












## Simulación numérica de celdas solares de perovskita: estudio teórico del fenómeno de histéresis

### Numerical simulation of perovskite solar cells: theoretical study of the phenomenon of hysteresis

Mandujano-Ramírez, Humberto, Julián \*<sup>a</sup>, Figueroa-Ramírez, Sandra Jazmín<sup>b</sup>, Flores-Gil, Aarón<sup>c</sup> y Martínez-Vargas, Sergio<sup>d</sup>

<sup>a</sup>  Universidad Autónoma del Carmen •  LTC-9972-2024 •  0000-0003-3714-5564 •  266189

<sup>b</sup>  Universidad Autónoma del Carmen •  AIB-1429-2022 •  0000-0003-1368-1741 •  164797

<sup>c</sup>  Universidad Autónoma del Carmen •  0000-0002-2302-2056 •  121166

<sup>d</sup>  Universidad Autónoma del Carmen •  AGW-0814-2022 •  0000-0002-2499-3970 •  100782

**Clasificación:**

**DOI:** <https://doi.org/10.35429/H.2025.7.89.101>

Área: Ingeniería

Campo: Ciencias tecnológicas

Disciplina: Tecnología de materiales

Subdisciplina: Propiedades de los materiales

#### Key Handbooks

El presente trabajo se realiza un estudio computacional del mecanismo de operación de una celda solar de perovskita, el cual tiene como objetivo reproducir la curva corriente voltaje a través de la solución de la ecuación que describe el mecanismo de operación de dicha celda, la cual esta implementada en el software Scaps, además se identificará los factores que inducen el fenómeno de histéresis el cual es un problema que afecta a las celdas de perovskitas. Una de las principales conclusiones de nuestro estudio es la dependencia de la histéresis con la magnitud del coeficiente de difusión, así mismo se muestra la dependencia de la eficiencia del sistema con los índices de histéresis los cuales fueron hallados en diferentes escenarios. Tres los autores del presente trabajo cuentan con el reconocimiento dado por el sistema nacional de investigadores e investigadoras, así mismo todos son profesores de tiempo completo que cuentan con el perfil deseable del prodep, cabe mencionar que todos cuentan con adscripción en la Universidad Autónoma del Carmen.

Área: Difusión y acceso universal a la ciencia.

**Citación:** Mandujano-Ramírez, Humberto, Julián, Figueroa-Ramírez, Sandra Jazmín, Flores-Gil, Aarón y Martínez-Vargas, Sergio. 2025. Simulación numérica de celdas solares de perovskita: estudio teórico del fenómeno de histéresis. 89-101. ECORFAN.

\* ✉ [\[hmandujano@pampano.unacar.mx\]](mailto:hmandujano@pampano.unacar.mx)

**Handbook shelf URL:** <https://www.ecorfan.org/handbooks.php>



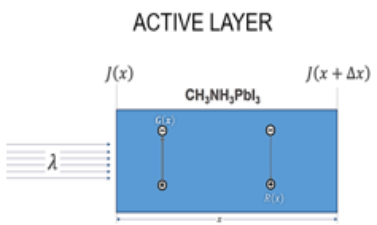

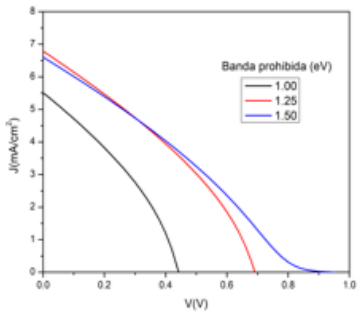
ISBN: 978-607-8948-65-9 /©2009 The Authors. Published by ECORFAN-Mexico, S.C. for its Holding Mexico on behalf of Handbook HDMA. This is an open access chapter under the CC BY-NC-ND license [<http://creativecommons.org/licenses/by-nc-nd/4.0/>]

Peer Review under the responsibility of the Scientific Committee MARVID®- in contribution to the scientific, technological and innovation Peer Review Process by training Human Resources for the continuity in the Critical Analysis of International Research.



**Abstract**

Perovskite solar cells [PSCs] are an emerging photovoltaic technology that in recent years have achieved efficiencies over 24.2% [T. J. Jacobsson et al., 2016], which makes them a promising technology since their conversion efficiency is similar to that of traditional Silicon solar cells. In this work, a numerical study of the active layer methylammonium of lead iodide [CH<sub>3</sub>NH<sub>3</sub>PbI<sub>3</sub>] is carried out to generate the characteristic J-V curves and induce hysteresis through diffusion coefficients unbalance analyzing the physics parameters that rules photovoltaic devices by solving the charge carrier continuity equation. This same analysis is performed on a complete PSC. Results are found where diffusion coefficients intervene in the severity of the hysteresis, in addition to the influence of other physical parameters such as the electronic densities and the bandgap of the active layer, the effect of the unbalance on the diffusion coefficients in the bimolecular recombination constant and its contribution to the conversion efficiency of the photovoltaic device is also reported.

