

Environmental impact analysis of different molecular structures in Perovskite Solar Cells

Análisis del impacto ambiental de diferentes estructuras moleculares en Células Solares de Perovskita

HERNÁNDEZ, C. A.¹; CASTAÑEDA, C. O.²; LÓPEZ, O. A.³; CASTRO, S. A.⁴; MEDINA, B.⁵

¹**Ing. Camilo Andrés Hernández Pérez.** Programa de Ingeniería electrónica. Facultad de Ingenierías. Universidad Francisco de Paula Santander. e-mail: camiloandreshp@ufps.edu.co ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-6912-7283>

²**Ing. Carlos Oswaldo Castañeda Pico.** Programa de Ingeniería electrónica. Facultad de Ingenierías. Universidad Francisco de Paula Santander. e-mail: carlososwaldocp@ufps.edu.co ORCID: <https://orcid.org/0009-0004-4181-944X>

³**M.Sc. Oriana Alexandra López Bustamante. Profesora Asistente.** Programa de Ingeniería electrónica. Facultad de Ingenierías. Universidad Francisco de Paula Santander. e-mail: orianaalexandraib@ufps.edu.co ORCID: <https://orcid.org/0000-0003-4601-1111>

⁴**M.Sc. Sergio Alexander Castro Casadiego. Profesor Asistente.** Programa de Ingeniería electrónica. Facultad de Ingenierías. Universidad Francisco de Paula Santander. e-mail: sergio.castroc@ufps.edu.co ORCID: <https://orcid.org/0000-0003-0962-9916>

⁵**Ph. D. Byron Medina Delgado. Profesor Asociado.** Programa de Ingeniería electrónica. Facultad de Ingenierías. Universidad Francisco de Paula Santander. e-mail: byronmedina@ufps.edu.co ORCID: <https://orcid.org/0000-0003-0754-8629>

Entidad

Universidad Francisco de Paula Santander. Norte de Santander, Colombia.

Tel: 5776655

E-mail: byronmedina@ufps.edu.co

Recibido: 03/05/2024 / Aceptado: 28/08/2024

Resumen

Este artículo aborda el impacto ambiental de los materiales utilizados en las celdas solares de perovskita, una tecnología emergente en el campo de la energía fotovoltaica que, si bien presenta alta eficiencia, también emplea componentes potencialmente contaminantes. El objetivo es analizar los efectos medioambientales de diferentes estructuras moleculares en las celdas de perovskita, con un enfoque en los materiales más críticos, como el plomo, y sus alternativas. A

través de un análisis de un conjunto de datos de celdas solares de perovskita, se seleccionaron variables, como la eficiencia de conversión de potencia, PCE, además de los materiales de las capas de perovskita, contacto, HTL, ETL y sustrato. El resultado más relevante muestra que el plomo, utilizado en la capa de perovskita, representa una gran amenaza ambiental, pero puede ser sustituido por estaño sin una reducción significativa en la PCE. Se concluye que, para avanzar hacia una tecnología más sostenible, es crucial continuar investigando en la reducción de los impactos ambientales de los materiales utilizados, sin comprometer el rendimiento de las celdas solares.

Palabras clave: Perovskita, estructura molecular, contaminantes.

Abstract

This article addresses the environmental impact of materials used in perovskite solar cells, an emerging technology in the field of photovoltaics that, while highly efficient, also employs potentially harmful components. The aim is to analyze the environmental effects of different molecular structures in perovskite cells, with a focus on critical materials such as lead and its alternatives. Through an analysis of a perovskite solar cell dataset, variables such as power conversion efficiency, PCE, were selected, along with materials from the perovskite, contact, HTL, ETL, and substrate layers. The most relevant finding shows that lead, used in the perovskite layer, poses a significant environmental threat but can be replaced by tin without a considerable reduction in PCE. It is concluded that to move toward more sustainable technology, continued research into reducing the environmental impact of these materials is essential, without compromising solar cell performance.

Keywords: Perovskite, molecular structure, contaminants.

