

# ЧИСЛЕННОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ МИКРОСТРУКТУРЫ МЕЗОПОРИСТОГО $\text{TiO}_2$ СЛОЯ НА ЕГО АНТИОТРАЖАЮЩУЮ СПОСОБНОСТЬ В ПРИМЕНЕНИИ К SI-СОЛНЕЧНЫМ ЭЛЕМЕНТАМ

Мутылина П.В.<sup>1,2</sup>, Панина Е.К.<sup>2</sup>, Гейнц Ю.Э.<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Национальный исследовательский Томский государственный университет, г. Томск, Россия

<sup>2</sup>Институт оптики атмосферы им. В.Е. Зуева СО РАН, г. Томск, Россия

e-mail: [mpv@iao.ru](mailto:mpv@iao.ru), [pek@iao.ru](mailto:pek@iao.ru), [ygeints@iao.ru](mailto:ygeints@iao.ru)

Теоретически рассмотрена задача повышения эффективности работы солнечного элемента (СЭ), образованного пористым  $\text{TiO}_2$  слоем различной толщины и структурного дизайна, нанесенным на плоскую кремниевую подложку. Детально исследованы характеристики эффективного поглощения и рассеяния света антиотражающим слоем двух структурных типов: в виде самосборки  $\text{TiO}_2$  наносфер фиксированного диаметра, либо внедрения в сплошной слой диоксида титана хаотично расположенных вертикальных нанопор цилиндрического сечения. Предложены практические рекомендации по снижению оптических потерь СЭ за счет уменьшения отражения и повышения доли поглощенного в его объеме света.

Одним из перспективных направлений в области возобновляемых источников энергии является разработка “солнечных элементов” (СЭ) с использованием технологий, позволяющих эффективно концентрировать солнечный свет в ограниченных объемах. Благодаря успешным технологическим инновациям, кремниевые СЭ стали доступны для коммерческого использования, например, в космической отрасли. Кроме того были разработаны и внедрены наземные энергетические системы с использованием СЭ, основанные на новых материалах, что способствовало значительному увеличению их квантовой эффективности.

Несмотря на достигнутый прогресс, одним из ключевых факторов, ограничивающих квантовую эффективность солнечных элементов, остаются оптические потери, вызванные отражением падающего на них света. Например, в воздушной среде гладкая поверхность кремния отражает более 30% падающего солнечного излучения. В связи с этим в целях минимизации оптических потерь и повышения эффективности улавливания солнечной энергии разработаны различные методы, включая использование антиотражающих (АО) покрытий, текстурирование поверхности, а также их комбинированное применение для увеличения оптического пути света внутри солнечного элемента [1 – 3]. Вместе с тем, несмотря на востребованность производства солнечных элементов на основе Si с нанесенным  $\text{TiO}_2$  пористым слоем, анализ существующей литературы указывает на определенный недостаток данных по выбору оптимальных параметров пористого АО покрытия в зависимости от его состава.

В настоящей работе с помощью численного моделирования рассматривается задача возможного снижения оптических потерь СЭ за счет уменьшения отражения и повышения доли поглощенного света в объеме элемента, образованного пористым  $\text{TiO}_2$  слоем различной толщины и структурного дизайна, нанесенным на плоскую кремниевую подложку. Проведен подробный анализ характеристик эффективного поглощения и рассеяния света нанопористым АО слоем различных конструкционных решений, что позволило сформировать практические рекомендации по созданию оптимального АО покрытия, повышающего эффективность работы типичных СЭ на основе кристаллического кремния.

АО-покрытие задавалось в виде прямоугольного  $\text{TiO}_2$  слоя, толщиной  $h_L$ , размещенного на плоской подложке с фиксированной толщиной  $h_s = 300$  нм. В качестве материала подложки использовался монокристаллический кремний (Si) с комплексным показателем преломления  $m = n - jk$ , зависящим от длины волны падающего света. Окружающая среда считалась воздухом с показателем преломления  $n_0 = 1$  и нулевым оптическим поглощением. При моделировании реалистичного пористого АО покрытия мы рассматривали сплошной слой диоксида титана, внутри которого присутствуют воздушные каверны нанометровых сечений. Такая пористая структура могла быть двух структурных типов. Первый тип покрытия (рис. 1а) формировался как самосборка  $\text{TiO}_2$  наносфер (НС) фиксированного диаметра  $D = 30$  нм, что моделировало естественный процесс газодинамического осаждения наночастиц на поверхность подложки солнечного элемента. Во втором случае, двухкомпонентная структура АО слоя, наоборот, создавалась путем внедрения в готовый сплошной слой диоксида титана хаотично расположенных вертикальных нанопор (НП) цилиндрического сечения с фиксированным диаметром  $D$ , как показано на рис. 1б.