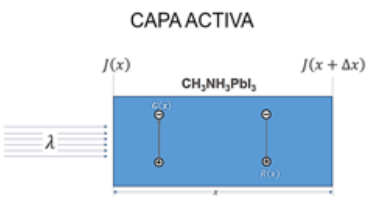

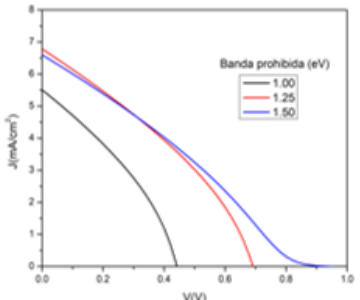
<b>NUMERICAL SIMULATION OF PEROVSKITE SOLAR CELLS: THEORETICAL STUDY OF THE PHENOMENON OF HYSTERESIS</b>																
<b>Objective</b>	<b>Methodology</b>	<b>Contribution</b>														
<p style="text-align: center;"><b>Perovskite Solar Cell</b></p> <p style="text-align: center;">ACTIVE LAYER</p>  <p style="text-align: center;">Simulation parameters for the active layer.</p> <table border="1" style="width: 100%; border-collapse: collapse;"> <thead> <tr> <th style="text-align: left;">Parámetros</th> <th style="text-align: left;">CH<sub>3</sub>NH<sub>3</sub>PbI<sub>3</sub></th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>Banda prohibida (eV)</td> <td>1.55</td> </tr> <tr> <td>Densidad electrónica en la banda de conducción (1/cm<sup>3</sup>)</td> <td>1×10<sup>14</sup></td> </tr> <tr> <td>Densidad electrónica en la banda de valencia (1/cm<sup>3</sup>)</td> <td>1×10<sup>14</sup></td> </tr> <tr> <td>Coefficiente de difusión de electrones (cm<sup>2</sup>/s)</td> <td>1.7×10<sup>-4</sup></td> </tr> <tr> <td>Coefficiente de difusión de huecos (cm<sup>2</sup>/s)</td> <td>1.7×10<sup>-4</sup></td> </tr> <tr> <td>Espesor de la capa activa (μm)</td> <td>0.45</td> </tr> </tbody> </table>	Parámetros	CH <sub>3</sub> NH <sub>3</sub> PbI <sub>3</sub>	Banda prohibida (eV)	1.55	Densidad electrónica en la banda de conducción (1/cm <sup>3</sup> )	1×10 <sup>14</sup>	Densidad electrónica en la banda de valencia (1/cm <sup>3</sup> )	1×10 <sup>14</sup>	Coefficiente de difusión de electrones (cm <sup>2</sup> /s)	1.7×10 <sup>-4</sup>	Coefficiente de difusión de huecos (cm <sup>2</sup> /s)	1.7×10 <sup>-4</sup>	Espesor de la capa activa (μm)	0.45	<p><b>Scaps 1 D</b></p>  $\frac{1}{q} \frac{\partial J_n}{\partial x} + G(x) - R(x) = \frac{\partial n}{\partial t}$ <p><b>Simulation</b></p>	<p style="text-align: center;"><b>Theoretical Curve J-V</b></p>  <p style="text-align: center;"><b>Hysteresis index</b></p>
Parámetros	CH <sub>3</sub> NH <sub>3</sub> PbI <sub>3</sub>															
Banda prohibida (eV)	1.55															
Densidad electrónica en la banda de conducción (1/cm <sup>3</sup> )	1×10 <sup>14</sup>															
Densidad electrónica en la banda de valencia (1/cm <sup>3</sup> )	1×10 <sup>14</sup>															
Coefficiente de difusión de electrones (cm <sup>2</sup> /s)	1.7×10 <sup>-4</sup>															
Coefficiente de difusión de huecos (cm <sup>2</sup> /s)	1.7×10 <sup>-4</sup>															
Espesor de la capa activa (μm)	0.45															

**Solar cell, perovskite, Numerical simulation, Hysteresis, Photovoltaics**

## Resumen

Las celdas solares de perovskitas [PSC] son una tecnología fotovoltaica emergente que en los últimos años han alcanzado eficiencias superiores al 24.2% [ *T. J. Jacobsson et al., 2016* ], lo cual las hace una tecnología prometedora, ya que su eficiencia de conversión se asemeja al de las celdas tradicionales de Silicio. En este trabajo se realiza un estudio numérico de la capa activa metilamonio de yoduro de plomo [CH<sub>3</sub>NH<sub>3</sub>PbI<sub>3</sub>] para generar las curvas J-V características e inducir histéresis desbalanceando los órdenes de magnitud de los coeficientes de difusión en celdas solares de perovskitas, esto, analizando los parámetros físicos que rigen los dispositivos fotovoltaicos resolviendo la ecuación de continuidad de portadores de carga. Este mismo análisis se realiza en una PSC completa. Se hallan resultados donde los coeficientes de difusión intervienen en la severidad de la histéresis, además de la influencia de otros parámetros físicos como las densidades electrónicas y la banda prohibida de la capa activa, también se estudia el efecto del desbalance en los coeficientes de difusión en la constante de recombinación bimolecular y su contribución a la eficiencia de conversión del dispositivo fotovoltaico.

### SIMULACIÓN NUMÉRICA DE CELDAS SOLARES DE PEROVSKITA: ESTUDIO TEÓRICO DEL FENÓMENO DE HISTÉRESIS

Objetivo	Metodología	Contribución														
<p style="text-align: center;"><b>Celda solar de Perovskita</b></p>  <p style="text-align: center;">Parámetros de simulación para la capa activa.</p> <table border="1" style="width: 100%; border-collapse: collapse;"> <thead> <tr> <th style="text-align: left;">Parámetros</th> <th style="text-align: left;">CH<sub>3</sub>NH<sub>3</sub>PbI<sub>3</sub></th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>Banda prohibida (eV)</td> <td>1.55</td> </tr> <tr> <td>Densidad electrónica en la banda de conducción (1/cm<sup>3</sup>)</td> <td>1×10<sup>14</sup></td> </tr> <tr> <td>Densidad electrónica en la banda de valencia (1/cm<sup>3</sup>)</td> <td>1×10<sup>14</sup></td> </tr> <tr> <td>Coefficiente de difusión de electrones (cm<sup>2</sup>/s)</td> <td>1.7×10<sup>-4</sup></td> </tr> <tr> <td>Coefficiente de difusión de huecos (cm<sup>2</sup>/s)</td> <td>1.7×10<sup>-4</sup></td> </tr> <tr> <td>Espesor de la capa activa (μm)</td> <td>0.45</td> </tr> </tbody> </table>	Parámetros	CH <sub>3</sub> NH <sub>3</sub> PbI <sub>3</sub>	Banda prohibida (eV)	1.55	Densidad electrónica en la banda de conducción (1/cm <sup>3</sup> )	1×10 <sup>14</sup>	Densidad electrónica en la banda de valencia (1/cm <sup>3</sup> )	1×10 <sup>14</sup>	Coefficiente de difusión de electrones (cm <sup>2</sup> /s)	1.7×10 <sup>-4</sup>	Coefficiente de difusión de huecos (cm <sup>2</sup> /s)	1.7×10 <sup>-4</sup>	Espesor de la capa activa (μm)	0.45	<p style="text-align: center;"><b>Scaps 1 D</b></p>  $\frac{1}{q} \frac{\partial J_n}{\partial x} + G(x) - R(x) = \frac{\partial n}{\partial t}$ <p style="text-align: center;"><b>Simulación</b></p>	<p style="text-align: center;"><b>Curva J-V teórica</b></p>  <p style="text-align: center;"><b>Índice de histéresis</b></p>
Parámetros	CH <sub>3</sub> NH <sub>3</sub> PbI <sub>3</sub>															
Banda prohibida (eV)	1.55															
Densidad electrónica en la banda de conducción (1/cm <sup>3</sup> )	1×10 <sup>14</sup>															
Densidad electrónica en la banda de valencia (1/cm <sup>3</sup> )	1×10 <sup>14</sup>															
Coefficiente de difusión de electrones (cm <sup>2</sup> /s)	1.7×10 <sup>-4</sup>															
Coefficiente de difusión de huecos (cm <sup>2</sup> /s)	1.7×10 <sup>-4</sup>															
Espesor de la capa activa (μm)	0.45															

**Celda solar, Perovskita, Simulación numérica, Histéresis, Fotovoltaica**

## Introducción

La liberación de dióxido de carbono y otros gases de efecto invernadero, resultado de las actividades humanas, están aumentando la temperatura media global, alterando los patrones climáticos y la acidez de los océanos [T. J. Jacobsson et al., 2016]. La dependencia de los combustibles fósiles como los hidrocarburos, carbón y gas natural continúa siendo una problemática mundial. Incluso si las emisiones humanas se detienen repentinamente, podría tomar siglos para alcanzar una nueva temperatura de equilibrio y apreciar el alcance total de los daños [S. Chu, Y. Cui et al., 2016].