1. INTRODUCCIÓN

Los paneles solares han emergido como una de las principales tecnologías para la generación de energía renovable, con un crecimiento acelerado que ha llevado a un aumento en su capacidad instalada a nivel mundial. Este avance tecnológico ha dado lugar a la evolución de tres generaciones de celdas solares. La primera generación utiliza principalmente silicio monocristalino o policristalino como material base, mientras que la segunda generación introduce materiales como el CdTe (Telurio de Cadmio) y el CIGS (Cobre, Indio, Galio, Selenio) (Delgadillo *et al.*, 2020). La tercera generación, aún en desarrollo, se basa en materiales de perovskita, los cuales han mostrado una eficiencia prometedora en

comparación con las tecnologías anteriores (Esparza Salazar *et al.*, 2021).

Las celdas solares de perovskita han mostrado avances notables en su eficiencia de conversión de potencia, PCE. En poco más de una década, su PCE ha pasado de 14.1% en 2013 a cifras cercanas al 26% en 2023 ((NREL), 2023). Este progreso es significativo, considerando que el silicio, actualmente domina el 92% del mercado de celdas solares, ha mantenido una eficiencia del 25% sin mayores avances en los últimos 20 años (Cota, 2017). Sin embargo, aunque las celdas de perovskita ofrecen una gran promesa para mejorar la eficiencia energética, los materiales utilizados, como el plomo, plantean preocupaciones ambientales que deben

abordarse para hacer de esta tecnología una opción más sostenible.

2. METODOLOGÍA

La metodología de este artículo se enfoca en analizar el impacto ambiental de los materiales moleculares en celdas solares de perovskita. Primero, se obtiene un conjunto de datos que incluye información detallada sobre la composición de distintas celdas solares. A partir de estos datos, se identifican los materiales moleculares presentes en las capas de las celdas, como haluros metálicos, materiales de contacto y electrodos. Posteriormente, se describen las propiedades fisicoquímicas y la toxicidad de estos materiales, tomando en cuenta su posible liberación de metales pesados y riesgos asociados a los compuestos orgánicos. También se evalúa su biodegradabilidad y capacidad de degradación en el ambiente, analizando su movilidad en el suelo y en cuerpos de agua. Finalmente, se propone una línea de investigación basada en las celdas que presentan menor impacto ambiental, sugiriendo alternativas más sostenibles para mejorar la estabilidad y reducir la toxicidad de los materiales utilizados.

3. ANÁLISIS Y DISCUSIÓN DE RESULTADOS

Se describen los resultados encontrados a partir de la metodología planteada.

3.1. Conjunto de datos

Para este artículo se utilizó el conjunto de datos *The Perovskite Database*, que contiene 410 variables y 42.497 registros (Jacobsson *et al.*, 2021). Se seleccionaron los coeficientes moleculares A, B y C de la

capa de perovskita, así como las variables clasificadas en la estructura de la celda: capa transportadora de electrones (ETL), capa transportadora de huecos (HTL), contacto trasero y sustrato. Además, se incluye la variable de rendimiento de la celda, como la eficiencia de conversión de potencia (PCE), para evaluar si existe un cambio en el desempeño al utilizar distintos materiales.

3.2. Identificación de materiales en las celdas solares de perovskita

La composición molecular de la capa de perovskita en las celdas solares puede variar incluyendo diferentes materiales para cada uno de sus aniones y cationes. La perovskita de estructura ABC es un tipo de material que sigue la fórmula general ABX_3 , donde A y B son cationes de diferentes tamaños y X es un anión, generalmente un haluro (como I o Br). En este tipo de estructura, el catión A suele ser orgánico o inorgánico de mayor tamaño, como el Methylammonium ($CH_3NH_3^+$), Formamidinio ($HC(NH_2)_2^+$) o cationes inorgánicos como el cesio (Cs^+). El catión B es típicamente un metal de transición, como el plomo (Pb^{2+}) o el estaño (Sn^{2+}), que se encuentra en el centro de un octaedro formado por el anión C, que suele ser un haluro como yoduro (I^-), bromuro (Br^-) o cloruro (Cl^-). Esta estructura se muestra en la figura 1.

