16</sup>	0.7421	34.787719	79.01	20.40
10 <sup>17</sup>	0.7429	34.787555	78.41	20.26

La corriente de cortocircuito ( $J_{sc}$ ) se mantuvo prácticamente invariable, confirmando que los defectos neutros no alteran la absorción óptica ni la colecta de portadores. El voltaje de circuito abierto ( $V_{oc}$ ) mostró solo un ligero aumento a altas densidades, atribuible a la reducción marginal de la recombinación radiativa en condiciones de circuito abierto (Samaki et al., 2023).

En conjunto, estos resultados validan que CuSbS<sub>2</sub> ofrece una notable robustez frente a defectos, soportando la hipótesis de que constituye una alternativa más estable y confiable que HTLs orgánicos como Spiro-OMeTAD. Este hallazgo subraya la importancia de mantener densidades de defectos por debajo de  $10^{15}$  cm<sup>-3</sup> para preservar la eficiencia y garantizar la estabilidad del dispositivo (Obare et al., 2018).

### 3.4 Comportamiento térmico de la celda

El análisis del efecto de la temperatura revela un comportamiento atípico respecto a tecnologías fotovoltaicas convencionales, donde el aumento térmico suele degradar el desempeño.

En la arquitectura FTO/WO<sub>3</sub>/MASnBr<sub>3</sub>/CuSbS<sub>2</sub>/Fe(111), en cambio, todos los parámetros mejoran en el rango de 300–350 K, destacando el incremento cuasi lineal de  $V_{oc}$  y la eficiencia ( $\eta$ ) (Samiul Islam et al., 2021).

La eficiencia crece de manera sostenida, correlacionada con la ganancia en  $V_{oc}$ . Este resultado sugiere que la energía térmica adicional reduce procesos de recombinación no radiativa, favorece la pasivación de trampas poco profundas y, en consecuencia, optimiza la extracción de portadores.

El  $J_{sc}$  también presenta un aumento gradual, asociado a mayor movilidad y difusión de cargas inducidas térmicamente, mientras que el FF mejora gracias a la reducción de pérdidas resistivas internas (Dubey et al., 2022).

En síntesis, lejos de ser un factor limitante, la temperatura en este rango actúa como un elemento de optimización. Estos resultados son relevantes para condiciones reales de operación, donde los dispositivos superan habitualmente los 300 K, y refuerzan el objetivo de estabilidad planteado para esta arquitectura.

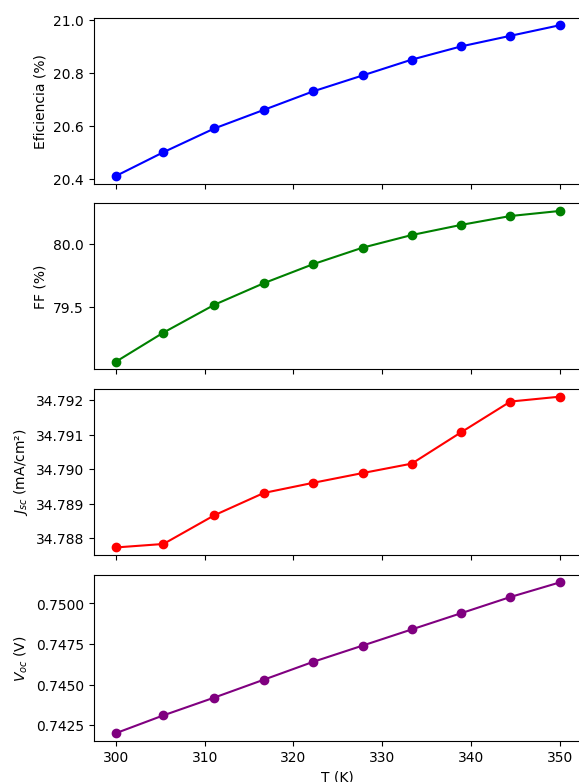


Figura 7. Efecto del cambio de temperatura sobre el rendimiento de CS. Nota: Elaboración propia de los autores.

### 3.5 Discusión integrada

La integración de los resultados obtenidos en las subsecciones anteriores permite trazar una visión global del desempeño de la arquitectura: FTO/ $\text{WO}_3$ /MASnBr<sub>3</sub>/CuSbS<sub>2</sub>/Fe(111).