El predominio de los combustibles fósiles plantea importantes amenazas ecológicas y sociales a la sostenibilidad de los sistemas energéticos. Estas amenazas requieren un desplazamiento de recursos fósiles por fuentes bajas en carbono y, en particular, fuentes de energía renovable [T. Bauwens et al., 2018]. Cualquier transición tecnológica lejos de los combustibles fósiles implicará cuestiones importantes de aceptación social de las tecnologías, y es probable que la participación pública desempeñe un papel crucial en estos.

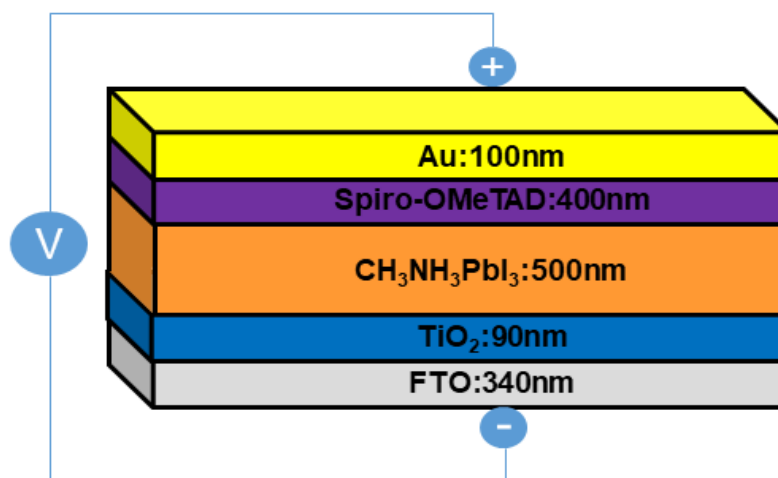
Por ello, se realizan estudios para minimizar, e incluso desistir, el uso de combustibles fósiles, utilizando fuentes de energías renovables, ya que se diferencian de los combustibles fósiles al ser fuentes limpias, virtualmente inagotables y crecientemente competitivas.

Como fuentes de energía renovable se puede mencionar la eólica, mareomotriz, hidráulica, geotérmica y la solar. Entre los diversos tipos de recursos energéticos sostenibles, la energía solar es prometedora debido a su inagotable suministro, alta capacidad y respeto al medio ambiente. Sin embargo, la irradiación solar natural es descentralizada, intermitente y fluctúa constantemente. Por lo tanto, la utilización efectiva de la energía solar de manera limpia, económica y conveniente sigue siendo un gran desafío [J. Gong et al., 2019].

El desarrollo de nuevas tecnologías de energía solar se considera una de las muchas soluciones clave para satisfacer una creciente demanda mundial de energía, especialmente para minimizar el uso de combustibles fósiles. El rápido crecimiento en el campo de las tecnologías solares es prometedor, no obstante, enfrenta varias barreras técnicas, como la baja eficiencia de las celdas solares, el bajo equilibrio de sistemas, los obstáculos económicos [por ejemplo, altos costos iniciales y la falta de mecanismos de financiación] y los obstáculos institucionales [por ejemplo, infraestructura inadecuada y escasez de mano de obra calificada] [E. Kabir et al., 2017].

Una de las áreas de aprovechamiento de la energía solar es el desarrollo de la tecnología fotovoltaica [PV] para la producción de electricidad [J. Gong et al., 2019]. Los dramáticos aumentos en el despliegue y la disminución en el costo de los sistemas de conversión de energía solar en la última década dan fe de la importancia de las inversiones en innovación [P. K. Nayak et al., 2019].

### Box 1



**Figura 1**

Estructura general de una PSC

Fuente: Elaboración propia

Las celdas solares de perovskita [PSC] se han convertido en una prometedora opción de energía renovable, con altas eficiencias y bajos costos.

Sin embargo, existen diversas problemáticas que la comunidad científica debe resolver, para lograr escalar la producción y convertirlas en tecnología comercial al alcance de cualquier usuario.

El primer reporte de un dispositivo fotovoltaico con una estructura de perovskita [ $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ ] fue presentado por Akihiro Kojima en el 2009 con una eficiencia de 3.8% [K. Akhoro *et al.*, 2017] y fue aumentando rápidamente con los años: en 2011 se reportó una eficiencia del 9.7% [8], 15.4% en el 2013 [M. Liu *et al.*, 2013], 20.1% en el 2015 y 22.1 % en el 2016 [11] la cual se acerca al rendimiento de las celdas solares de silicio monocristalino. Sin embargo, aun presentar diversas problemáticas, siendo una de ellas la histéresis [N. J. Jeon *et al.*, 2015].

La histéresis es un fenómeno que está presente en la estructura de perovskita de manera inherente, y está relacionada con diferentes mecanismos de degradación y directamente vinculada a la conversión energética de la celda. El comprender este fenómeno contribuiría a mejorar las técnicas de sinterización, fabricación, así como obtener valores reales de eficiencia y tiempo de vida. La histéresis se observa en las diferentes curvas J-V de las PSC que varía dependiendo de la dirección del barrido de voltaje durante la caracterización de las curvas J-V, así como el rango y la velocidad del barrido. Debido a la histéresis, la caracterización y la reproducibilidad de las PSC es una problemática actual. Aun con el interés y las investigaciones realizadas, es un fenómeno que aún no se comprende del todo [Baeza Pérez *et al.*, 2025].

## Metodología

El presente trabajo fue desarrollado utilizando el software SCAPS el cual es un programa de simulación unidimensional de celdas solares que resuelve las tres ecuaciones fundamentales de los dispositivos fotovoltaicos: la ecuación de Poisson, la densidad de corriente para electrones y huecos [Sanchez *et al.*, 2025]. Fue desarrollado en el departamento de Electrónica y Sistemas de Información [ELIS] de la Universidad de Gent, Bélgica.

SCAPS se desarrolló originalmente para estructuras celulares de  $\text{CuInSe}_2$  y la familia  $\text{CdTe}$ . Sin embargo, varias extensiones han mejorado sus capacidades, por lo que también es aplicable a las células solares cristalinas [familia Si y GaAs] y a las células amorfas [a-Si y Si micromorfo] y recientemente a celdas orgánicas-inorgánicas [Dye y Perovskitas].