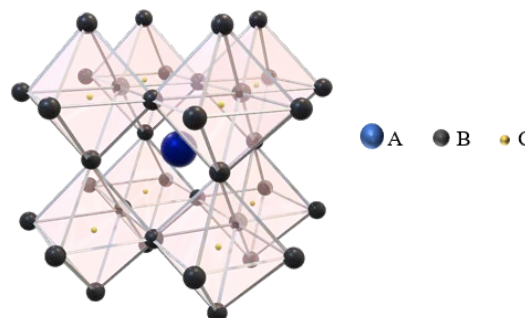


Figura 1. Estructura molecular de la perovskita.

Fuente: Autores.

Las celdas solares de perovskita están construidas comúnmente con 6 capas, estas son contacto frontal y trasero, HTL, capa de perovskita, ETL y el sustrato, como se muestra en la figura 2.

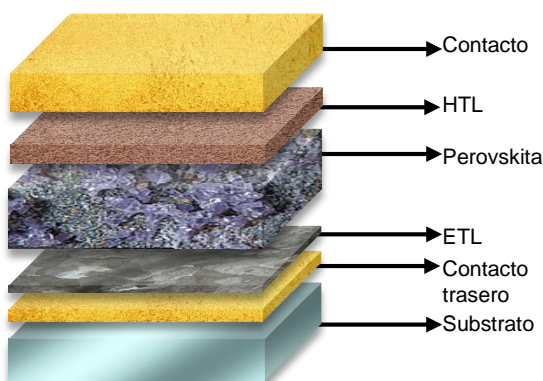


Figura 2. Estructura de la celda de perovskita.

Fuente: Autores.

A partir de los datos obtenidos del conjunto de datos mencionado, se identificaron diversos materiales para las distintas capas de las celdas solares de perovskita. En la capa de contacto frontal y trasero, se encontraron los siguientes materiales: oro (Au), plata (Ag), cobre (Cu), carbono (C) y aluminio (Al), que actúan como electrodos en estas posiciones clave. Para la capa de transporte de huecos (HTL), se identificaron materiales como el óxido de níquel (NiO-c), el poli(3-hexiltiophene) (P3HT), el poliestireno sulfonato (PEDOT), el poli(triarilamina) (PTAA) y el Spiro-OMeTAD, todos ellos utilizados para facilitar el movimiento de las cargas positivas.

En la capa de transporte de electrones (ETL), los materiales presentes incluyen fullerene (C60), el éster metílico del ácido

fenil-C61-butírico (PCBM-60), el dióxido de estaño (SnO_2) y el dióxido de titanio (TiO_2), que son responsables del transporte de los electrones hacia el electrodo. Finalmente, para la capa de sustrato, se observaron materiales como el polietileno naftalato (PEN), polietileno tereftalato (PET), grafeno de una sola capa (SLG), óxido de estaño dopado con flúor (FTO) y óxido de indio y estaño (ITO), que proporcionan soporte estructural y, en algunos casos, propiedades conductoras.

3.3. Propiedades de los materiales, toxicidad y biodegradabilidad

Los materiales utilizados en las capas de contacto frontal y trasero de las celdas solares de perovskita, presentan diferentes propiedades fisicoquímicas y posibles riesgos de toxicidad. El oro (Au) es un metal estable y resistente a la corrosión, que no suele ser reactivo bajo condiciones normales y no genera liberación significativa de metales pesados. La plata (Ag), aunque eficiente como conductor, puede liberar iones de plata (Ag^+) al medio ambiente, lo que resulta tóxico para organismos acuáticos. El cobre (Cu), otro material común en estas capas, puede liberar iones que también tienen efectos perjudiciales en ambientes acuáticos, afectando la vida de plantas y animales. Finalmente, el aluminio (Al) es un material conductor y ligero que, aunque no se considera un metal pesado, puede disolverse en ambientes ácidos, lo que puede generar toxicidad en suelos y cuerpos de agua, afectando la flora y fauna. Estos materiales, especialmente la plata y el cobre, presentan riesgos ambientales relacionados con la liberación de iones o partículas metálicas, mientras que el oro

tiene un impacto menor en este aspecto (Benítez & Pérez, 2022).