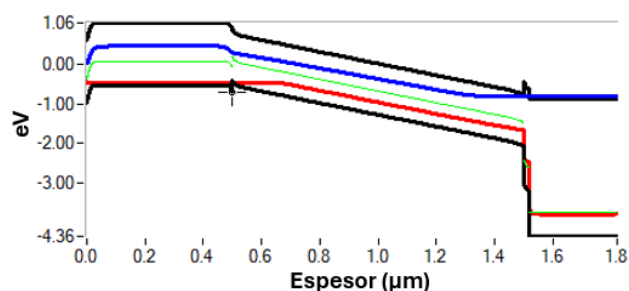


Figura 8. Diagrama de bandas de la celda solar propuesta. Nota: Elaboración propia de los autores.

Los cuatro factores analizados, espesor de la capa HTL, función de trabajo del contacto metálico, densidad de defectos y temperatura de operación, convergen en un mismo punto: la posibilidad de alcanzar eficiencias competitivas del orden de 20.4 %, acompañadas de estabilidad térmica y tolerancia a defectos, tres atributos esenciales para la viabilidad tecnológica de este tipo de celdas.

El control del espesor de CuSbS<sub>2</sub> demostró ser determinante para lograr un balance entre absorción eficiente y bajas pérdidas resistivas, situando el rango óptimo entre 0.19 y 0.27  $\mu\text{m}$ . La selección de contactos metálicos con alta función de trabajo, como Fe(111) (Haynes, 2016), permitió maximizar  $V_{oc}$  y FF mediante una alineación de bandas más favorable, reduciendo las

pérdidas en la interfaz. Por su parte, el análisis de defectos reveló una notable tolerancia de CuSbS<sub>2</sub> hasta densidades de  $10^{15} \text{ cm}^{-3}$ , lo que contrasta con la fragilidad de HTLs orgánicos convencionales (Sharma et al., 2022). Finalmente, el estudio térmico mostró que en el intervalo de 300–350 K no solo se preserva el rendimiento, sino que  $V_{oc}$  y  $\eta$  mejoran, lo que garantiza robustez en condiciones reales de operación.

Estos hallazgos se reflejan en los valores obtenidos bajo condiciones optimizadas ( $V_{oc} = 0.7513 \text{ V}$ ,  $J_{sc} = 34.7921 \text{ mA/cm}^2$ ,  $\text{FF} = 80.26 \%$  y  $\eta = 20.4 \%$ ), confirmando que la física de bandas y la microestructura del CuSbS<sub>2</sub> gobiernan el equilibrio entre transporte eficiente y recombinación (Devi et al., 2019). Así, la optimización de este material requiere tanto minimizar offsets de energía y defectos volumétricos como mejorar la conductividad interna para reducir pérdidas óhmicas.

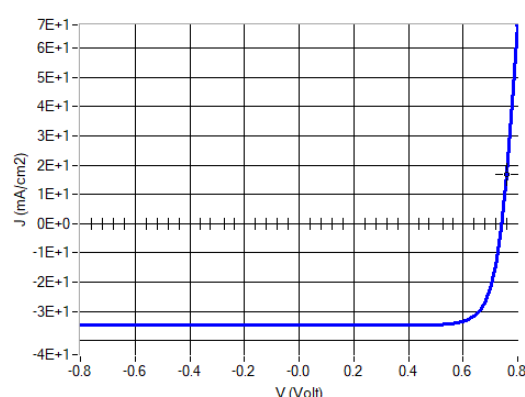


Figura 9. Gráfico J-V para celda solar optimizada. Nota: Elaboración propia de los autores.

En conjunto, los resultados demuestran que sustituir Spiro-OMeTAD y TiO<sub>2</sub> por CuSbS<sub>2</sub> y WO<sub>3</sub> no solo es factible, sino que constituye una estrategia sólida para desarrollar celdas de perovskita libres de plomo más estables, escalables y económicamente viables. La curva J-V correspondiente a la condición óptima muestra un trazo cuadrado bien definido, caracterizado por bajas pérdidas resistivas y una densidad de corriente estable en el rango de operación. Esta morfología confirma el acoplamiento eficiente entre la perovskita MASnBr<sub>3</sub> y las capas selectivas, validando que la eficiencia máxima alcanzada ( $\approx 20.4 \%$ ) no es solo un resultado numérico, sino la manifestación directa de una interfaz optimizada y un transporte balanceado de portadores.