A continuación, se presenta parte de la teoría fundamental sobre la cual se sustenta nuestro análisis mediante el programa antes mencionado

### ➤ Ecuaciones de continuidad

Este estudio se basa en la resolución de las ecuaciones de continuidad, con enfoque de importancia en los coeficientes de difusión, los cuales son derivados de los mecanismos de transporte de masa atómica. Este es un mecanismo que sucede de forma aleatoria en gases y líquidos, y es proporcional al gradiente de concentración  $dC/dx$  y es descrito por la primera Ley de Fick

$$J_{\text{diff}} = -D \frac{dC}{dx} \quad [1]$$

Donde  $D$  es el coeficiente de difusión, y el signo negativo indica que el transporte se realiza hacia la zona donde exista menor concentración.

Por otro lado, las ecuaciones de continuidad de portadores de carga [electrones para cargas negativas, huecos para cargas positivas] describen la densidad de flujo de corriente a través de un semiconductor [78].

$$\frac{1}{q} \frac{\partial J_n}{\partial x} + G[x] - R[x] = \frac{\partial n}{\partial t} \quad [2]$$

$$-\frac{1}{q} \frac{\partial J_h}{\partial x} + G[x] - R[x] = \frac{\partial h}{\partial t} \quad [3]$$

Donde, en la ecuación 3.1,  $J_n$  es la densidad de corriente de electrones,  $q$  es la carga del electrón,  $x$  es el grosor de la capa activa de perovskita,  $G[x]$  es el término de generación y  $R[x]$  es el término de recombinación,  $n$  es la concentración electrónica de las cargas y el  $t$  es el tiempo. En la ecuación 3.2 se presentan los mismos parámetros para huecos,  $h$ .

En una celda de perovskita, la densidad de corriente es la suma de las corrientes producidas por fenómenos de difusión y de arrastre debido a un campo eléctrico. Entonces las ecuaciones 3.1 y 3.2, pueden expresarse de la siguiente manera.

$$J_n = qD_n \frac{\partial n}{\partial x} + qn\mu_n \frac{\partial \varphi}{\partial x} \quad [4]$$

$$J_h = qD_p \frac{\partial h}{\partial x} - qn\mu_h \frac{\partial \varphi}{\partial x} \quad [5]$$

Donde, en la ecuación 3.3,  $D_n$  es el coeficiente de difusión de electrones,  $\mu_n$  es el coeficiente de movilidad de los electrones,  $\varphi$  es el potencial de campo eléctrico. La ecuación 4 muestra los mismos parámetros para la densidad de corrientes producida por los huecos. La densidad de corriente por difusión es de suma importancia, ya que, con la relación de Einstein [ecuación 5], podemos estudiar los fenómenos de migración de portadores de carga y los efectos que esto produce en la capa activa.

$$\frac{D_n}{\mu_n} = \frac{D_h}{\mu_h} = \frac{kT}{q} \quad [6]$$

En ausencia de campo eléctrico, los portadores se mueven aleatoriamente y no hay un transporte neto de carga. Con la presencia de un campo eléctrico [ecuación 6] el movimiento aleatorio se superpone una componente [la misma para todos los portadores de igual carga] que provoca un movimiento neto en la dirección del campo eléctrico. Es por esto, que la corriente de arrastre, también llamada a la deriva, se suma a la corriente por difusión.

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} \varphi(x) = \frac{q}{\varepsilon} [n(x) - h(x)] \quad [7]$$

Donde  $\varepsilon$  es la permitividad eléctrica en el vacío,  $n$  y  $p$  son las concentraciones de carga de electrones y huecos respectivamente. Entonces, las ecuaciones 3.1 y 3.2 pueden expresarse como:

$$\frac{\partial n}{\partial t} = D_n \frac{d^2 n[x]}{dx^2} - \mu_n \left( \frac{dn(x)}{dx} \frac{d\varphi(x)}{dx} + n(x) \frac{d^2 \varphi(x)}{dx^2} \right) + G(x) - R(x) \quad [8]$$

$$\frac{\partial h}{\partial t} = D_h \frac{d^2 h[x]}{dx^2} - \mu_p \left( \frac{dh(x)}{dx} \frac{d\varphi(x)}{dx} + h(x) \frac{d^2 \varphi(x)}{dx^2} \right) + G(x) - R(x) \quad [9]$$

Donde  $n$  es la concentración de electrones y  $h$  la de huecos y se definen con las siguientes expresiones

$$n = N_C e^{\frac{E_f - E_C}{k_B T}} \quad [10]$$

$$h = N_V e^{\frac{E_V - E_f}{k_B T}} \quad [11]$$

Para las ecuaciones 3.9 y 3.10  $k$ ,  $T$  y  $E_f$  son la constante de Boltzman, la temperatura en Kelvin y el nivel de Fermi, respectivamente.  $E_V$  es el nivel energético de la banda de valencia, y  $E_C$  es el nivel energético en la banda de conducción.  $N_C$  y  $N_V$  son las densidades de estados localizados en las bandas de conducción y valencia, respectivamente.

### ➤ Generación

El objetivo principal de una celda solar es la generación de electricidad. La densidad de corriente es determinada por la cantidad de luz absorbida por la capa activa, la generación de fotocorriente y la recombinación de las cargas.

Generación y recombinación son dos fenómenos que ocurren simultáneamente en un semiconductor, mientras que el primero describe la generación de portadores de carga, la recombinación describe es la eliminación de esos mismos portadores a una tasa proporcional. Cuando el estado de equilibrio en el semiconductor es alterado, también lo hacen las concentraciones de portadores de carga [K. Akhiro et al., 2017].

La generación [ecuación 11] es un fenómeno de excitación electrónica que incrementa el número de portadores de carga, también se puede describir como el salto de un electrón de la banda de valencia a la banda de conducción, para crear un par electrón-hueco, dejando un espacio libre en la banda de conducción. La generación puede expresarse como:

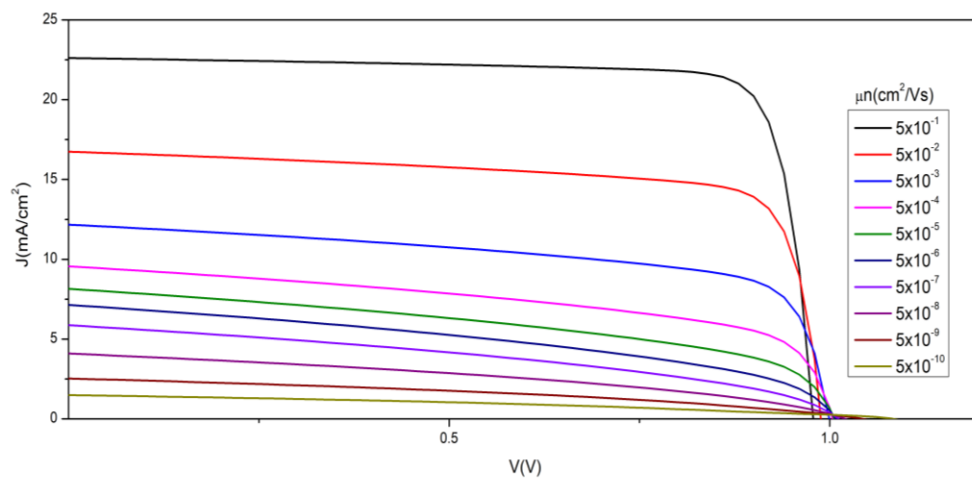
$$G(x) = \int_0^{\lambda_0} G(\lambda, x) d\lambda = \int_0^{\lambda_0} PCE(\lambda) \times \frac{I(\lambda) \times \alpha[\lambda] \times e^{-\alpha(\lambda)x}}{\frac{hc}{\lambda}} d\lambda \quad [12]$$