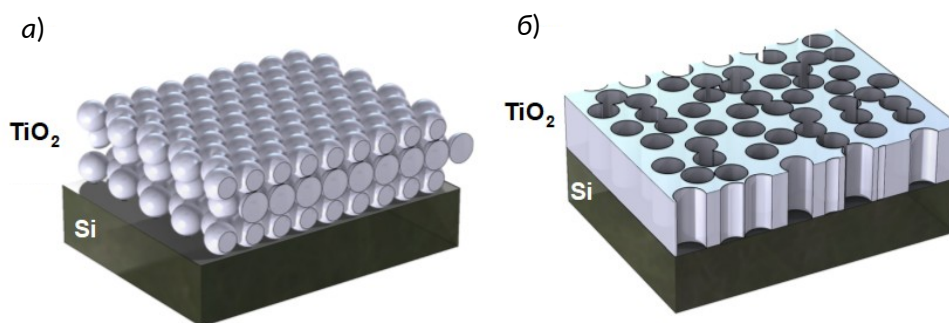


Рисунок 1 - Структурные типы АО-слоя для моделирования оптического пропускания СЭ: самосборка  $\text{TiO}_2$  наносфер (а) и случайное распределение вертикальных нанопор (б)

Численное моделирование оптического пропускания АО-покрытия проводилось с помощью программного пакета COMSOL Multiphysics, реализующего решение дифференциальных уравнений волновой оптики методом конечных элементов (FEM). Оптическое излучение с длиной волны  $\lambda$  в спектральном диапазоне солнечного света падает на СЭ сверху, рассеивается АО слоем и попадает в подложку, где определяется пространственный профиль оптического поля и вычисляются энергетические коэффициенты пропускания  $T(\lambda)$ , отражения  $R(\lambda)$  и поглощения  $A(\lambda)$  на нижней грани подложки.

На рисунке 2 показан спектральный ход отражения  $R(\lambda)$  и поглощения  $A(\lambda)$  света солнечными элементами с различными типами АО поверхности. Диаметр пор  $D=30$  нм соответствовал диаметру наносфер. Плотная упаковка моноразмерных частиц позволила реализовать пористую восьмислойную структуру АО слоя фиксированной толщины при приблизительном совпадении плотности формируемых слоев. Для сравнения пунктирной линией обозначены параметры для кремниевой подложки без какого-либо внешнего покрытия.

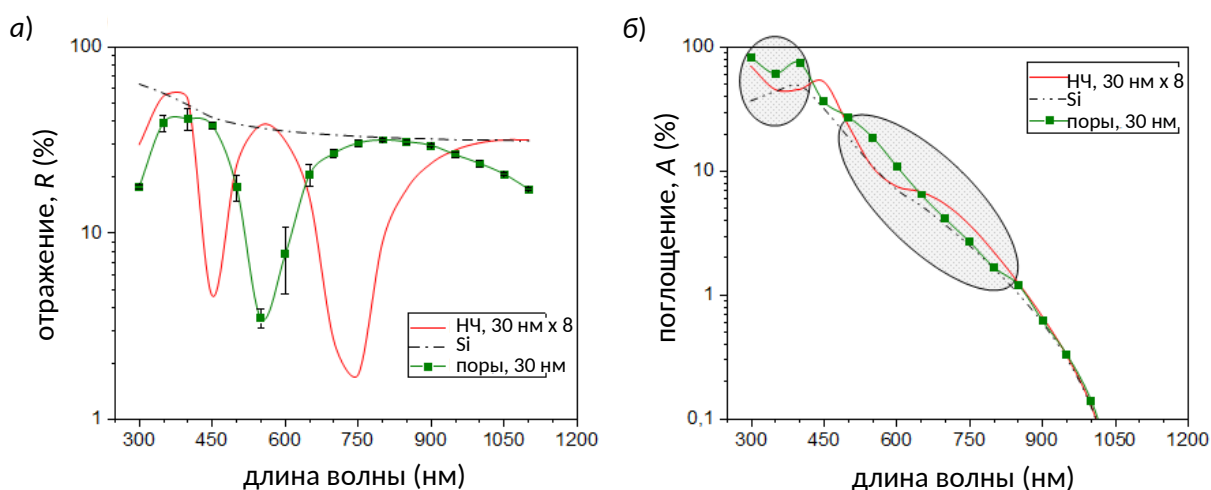


Рисунок 2 - Спектральный ход отражения  $R(\lambda)$  и поглощения  $A(\lambda)$  СЭ с различными типами АО слоя

Обращает на себя внимание различие в поведении кривых, в частности, наличие явно выраженных минимумов в зависимости  $R(\lambda)$  (рис. 2а), что говорит об уменьшении в определенных спектральных интервалах оптических потерь, вызванных отражением падающего на СЭ света. Это приводит к соответствующему росту доли поглощенного света в объеме моделируемого СЭ с пористым  $\text{TiO}_2$  покрытием различного структурного дизайна (рис. 2б).