Para contextualizar estos resultados, se elaboró una tabla comparativa con diferentes configuraciones de celdas de perovskita reportadas en la literatura, considerando variaciones en las capas de transporte y en los metales de contacto. Esta comparación evidencia que la arquitectura propuesta (FTO/ $\text{WO}_3$ /MASnBr<sub>3</sub>/CuSbS<sub>2</sub>/Fe) alcanza eficiencias del orden de 20.4 %, valores que la posicionan en un rango competitivo frente a configuraciones convencionales basadas en TiO<sub>2</sub>/Spiro-OMeTAD y otras alternativas libres de plomo. De esta forma, se refuerza el argumento de que la sustitución de materiales tradicionales por CuSbS<sub>2</sub> y WO<sub>3</sub> constituye una estrategia viable para avanzar hacia dispositivos más estables y escalables.

Tabla 6. Comparación de parámetros de optimización entre diferentes estructuras de celdas solares de perovskita libres de plomo.

Estructura	V <sub>oc</sub>	J <sub>sc</sub>	FF	eta	Ref.
FTO/TiO <sub>2</sub> /MASnBr <sub>3</sub> /NiO	0.81	31.88	84.89	21.66	Samul Islam et al., 2021
FTO/TiO <sub>2</sub> /MASnI <sub>3</sub> /Spiro-OMeTAD	0.98	33.86	66.33	22.21	Dubey et al., 2021
TCO/C <sub>60</sub> /MASbI <sub>3</sub> /CuSbS <sub>2</sub>	0.99	31.64	82.98	26.05	Sharma et al., 2022
ITO/WO <sub>3</sub> /Sr <sub>3</sub> SbI <sub>3</sub> /CuSbS <sub>2</sub>	1.07	35.03	80.81	30.51	Mim, 2025
FTO/WO <sub>3</sub> /MASnBr <sub>3</sub> /CuSbS <sub>2</sub>	0.75	34.79	80.26	20.4	Prop.

A pesar de estos avances, el estudio presenta limitaciones inherentes al enfoque numérico, como la dependencia de parámetros reportados en literatura y la ausencia de validación experimental directa. Futuras investigaciones deberán explorar la síntesis controlada de CuSbS<sub>2</sub> y WO<sub>3</sub>, evaluar su estabilidad a largo plazo bajo condiciones ambientales reales y extender la arquitectura hacia configuraciones en tándem. Asimismo, los resultados abren la puerta a aplicaciones en módulos fotovoltaicos de gran escala y a la integración con tecnologías de almacenamiento, lo que consolida a estas perovskitas libres de plomo como una plataforma prometedora para la transición energética sostenible.

#### 4. Conclusiones

En conclusión, este estudio demuestra mediante simulación numérica que la arquitectura FTO/WO<sub>3</sub>/MASnBr<sub>3</sub>/CuSbS<sub>2</sub>/Fe representa un avance significativo frente a las celdas de perovskita convencionales. La optimización del espesor de CuSbS<sub>2</sub> (0.19–0.27  $\mu\text{m}$ ) permitió alcanzar eficiencias del ~20.98% (V<sub>oc</sub> = 0.7513 V, J<sub>sc</sub> = 34.7921 mA/cm<sup>2</sup> y FF = 80.26 %), logrando un equilibrio óptimo entre la absorción fotónica y la supresión de recombinación. Este rendimiento no solo es competitivo con respecto a configuraciones que usan Spiro-OMeTAD o NiO, sino que la combinación propuesta de materiales ofrece ventajas clave en estabilidad y costo.

La arquitectura mostró una notable tolerancia a defectos neutros (hasta 10<sup>15</sup> cm<sup>-3</sup>) y un comportamiento térmico favorable en el rango de 300–350 K, características cruciales para su aplicabilidad en condiciones reales de operación. Sin embargo, es fundamental reconocer que estos resultados están sujetos a las limitaciones del modelo unidimensional, el cual considera interfaces ideales y no captura completamente fenómenos de degradación a largo plazo o el impacto de defectos cargados. Por lo tanto, si bien este trabajo establece un marco de diseño cuantitativo y evidencia el potencial de WO<sub>3</sub> y CuSbS<sub>2</sub> como reemplazos superiores para el TiO<sub>2</sub> y los HTLs orgánicos, su validación experimental sigue siendo un paso indispensable para confirmar esta viabilidad y trasladar el concepto al ámbito de la fabricación de dispositivos prácticos.