Donde  $PCE$  es la eficiencia de conversión energética [para nuestro estudio se considera el 100%, es decir, que todos los excitones pueden separarse eficientemente en portadores de carga],  $I(\lambda)$  es la densidad de luz incidente,  $\alpha[\lambda]$  es el coeficiente de absorción,  $h$  la constante de Plank y  $c$  la velocidad de la luz.

## Resultados

Para el estudio de la histéresis en la celda completa. Se desbalancean los coeficientes  $\mu n$  y  $\mu h$  para observar la influencia de las movilidades en la curva J-V. En la figura 4.28 se variaron los coeficientes en el mismo orden de magnitud, pudiendo observar un comportamiento distinto a las curvas del apartado de la capa activa.

### Box 2



**Figura 2**

Curva J-V para diferentes valores de  $\mu n$  y manteniendo fijo  $\mu h$

Fuente: Elaboración propia

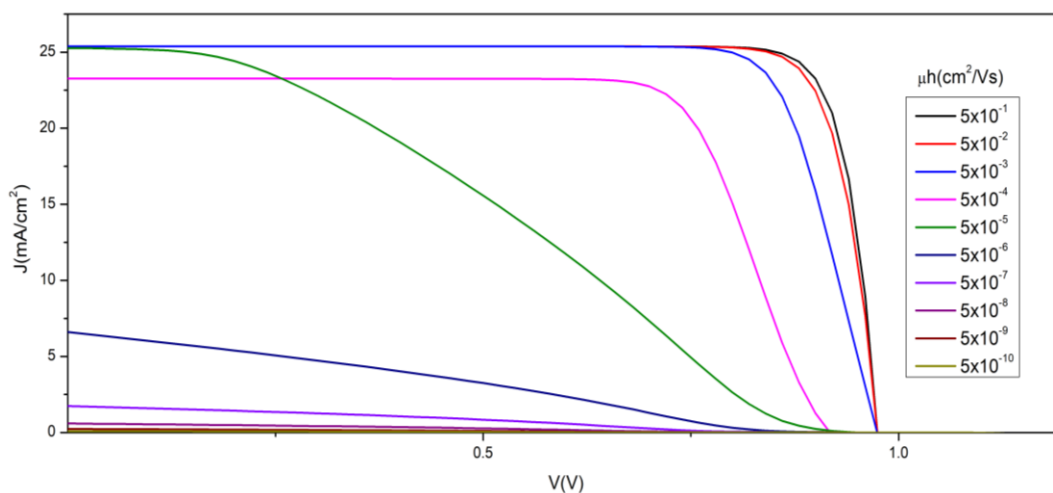
En la tabla 1 se ha extraído la información de cada curva, para observar el comportamiento del desbalance de movilidad, se puede notar que los valores tienden a estabilizarse, sin embargo, con mayor dificultad que en los escenarios idealizados del apartado de la capa activa.

**Box 3****Tabla 1**

Parámetro de las curvas corriente voltaje de la figura 2, para diferentes valores de movilidad de los electrones y movilidad de los huecos constante

$\mu_h(\text{cm}^2/\text{Vs})$	$\mu_n(\text{cm}^2/\text{Vs})$	$J_{sc}(\text{mA}/\text{cm}^2)$	$V_{oc}[\text{V}]$	FF	$\eta(\%)$
$5 \times 10^1$	$5 \times 10^{-1}$	22.6102	0.9785	0.8364	18.51
$5 \times 10^1$	$5 \times 10^{-2}$	16.7402	0.9893	0.7602	12.59
$5 \times 10^1$	$5 \times 10^{-3}$	12.1703	0.9995	0.6443	7.84
$5 \times 10^1$	$5 \times 10^{-4}$	9.5557	1.0043	0.5307	5.09
$5 \times 10^1$	$5 \times 10^{-5}$	8.1451	1.0068	0.4571	3.75
$5 \times 10^1$	$5 \times 10^{-6}$	7.1382	1.0090	.4098	2.95
$5 \times 10^1$	$5 \times 10^{-7}$	5.8669	1.0123	0.3809	2.26
$5 \times 10^1$	$5 \times 10^{-8}$	4.0900	1.0207	0.3680	1.54
$5 \times 10^1$	$5 \times 10^{-9}$	2.5272	1.0433	0.3558	0.94
$5 \times 10^1$	$5 \times 10^{-10}$	1.4896	1.0824	0.3427	0.55

De manera similar, se realizó la misma estrategia para analizar el desbalance de portadores de carga, pero ahora variando  $\mu_h$  y dejando fijo  $\mu_n = 5 \times 10^1$ . En la figura 3 se puede apreciar el comportamiento de las curvas J-V al realizar esta variación.

**Box 4****Figura 3**

Curva J-V para diferentes valores de  $\mu_h$  y manteniendo fijo  $\mu_n$

Fuente: Elaboración propia

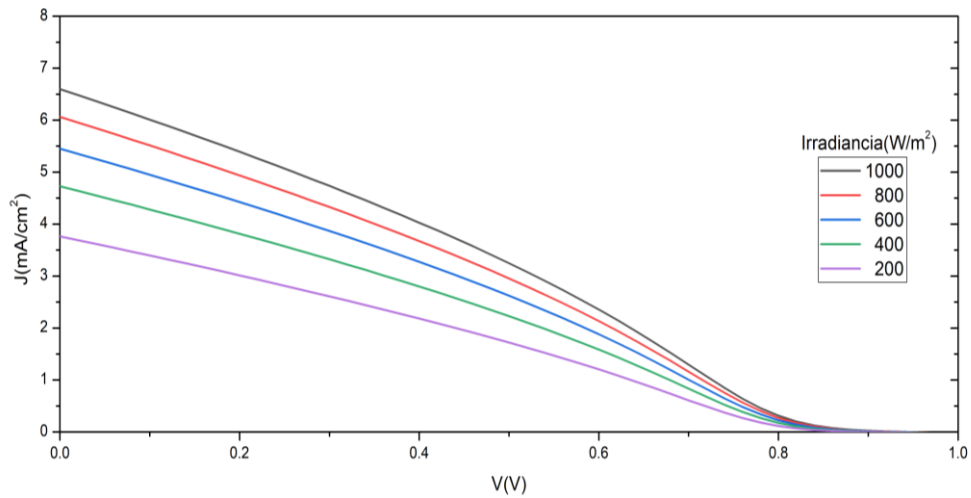
**Box 5****Tabla 2**

Parámetro de las curvas corriente voltaje de la figura 3, para diferentes valores de movilidad de huecos y movilidad de los electrones constante