Por otra parte, los materiales utilizados en la capa de transporte de huecos (HTL) de las celdas solares de perovskita también presentan propiedades fisicoquímicas y riesgos ambientales relacionados con su toxicidad. El óxido de níquel (NiO-c) es un material inorgánico utilizado en esta capa, cuya liberación al medio ambiente puede generar preocupaciones debido a la presencia de níquel, un metal tóxico en ciertas concentraciones, que puede afectar tanto a los ecosistemas acuáticos como terrestres. El poli(3-hexiltiophene) (P3HT), un polímero orgánico conductor, presenta baja biodegradabilidad, lo que puede generar acumulación en el ambiente si no es gestionado adecuadamente, aunque no se considera altamente tóxico por sí mismo. El poliestireno sulfonato (PEDOT) es otro polímero conductor que puede generar preocupación por su persistencia en el ambiente, siendo resistente a la degradación natural y con potencial de liberar compuestos que pueden afectar organismos si se dispersa de manera descontrolada. El poli(triarilamina) (PTAA), aunque también es un material orgánico, presenta riesgos similares en cuanto a su estabilidad química y baja capacidad de degradación. Finalmente, el Spiro-OMeTAD, un compuesto orgánico ampliamente utilizado en celdas de perovskita, tiene limitaciones en cuanto a su biodegradabilidad y puede liberar subproductos que generen impactos negativos en el ambiente (Benítez & Pérez, 2022).

En la capa de perovskita, en los cationes A, Methylammonium (MA) es un compuesto orgánico relativamente inestable que

puede liberar subproductos al medio ambiente durante la degradación de la perovskita, lo que podría afectar tanto el rendimiento como la durabilidad de las celdas solares, aunque no es altamente tóxico. Similarmente, el Formamidinio (FA) es otro compuesto orgánico que, aunque más estable que MA, también tiene una baja capacidad de biodegradación, lo que podría generar preocupaciones ambientales si se acumula sin control. Por su parte, el cesio (Cs), siendo un catión inorgánico más estable que los anteriores, puede representar un riesgo si se libera en el ambiente, ya que, aunque no es extremadamente tóxico, su presencia en altas concentraciones puede impactar negativamente suelos y cuerpos de agua (Torres *et al.*, 2023).

Para los cationes B, el plomo es particularmente preocupante debido a su alta toxicidad, ya que su liberación en el medio ambiente, ya sea por lixiviación o degradación, puede contaminar el suelo y el agua, con graves consecuencias para la salud humana y los ecosistemas. Este es uno de los principales obstáculos para que las celdas solares de perovskita sean más sostenibles. El estaño, por otro lado, es una alternativa menos tóxica al plomo, aunque también presenta riesgos ambientales. Si bien su liberación en el ambiente puede ser perjudicial, los impactos del estaño son significativamente menores en comparación con los del plomo (Valle *et al.*, 2022).

En el caso de los aniones C, se emplean haluros como el bromo (Br) y el yodo (I). El bromo, aunque eficaz en la estructura de las celdas solares, es un compuesto reactivo y potencialmente tóxico, cuya liberación al medio ambiente podría afectar

negativamente la vida marina y los ecosistemas acuáticos. El yodo, por su parte, es menos tóxico que el bromo, pero su liberación en grandes cantidades también conlleva riesgos ambientales. Aunque el yodo es esencial en pequeñas cantidades para la salud humana, su acumulación puede alterar los equilibrios químicos en suelos y cuerpos de agua, impactando el ecosistema.

En cuanto a la capa de transporte de electrones (ETL), el fullerene y el PCBM-60, al ser compuestos orgánicos, presentan baja biodegradabilidad y pueden acumularse en el ambiente, aunque no son altamente tóxicos. Sin embargo, su liberación sostenida podría afectar los ecosistemas. Por otro lado, los compuestos inorgánicos como el SnO₂ y el TiO₂ son más estables, pero el TiO₂ puede generar nanopartículas que, en concentraciones elevadas, podrían tener efectos adversos en organismos acuáticos y terrestres.