#### Referencias

- [1] Singh, A. K., et al. (2021). Performance optimization of lead-free MASnI<sub>3</sub> based solar cell with 27% efficiency by numerical simulation. *Optical Materials*, 117, 111193. <https://doi.org/10.1016/j.optmat.2021.111193>
- [2] Razmjoo, A., et al. (2019). Implementation of energy sustainability using hybrid power systems, a case study. *Energy Sources, Part A: Recovery, Utilization, and Environmental Effects*. <https://doi.org/10.1080/15567036.2019.1687623>
- [3] Swarnkar, A., et al. (2016). Quantum dot-induced phase stabilization of  $\alpha$ -CsPbI<sub>3</sub> perovskite for high-efficiency photovoltaics. *Science*, 354(6308), 92–95. <https://doi.org/10.1126/science.aag2700>
- [4] Devi, C., et al. (2019). Device simulation of lead-free MASnI<sub>3</sub> solar cell with CuSbS<sub>2</sub> (copper antimony sulfide). *Journal of Materials Science*, 54(7), 5615–5624. <https://doi.org/10.1007/s10853-018-03265-y>
- [5] Sharma, D., et al. (2022). Optimization of tin based perovskite solar cell employing CuSbS<sub>2</sub> as HTL: A numerical simulation approach. *Optical Materials*, 134, 113060. <https://doi.org/10.1016/j.optmat.2022.113060>
- [6] Choi, H., et al. (2014). Efficient star-shaped hole transporting materials with diphenylethynyl side arms for an efficient perovskite solar cell. *Journal of Materials Chemistry A*, 2(45), 19136–19140. <https://doi.org/10.1039/c4ta04179h>
- [7] Madan, J., et al. (2020). Numerical simulation of charge transport layer free perovskite solar cell using metal work function shifted contacts. *Optik*, 202, 163646. <https://doi.org/10.1016/j.ijleo.2019.163646>
- [8] Ma, J., et al. (2018). Elucidating the roles of TiCl<sub>4</sub> and PCBM fullerene treatment on TiO<sub>2</sub> electron transporting layer for highly efficient planar perovskite solar cells. *Journal of Physical Chemistry C*, 122(2), 1044–1053. <https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.7b09537>
- [9] Deepthi Jayan, K., et al. (2021). Comprehensive device modelling and performance analysis of MASnI<sub>3</sub> based perovskite solar cells with diverse ETM, HTM and back metal contacts. *Solar Energy*, 217, 40–48. <https://doi.org/10.1016/j.solener.2021.01.058>
- [10] Farhat, L. B., et al. (2024). Analysis of the role of A-cations in lead-free A<sub>3</sub>SbI<sub>3</sub> (A = Ba, Sr, Ca) perovskite solar cells. *Journal of Materials Science*, 59(15), 6365–6385. <https://doi.org/10.1007/s10853-024-09579-4>
- [11] Islam, M. S., et al. (2024). Investigation strain effects on the electronic, optical, and output performance of the novel inorganic halide perovskite Sr<sub>3</sub>SbI<sub>3</sub> solar cell. *Chinese Journal of Physics*, 88, 270–286. <https://doi.org/10.1016/j.cjph.2024.01.011>
- [12] Noel, N. K., et al. (2014). Lead-free organic-inorganic tin halide perovskites for photovoltaic applications. *Energy & Environmental Science*, 7, 3061–3068. <https://doi.org/10.1039/c4ee01076k>
- [13] Dubey, P., et al. (2022). Simulation engineering of heterojunction colloidal quantum dot-solar cell using tungsten trioxide (WO<sub>3</sub>) as an electron transport layer. In *Advances in VLSI, Communication, and Signal Processing: Select Proceedings of VCAS 2021* (pp. 223–231). Springer Nature Singapore. [https://doi.org/10.1007/978-981-19-2631-0\\_20](https://doi.org/10.1007/978-981-19-2631-0_20)
- [14] Guo, X., et al. (2018). A 16.5% efficient perovskite solar cells with inorganic NiO film as hole transport material. *IEEE Journal of Photovoltaics*, 8(4), 1039–1043. <https://doi.org/10.1109/jphotov.2018.2825228>
- [15] Araújo, V. H. D., Nogueira, A. F., Tristão, J. C., & dos Santos, L. J. (2025). Advances in lead-free perovskite solar cell design via SCAPS-1D simulations. *RSC Sustainability*. <https://doi.org/10.1039/D5SU00526D>
- [16] Tripathi, D., Mishra, M., Sengar, V. V., & Ullas, A. V. (2022). Lead-free perovskite solar cell by using SCAPS-1D. *Materials Today: Proceedings*. <https://doi.org/10.1016/j.matpr.2022.04.832>
- [17] Mim, E. M. K. (2025). Performance analysis of Sr<sub>3</sub>SbI<sub>3</sub>-based perovskite solar cell using SCAPS-1D. *Advances in Materials Science and Engineering*. <https://doi.org/10.1155/amse/7134012>