$\mu_n(\text{cm}^2/\text{Vs})$	$\mu_h(\text{cm}^2/\text{Vs})$	$J_{sc}(\text{mA}/\text{cm}^2)$	$V_{oc}[\text{V}]$	FF	$\eta(\%)$
$5 \times 10^1$	$5 \times 10^{-1}$	25.3884	0.9752	0.8679	21.49
$5 \times 10^1$	$5 \times 10^{-2}$	25.3886	0.9751	0.8580	21.24
$5 \times 10^1$	$5 \times 10^{-3}$	25.3905	0.9742	0.8133	20.12
$5 \times 10^1$	$5 \times 10^{-4}$	25.4022	0.9670	0.7148	17.56
$5 \times 10^1$	$5 \times 10^{-5}$	25.2727	0.9471	0.3271	7.83
$5 \times 10^1$	$5 \times 10^{-6}$	6.5990	0.9408	0.2646	1.64
$5 \times 10^1$	$5 \times 10^{-7}$	1.7427	0.9544	0.2599	0.43
$5 \times 10^1$	$5 \times 10^{-8}$	0.592	0.9827	0.2437	0.14
$5 \times 10^1$	$5 \times 10^{-9}$	0.235	1.0164	0.2244	0.05
$5 \times 10^1$	$5 \times 10^{-10}$	0.092	1.0487	0.2086	0.02

Para entender la influencia de histéresis, se pueden analizar los comportamientos característicos siendo afectados por el desbalance en la movilidad. Para ello se puede tomar como ejemplo las curvas J-V a diferentes soles, como se muestra en la figura 4.

**Box 6**



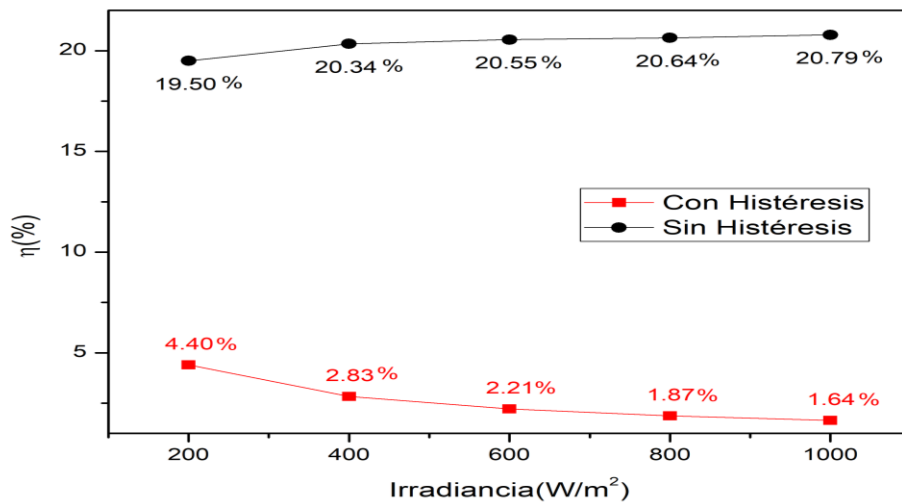
**Figura 4**

Curva J-V para diferentes valores de irradiancia, en la curva se puede observar el efecto de la histéresis cerca de punto de voltaje a circuito abierto

*Fuente: Elaboración propia.*

Por último, podemos observar como la eficiencia de la celda se ve influenciada por la presencia de histéresis en la figura 5 donde, incluso a máxima irradiancia [1 sol], la conversión energética es minimizada. En la curva sin histéresis,  $\mu n$  y  $\mu h$  son iguales a  $5 \times 10^1 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ ; y con histéresis  $\mu n = 5 \times 10^1 \text{ cm}^2/\text{s}$  y  $\mu h = 5 \times 10^{-5} \text{ cm}^2/\text{Vs}$ .

**Box 7**



**Figura 5**

Eficiencia de la una celda solar de perovskita en función de la irradiancia. También se puede observar la influencia de la histéresis en la eficiencia de la celda.

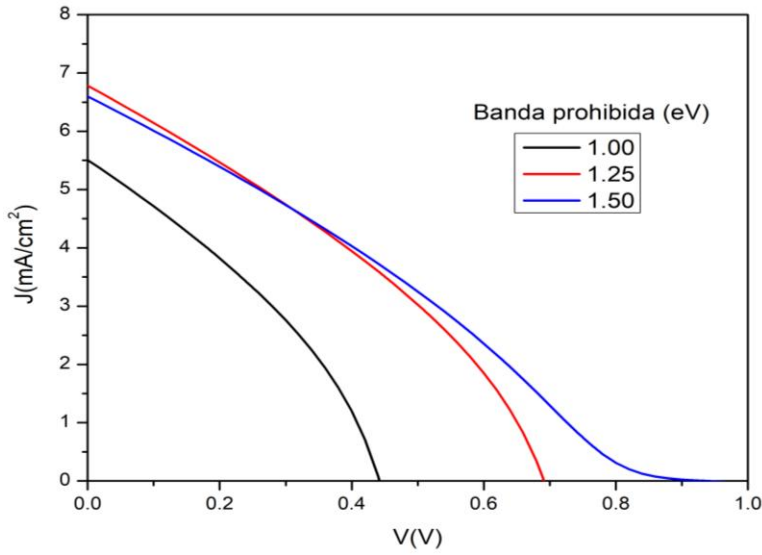
*Fuente: Elaboración propia*

**Índice de histéresis**

Una vez halladas las condiciones donde se encontró histéresis [ $\mu n = 5 \times 10^1 \text{ cm}^2/\text{s}$  y  $\mu h = 5 \times 10^{-5} \text{ cm}^2/\text{Vs}$ ] se variaron los parámetros para analizar el índice de histéresis, hallando de manera numérica las curvas de histéresis al variar la banda prohibida y la densidad electrónica, siendo estos dos valores los que proporcionaron las curvas de las figuras 6 y 7 ideales para analizar el índice de histéresis.

En la figura 6 se pueden observar curvas similares a las reportadas mostrando el comportamiento de histéresis. Las direcciones de barridos se mantuvieron en el mismo sentido que en el estudio del apartado anterior.