Por último, la capa de sustrato, se emplean materiales como el politereftalato de etileno (PET), el polietileno naftalato (PEN), el grafeno de capa simple (SLG), el óxido de estaño dopado con flúor (FTO) y el óxido de indio-estaño (ITO). Los polímeros como el PET y el PEN son resistentes y duraderos, pero tienen una baja biodegradabilidad, lo que genera problemas si se liberan en grandes cantidades al ambiente. El SLG, siendo un material basado en carbono, presenta baja toxicidad, pero su producción puede ser contaminante. Los materiales conductores FTO e ITO, aunque efectivos en la conducción eléctrica, contienen elementos como el indio, que es escaso y puede tener impactos ambientales significativos si no se gestionan adecuadamente.

3.4. Propuesta de desarrollo para futuras celdas.

Los datos obtenidos revelan que las celdas solares de perovskita contienen varios componentes con un alto potencial contaminante, siendo el plomo uno de los más críticos dentro de la estructura de la capa de perovskita. Sin embargo, existe una alternativa para sustituir el plomo, esta es el estaño, que aunque también es un material contaminante, presenta un perfil de toxicidad mucho más bajo en comparación (Toro & Zora, 2022). En la figura 3 se muestra la eficiencia de conversión de potencia (PCE) de diversas celdas solares que utilizan diferentes combinaciones de cationes en su estructura.

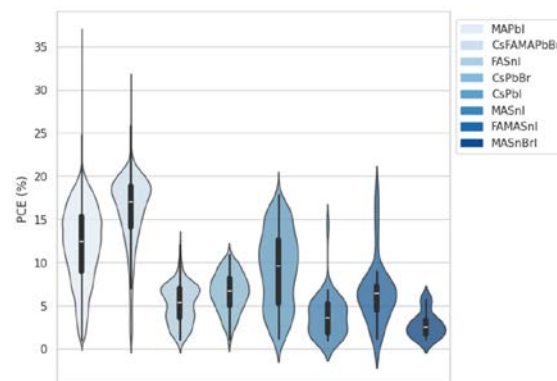


Figura 3. Comparativa de PCE de diferentes perovskitas.

Fuente: Autores con datos de "The Perovskite Database".

Los resultados indican que, salvo en los casos de las celdas más eficientes, como las basadas en MaPbI₃ y CsFAMAPbBrI, las configuraciones que emplean plomo o estaño logran mantener eficiencias similares. Esto pone de manifiesto que el uso de estaño puede actuar de sustituto del plomo en fin de reducir los posibles problemas contaminantes. Por lo tanto,

existe una posible vía de investigación hacia el desarrollo de celdas solares de perovskita que, además de ser altamente eficientes, integren mejores prácticas en términos de reciclabilidad y sostenibilidad a largo plazo.

4. CONCLUSIONES

En conclusión, el análisis de las celdas solares de perovskita revela que, aunque estas tecnologías ofrecen un alto potencial en términos de eficiencia de conversión de energía, presentan desafíos importantes en cuanto a su impacto ambiental. El uso de materiales como el plomo en la capa de perovskita destaca como una de las principales preocupaciones, dado su alto nivel de toxicidad y su capacidad para contaminar suelos y cuerpos de agua. No obstante, la posibilidad de reemplazar el plomo con estaño, que presenta menores riesgos ambientales, abre una ruta viable hacia la mejora de la sostenibilidad de estas celdas. A pesar de que las celdas con estaño muestran eficiencias comparables a las de plomo, es crucial continuar investigando sobre la reducción del impacto de otros componentes presentes en las distintas capas, como los haluros y los metales en los contactos frontales y traseros. Finalmente, los avances hacia la producción de celdas solares de perovskita más respetuosas con el medio ambiente, sin comprometer su rendimiento, podrían marcar un hito en la evolución de las energías renovables, haciendo de esta tecnología una opción más viable y sostenible en el largo plazo.