Далее более подробно исследуем энергетические коэффициенты  $R(\lambda)$  и  $A(\lambda)$  от другого расчетного параметра, а именно, толщины антиотражающего покрытия  $h_L$  (рис. 3).

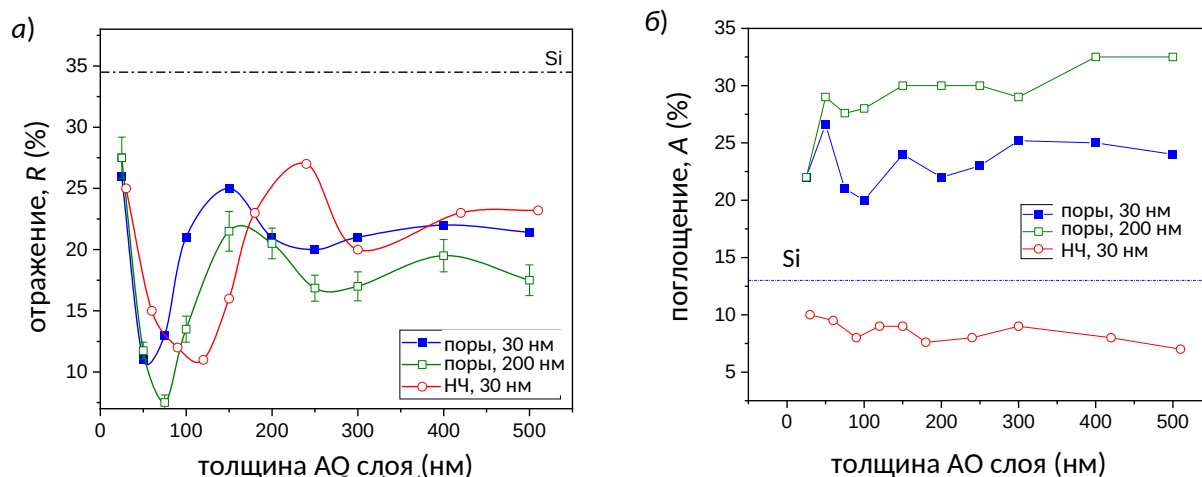


Рисунок 3 - Зависимость коэффициентов отражения  $R(\lambda)$  и поглощения  $A(\lambda)$  от толщины АО слоя двух структурных типов

Видно, что тонкий ( $h_L = 50 \div 120$  нм) АО слой более эффективен с точки зрения улавливания солнечной энергии благодаря минимальным потерям на отражение независимо от его микроструктурного состава (рис. 3а). Однако значительный интерес представляют зависимости  $A(\lambda)$  (рис. 3б). Установлено, что отличия в значениях коэффициента поглощения для покрытий в виде самосборки наносфер и вертикальных нанопор составляют более 3х раз. Это подтверждает предположение, что антибликовые текстурированные поверхности, собранные по-разному, по-разному трансформируют оптические поля, что, в конечном счете, определяет эффективность работы СЭ.

Таким образом, численным моделированием показано, что снижение оптических потерь СЭ возможно благодаря созданию оптимального АО покрытия в виде внедрения в сплошной слой диоксида титана хаотично расположенных вертикальных нанопор цилиндрического сечения. Подобная конструкция солнечного элемента позволит повысить эффективность работы СЭ на основе кристаллического кремния.

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования в рамках выполнения работ по Государственному заданию ИОА СО РАН.

1. Singh G., Verma S.S. Design and Analysis of Thin Film GaAs Solar Cells Using Silver Nanoparticle // Plasmons. Photon. Nanostructures - Fundamentals Appl. 2019. 37, 100731
2. Abu-Shamleh A., Alzubi H., Alajlouni A. Optimization of Antireflective Coatings with Nanostructured TiO<sub>2</sub> for GaAs Solar Cells // Photon. Nanostructures - Fundamentals Appl. 2021. 43, 100862

3. *Sagar R., Rao A.* Nanoscale TiO<sub>2</sub> and Ta<sub>2</sub>O<sub>5</sub> as Efficient Antireflection Coatings on Commercial Monocrystalline Silicon Solar Cell//*J. Alloys Comp.* 2021. 862, 158464