**Box 8**



**Figura 6**

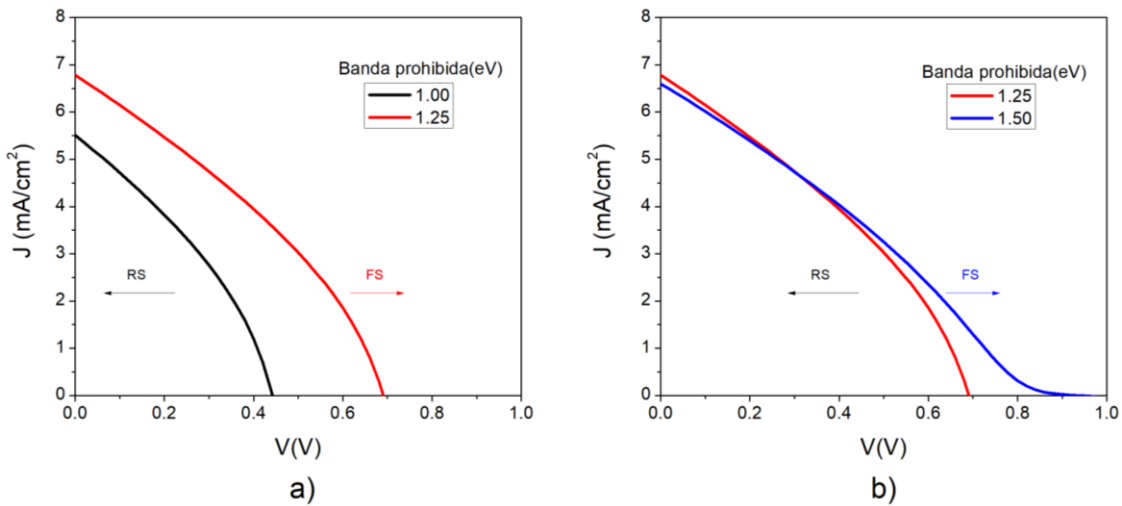
Curvas características de histéresis en curvas J-V al variar la banda prohibida con desbalance de portadores de carga

*Fuente: Elaboración propia*

En la figura 2 obtuvieron también curvas de histéresis al variar las densidades electrónicas de las bandas de valencia [ $Nv$ ] y de conducción [ $Nc$ ] en los mismos órdenes de magnitud, pero teniendo el mismo desbalance de carga que en el caso de la variación de la banda prohibida.

En la figura 7 se muestran las curvas por pares estableciendo sus direcciones de barrido, en esta ocasión para las variaciones en la banda prohibida.

**Box 9**



**Figura 7**

Propuesta para las direcciones de barrido para las curvas de histéresis generadas al variar la banda prohibida

*Fuente: Elaboración propia*

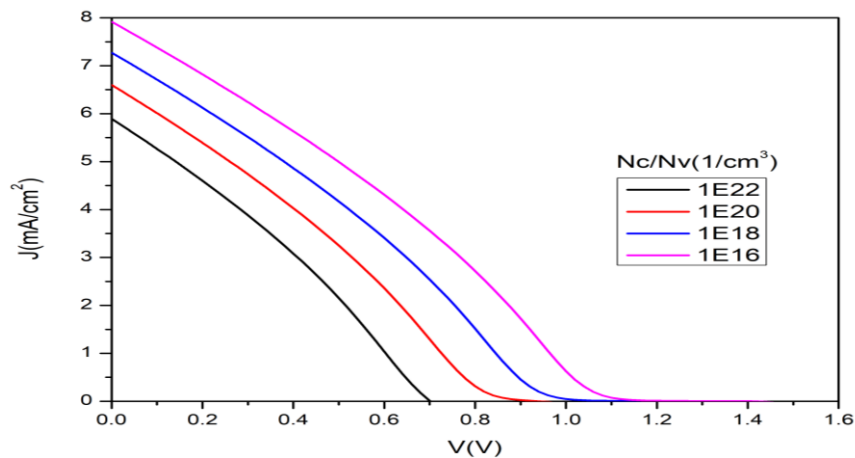
Con esta consideración se pueden calcular los índices de histéresis. Este análisis sirve para analizar los fenómenos físicos que intervienen en la conversión energética. En la tabla 3 se indican los resultados obtenidos de la figura 7, indicando los índices de histéresis en la columna de la derecha.

**Box 10****Tabla 3**

Análisis de los índices de histéresis de acuerdo a los escenarios de la figura 4.

Escenario	Dirección de barrido	Parámetros	Índice de histéresis
a]	RS	$J_{sc} = 5.5081 \text{ mA/cm}^2$ $V_{oc} = 0.44 \text{ V}$ $PCE = 0.83 \%$	$HI_1 = -0.93$
	FS	$J_{sc} = 6.7813 \text{ mA/cm}^2$ $V_{oc} = 0.69 \text{ V}$ $PCE = 1.58 \%$	$HI_2 = -0.90$ $HEI = -0.93$
b]	RS	$J_{sc} = 6.7813 \text{ mA/cm}^2$ $V_{oc} = 0.69 \text{ V}$ $PCE = 1.58 \%$	$HI_1 = -0.32$ $HI_2 = -0.03$
	FS	$J_{sc} = 6.5990 \text{ mA/cm}^2$ $V_{oc} = 0.94 \text{ V}$ $PCE = 1.64 \%$	$HEI = -0.27$

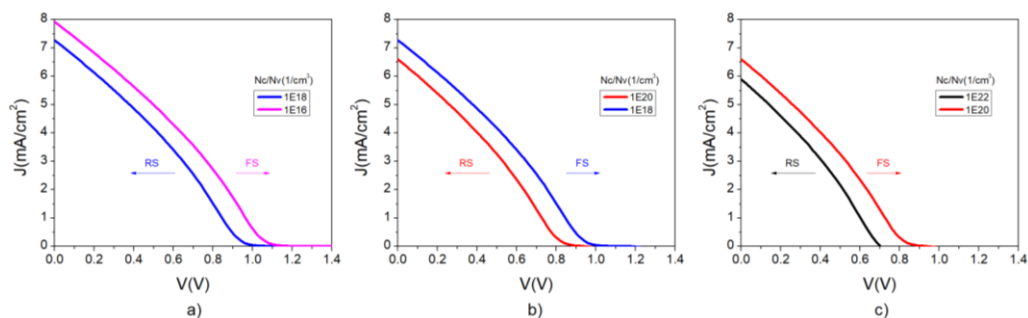
De manera similar se proponen las direcciones de barrido para las curvas generadas al variar las densidades electrónicas, el conjunto de curvas generadas por el SCAPS se presenta en la figura 8, las cuales se agruparán en pares para sus análisis.

**Box 11****Figura 8**

Curvas características de histéresis en curvas J-V al variar las densidades electrónicas con desbalance de portadores de cargas.

Fuente: Elaboración propia

Las direcciones de barrido propuestas se indican en la figura 9, donde se puede observar ligeras diferencias con las curvas obtenidas en el análisis de la capa activa.

**Box 12****Figura 9**

Propuesta para las direcciones de barrido para las curvas de histéresis generadas al variar las densidades electrónicas.