5. AGRADECIMIENTOS

Este artículo es producto del proyecto de investigación Aprendizaje automático en

celdas solares de tercera generación: diseño, simulación y validación experimental, de la convocatoria 890 de 2020 de Minciencias, con contrato ICETEX 2022-0724.

6. REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- (NREL), T. N. R. E. L. (2023). *Interactive Best Research-Cell Efficiency Chart | Photovoltaic Research | NREL*. <https://www.nrel.gov/pv/interactive-cell-efficiency.html>
- Benítez, C. A. V., & Pérez, F. J. M. (2022). *Comparación de los impactos ambientales entre un nuevo prototipo fotovoltaico de perovskita desarrollado en Colombia y diferentes celdas solares mediante el análisis de ciclo de vida*. Camilo A. Valderrama Benítez Tesis de maestría presentada para optar.
- Cota, M. (2017). *CELDA SOLARES DE PEROVSKITA: ¿LEJOS O CERCA DE SU COMERCIALIZACIÓN?* January 2017. https://www.researchgate.net/profile/Marcos-Cota/publication/330546433_Celdas_Solares_de_Pervoskita_Lejos_o_cerca_de_su_comercializacion/links/5c479ebd92851c22a3897268/Celdas-Solares-de-Perovskita-Lejos-o-cerca-de-su-comercializacion.pdf
- Delgadillo, J. M., Martínez, I. Patricia, Aviña, X., & Simental, J. H. (2020). Desarrollo de Celdas Solares Sensibilizadas con Tinte Utilizando Titanato de Bismuto Dopado con Niobio Depositado en el Electrodo. *XXVI Congreso Internacional Anual de La Somim*, 6. http://somim.org.mx/memorias/memorias2020/articulos/A2_115.pdf
- Esparza Salazar, D., Torres García, C. J., Sánchez Díaz, J. A., & Rivas Martínez, J. M. (2021). Celdas solares de tercera generación a base de puntos cuánticos y perovskitas. *Memorias*

- Jornadas de Investigación, Investigación Científica, Vol. 14, No. 2 Junio-Diciembre 2020, Pp. 310-315., 14(2), 310–315.*
<http://ricaxcan.uaz.edu.mx/jspui/handle/20.500.11845/2403>
- Jacobsson, T. J., Hultqvist, A., García-Fernández, A., Anand, A., Al-Ashouri, A., Hagfeldt, A., Crovetto, A., Abate, A., Ricciardulli, A. G., Vijayan, A., Kulkarni, A., Anderson, A. Y., Darwich, B. P., Yang, B., Coles, B. L., Perini, C. A. R., Rehmann, C., Ramirez, D., Fairen-Jimenez, D., ... Unger, E. (2021). An open-access database and analysis tool for perovskite solar cells based on the FAIR data principles. *Nature Energy* 2021 7:1, 7(1), 107–115. <https://doi.org/10.1038/s41560-021-00941-3>
- Toro, J. F. E., & Zora, D. E. R. (2022). *ESTUDIO DE LA INCORPORACIÓN DE BOROHI DRURO DE SODIO PARA MEJORAR LA ESTABILIDAD DE PEROVSKITAS HÍBRIDAS A BASE DE ESTAÑO Y PLOMO PARA SU APLICACIÓN EN CELDAS SOLARES DE TERCERA GENERACIÓN* [Universidad de Antioquia]. https://bibliotecadigital.udea.edu.co/bitstream/10495/31890/1/EcheverriJuan_2022_EstudiolncorporacionBorohidruo.pdf
- Torres, G., César, J., Soria, D., Daniel, V., Óscar, O. N., Sánchez, C., & Luis, J. (2023). *Avance en el desarrollo de celdas solares con materiales tipo perovskita.* 33–42. <http://hdl.handle.net/11191/10471>
- Valle, E. L. del, Reyes, M. C. C., & Paz, J. R. (2022). *IMPACTO DE LAS PEROVSKITAS HÍBRIDAS EN LA ESTABILIDAD INTRÍNSECA DE LAS CELDAS SOLARES Emanuel.* 8, 1–6. https://revistaelectronica-ipn.org/ResourcesFiles/Contenido/28/TECNOLOGIA_28_001115.pdf