- [18] Samiul Islam, M. F., Sobayel, K., Al-Kahtani, A., Islam, M. A., Muhammad, G., Amin, N., Shahiduzzaman, M., & Akhtaruzzaman, M. (2021). Defect study and modelling of  $\text{SnX}_3$ -based perovskite solar cells with SCAPS-1D. *Nanomaterials*. <https://doi.org/10.3390/nano11051218>
- [19] Valeti, G. N. J., Kumar, S., Kumar, R., & Kumar, S. (2023). Numerical simulation and optimization of lead-free  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3$  perovskite solar cell using SCAPS-1D. *Materials Today: Proceedings*. <https://doi.org/10.1016/j.matpr.2023.02.160>
- [20] Lübke, D. H. (2023). Understanding the thickness and light-intensity dependent performance of molecular solar cells. *ACS Materials Au*. <https://doi.org/10.1021/acsmaterialsau.2c00070>
- [21] Moujoud, I. S. (2022). Efficiency enhancement by simulation method of copper antimony sulfide ( $\text{CuSbS}_2$ ) solar cell using SCAPS-1D. *Materials Today: Proceedings*. <https://doi.org/10.1016/j.matpr.2022.02.157>
- [22] Haynes, W. M. (Ed.). (2016). *Handbook of chemistry and physics* (97th ed.). CRC Press.
- [23] Samaki, K. S., Tchangnwa Nya, F., Kenfack, G. D., & Laref, A. (2023). Materials and interfaces properties optimization for high-efficient and more stable  $\text{RbGeI}_3$  perovskite solar cells: Optoelectrical modelling. *Scientific Reports*. <https://doi.org/10.1038/s41598-023-42471-w>
- [24] Obare, L. N., Isoe, W., Nalianya, A., Mageto, M., & Odari, V. (2024). Numerical study of copper antimony sulphide ( $\text{CuSbS}_2$ ) solar cell by SCAPS-1D. *Heliyon*. <https://doi.org/10.1016/j.heliyon.2024.e26896>
- [25] Tan, M. H., Che, F., Wei, M., et al. (2018). Dipolar cations confer defect tolerance in wide-bandgap metal halide perovskites. *Nature Communications*. <https://doi.org/10.1038/s41467-018-05531-8>
- [26] Firdaus, M.-S., Farooq, H., Abu-Bakar, S. H., Ardila-Rey, J. A., Sellami, N., Kilpatrick, C., Muhtazaruddin, M. N., Bani, N. A., & Zulkipli, M. (2021). Mathematical modelling of a static concentrating photovoltaic: simulation and experimental validation. *Applied Sciences*, 11(9), 3894. <https://doi.org/10.3390/app11093894>
- [27] Moser, M. (2023) Measurement techniques for the external quantum efficiency of perovskite and organic solar cells (Tesis de maestría). Johannes Kepler University. [https://www.jku.at/fileadmin/gruppen/166/Publikationen/Thesis/Moser\\_Master.pdf?utm](https://www.jku.at/fileadmin/gruppen/166/Publikationen/Thesis/Moser_Master.pdf?utm)
- [28] Saidarsan, A. (2025). A critical review of unrealistic results in SCAPS-1D. *Solar Energy Materials & Solar Cells*. <https://doi.org/10.1016/j.solmat.2024.113230>