Fuente: Elaboración propia

En la tabla 4 se muestra el análisis numérico de los escenarios de la figura 9, para poder realizar un análisis en los índices de histéresis y las variaciones de las densidades electrónicas con desbalance de cargas.

### Box 13

**Table 4**

Análisis de los índices de histéresis de acuerdo a los escenarios de la figura 6

Escenario	Dirección de barrido	Parámetros	Índice de histéresis
a)	RS	$J_{sc} = 5.0257 \text{ mA/cm}^2$ $V_{oc} = 0.46 \text{ V}$ $PCE = 0.78 \%$	$HI_1 = -0.77$
	FS	$J_{sc} = 5.8909 \text{ mA/cm}^2$ $V_{oc} = 0.70 \text{ V}$ $PCE = 1.23 \%$	$HI_2 = -0.57$ $HEI = -0.57$
b)	RS	$J_{sc} = 5.8909 \text{ mA/cm}^2$ $V_{oc} = 0.70 \text{ V}$ $PCE = 1.23 \%$	$HI_1 = -0.50$
	FS	$J_{sc} = 6.5990 \text{ mA/cm}^2$ $V_{oc} = 0.94 \text{ V}$ $PCE = 1.64 \%$	$HI_2 = -0.33$ $HEI = -0.40$
c)	RS	$J_{sc} = 6.5990 \text{ mA/cm}^2$ $V_{oc} = 0.94 \text{ V}$ $PCE = 1.64 \%$	$HI_1 = -0.37$
	FS	$J_{sc} = 7.2725 \text{ mA/cm}^2$ $V_{oc} = 1.17 \text{ V}$ $PCE = 2.09 \%$	$HI_2 = -0.27$ $HEI = -0.31$
	FS	$J_{sc} = 7.9193 \text{ mA/cm}^2$ $V_{oc} = 1.40 \text{ V}$ $PCE = 2.58 \%$	

### Conclusiones

La histéresis es un fenómeno que involucra diferentes mecanismos de transporte dentro de la estructura cristalina de los materiales que conforman la celda y está relacionada con la conversión energética de las PSC. Los índices de histéresis muestran las curvas de histéresis son el resultado de una combinación de parámetros que pueden replicar las curvas obtenidas a través de escaneos experimentales.

También, se observa que la banda prohibida y la densidad electrónica junto con las variaciones en los órdenes de magnitud de los coeficientes de difusión, son parámetros que generan histéresis de forma numérica. Se puede ver como la variación de los coeficientes son parámetros que influyen en la histéresis, sin embargo, necesita de la participación de otros parámetros físicos para desencadenarla. Se puede modelar la histéresis en una PSC variando los coeficientes de difusión de electrones y huecos, así como generar las curvas características hacia adelante y hacia atrás.

No obstante, para poder ajustarse a valores hallados experimentalmente se debe realizar el análisis de forma aleatoria hasta hallar la configuración correcta.

### Declaraciones

### Conflicto de intereses

Los autores declaran no tener ningún conflicto de intereses. No tienen intereses financieros o relaciones personales que pudieran haber influido en este libro.

### Contribución de los autores

*Mandujano-Ramírez, Humberto, Julián:* Apoyó en el desarrollo experimental y redacción del documento.

*Figuroa-Ramírez, Sandra Jazmín:* Contribuyó en la revisión de los resultados.

*Flores-Gil, Aarón:* Revisión del trabajo.

*Martínez-Vargas, Sergio:* Contribuyó en el análisis de los resultados.

### Disponibilidad de datos y materiales

Los datos están disponibles a solicitud en el correo: [hmnandujano@pampano.unacar.mx](mailto:hmnandujano@pampano.unacar.mx)

### Financiación

Este trabajo de investigación se realizó con recursos propios.

### Referencias

#### Básicos

T. J. Jacobsson, W. Tress, J. P. Correa-Baena, T. Edvinsson, and A. Hagfeldt, “Room Temperature as a Goldilocks Environment for CH<sub>3</sub>NH<sub>3</sub>PbI<sub>3</sub> Perovskite Solar Cells: The Importance of Temperature on Device Performance,” *J. Phys. Chem. C*, vol. 120, no. 21, pp. 11382–11393, 2016.

S. Chu, Y. Cui, and N. Liu, “The path towards sustainable energy,” *Nat. Mater.*, vol. 16, no. 1, pp. 16–22, 2016.

T. Bauwens and P. Devine-Wright, “Positive energies? An empirical study of community energy participation and attitudes to renewable energy,” *Energy Policy*, vol. 118, no. February, pp. 612–625, 2018.

J. Gong, C. Li, and M. R. Wasielewski, “Advances in solar energy conversion,” *Chem. Soc. Rev.*, vol. 48, no. 7, pp. 1862–1864, 2019.

E. Kabir, P. Kumar, S. Kumar, A. A. Adelodun, and K. H. Kim, “Solar energy: Potential and future prospects,” *Renew. Sustain. Energy Rev.*, vol. 82, no. September 2017, pp. 894–900, 2018.

P. K. Nayak, S. Mahesh, H. J. Snaith, and D. Cahen, “Photovoltaic solar cell technologies: analysing the state of the art,” *Nat. Rev. Mater.*, vol. 4, no. 4, pp. 269–285, 2019.

#### Soporte

K. Akhiro, T. Kenjiro, S. Yasuo, and M. Tsutomu, “Organometal halide perovskites as visible-light sensitizers for photovoltaic cells,” *J. Am. Chem. Soc.*, vol. 131, no. 17, pp. 6050–1, 2009.

Ning Cai *et al.*, “An organic D- $\pi$ -A dye for record efficiency solid-state sensitized heterojunction solar cells,” *Nano Lett.*, vol. 11, no. 4, pp. 1452–6, 2011..

M. Liu, M. B. Johnston, and H. J. Snaith, “Efficient planar heterojunction perovskite solar cells by vapour deposition,” *Nature*, vol. 501, no. 7467, pp. 395–398, 2013.

N. J. Jeon *et al.*, “Compositional engineering of perovskite materials for high-performance solar cells,” *Nature*, vol. 517, no. 7535, pp. 476–480, 2015.

Sanchez, H. B. S., Cappelletti, M. A., & Rebaza, A. V. G. [2025, May]. Diseño estructural y propiedades electrónicas de perovskitas CsGe<sub>n</sub>Pb<sub>1-n</sub>X<sub>3</sub> y CsSn<sub>n</sub>Pb<sub>1-n</sub>X<sub>3</sub> considerando el efecto Jahn-Teller. In XLI Congreso Argentino de Mecánica Computacional.

Baeza Pérez, R. A. [2025]. Estudio de celdas solares incorporando películas delgadas de SnS como material absorbedor [Doctoral dissertation, Universidad Autónoma de Nuevo León].