

Численный анализ эффективности нанопористого просветляющего покрытия из диоксида титана в применении к кремниевой солнечной энергетике

Ю.Э. Гейнц¹, Е.К. Панина¹

¹ Институт оптики атмосферы им. В.Е. Зуева СО РАН,
634055, Россия, г. Томск, площадь Академика Зуева, д. 1

Аннотация

Функциональную эффективность солнечных элементов ограничивают оптические потери при отражении падающего на них солнечного света. Снижение отраженной компоненты достигается использованием просветляющих покрытий, в частности, нанопористого диоксид титанового слоя. В работе теоретически рассмотрена задача рассеяния оптического излучения в спектральном диапазоне солнечного света на кремниевой подложке толщиной 300 нм с нанесенным на нее пористым просветляющим диоксид титановым покрытием различной толщины (25÷500 нм) и структурного дизайна. Детально исследованы характеристики поглощения и рассеяния света антиотражающим слоем двух принципиально различных структурных типов, образованных либо в виде нескольких слоев плотно упакованных наносфер, либо сплошного слоя с хаотично расположенными вертикальными нанопорами диаметром 25÷200 нм, заполненными воздухом. Установлено, что просветляющее покрытие с достаточно крупными субволновыми воздушными порами (диаметр 200 нм) характеризуется наиболее низким оптическим отражением и способно снизить коэффициент отражения кремниевого слоя до трех раз интегрально по солнечному спектру.

Ключевые слова: антиотражающий пористый слой, солнечный элемент, поглощение и рассеяние света, солнечный свет.

Цитирование: Гейнц, Ю.Э. Численный анализ эффективности нанопористого просветляющего покрытия из диоксида титана в применении к кремниевой солнечной энергетике / Ю.Э. Гейнц, Е.К. Панина // Компьютерная оптика. – 2026. – Т. 50, № 2. – 1722. – DOI: 10.18287/COJ1722.

Citation: Geints YE, Panina EK. Numerical analysis of the efficiency of a nanoporous titanium dioxide antireflection coating for the use in silicon solar panels. Computer Optics 2026; 50(2): 1722. DOI: 10.18287/COJ1722.

Введение

Интенсивно расширяющееся промышленное производство требует поиска новых перспективных направлений в области возобновляемых источников энергии. Одним из них является создание солнечных элементов с использованием технологий, позволяющих эффективно концентрировать солнечный свет в ограниченных объемах. Использование солнечных элементов (СЭ), благодаря высокому потенциалу их применения в производстве (увеличение масштабов производства, снижение его стоимости), является в ряде случаев экономически более выгодным по сравнению с традиционными природными источниками энергии, такими как газ и уголь. Кроме того, солнечная энергетика является экологически «чистой» и не оказывает существенного вредного воздействия на окружающую среду.

Многолетние исследования, начавшиеся в 1954 году с разработки кремниевых солнечных элементов на основе р-п-перехода, привели к значительному увеличению эффективности преобразования солнечного излучения [1, 2]. Благодаря успешным технологическим инновациям, кремниевые СЭ стали доступны для коммерческого использования [3] и в течение нескольких десятилетий доминировали в космической отрасли [4]. Кроме того, в последние два десятилетия были разработаны и внедрены наземные энергетические системы с использованием СЭ, основанные на новых материалах, а также на двойных и многослойных р-п-переходах, что способствовало значительному увеличению их квантовой эффективности [5].

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 [6]. В целях минимизации оптических потерь и повышения эффективности улавливания солнечной энергии разработаны различные методы, включая использование просветляющих покрытий, текстурирование поверхности активного слоя, а также комбинированное применение данных техник для увеличения оптического пути света внутри солнечного элемента [7 – 9]. Следует заметить, что просветляющие покрытия, которые по сути выполняют функцию антиотражающего (АО) слоя, помимо солнечных элементов, широко применяются в

различных областях науки и техники, включая солнечные тепловые системы и оптические устройства, такие как камеры и корректирующие линзы [10].

Диоксид титана (TiO_2) благодаря экологически безопасным характеристикам материала, его нетоксичности в сочетании с высокой фотостабильностью, а также повышенной влагостойкости является перспективным материалом для данных приложений. Он активно исследуется в области создания высокоэффективных солнечных элементов [11, 12], антиотражающих покрытий [13 – 15] и фотокатализа [16, 17], в частности, для реализации процессов фотоокислительного самоочищения [18, 19]. TiO_2 обладает широкой запрещенной зоной (3,2 эВ) и демонстрирует способность хорошо пропускать оптическое излучение в диапазоне частот солнечного света, за исключением ультрафиолета (УФ).

Основная функция АО-покрытия – минимизировать отражение падающего на него света, тем самым увеличивая количество световой энергии, проходящей АО-слоем и поглощаемой нижележащим рабочим слоем солнечного элемента. В центре солнечного спектра (550 нм) коэффициент преломления кристаллического кремния, являющегося активным слоем Si-CЭ, равняется приблизительно четырем, тогда как слой TiO_2 в фазе рутила имеет значение данного параметра порядка 2,5. За счет этого градиента показателя преломления и происходит снижение потерь на френелевское отражение падающего оптического излучения. При этом в отличие от сплошного TiO_2 -покрытия пористая структура из этого же материала, образованного либо наноразмерными вертикальными воздушными порами, либо плотными упаковками TiO_2 -наночастиц (НЧ) различного диаметра, позволяет плавно менять величину градиента показателя преломления между воздухом и активным полупроводником, лежащим в основе функционирования СЭ (кремний, перовскит). Этот эффект достигается за счет контролируемого изменения плотности пористого АО-слоя путем варьирования числа и размера воздушных промежутков. Как оказалось, пористые TiO_2 -покрытия не только минимизируют отражение благодаря оптимальному градиентному переходу показателя преломления, но и улучшают способность устройства к самоочистке и фотокаталитическому разрушению загрязняющих веществ [20 – 22]. На практике синтез нанопористого TiO_2 осуществляется различными методами [23 – 25], включая золь-гель-технологии, послойную самосборку, пиролизическую пульверизацию и др., что позволяет получать наноматериалы с контролируемыми оптическими и химическими свойствами, что важно для повышения эффективности работы СЭ.

Вместе с тем при высокой востребованности солнечных элементов на основе Si с нанесенным TiO_2 пористым АО-покрытием анализ существующей литературы указывает на определенный недостаток информации по выбору оптимальных структурных параметров такого пористого АО-покрытия в зависимости от его микрофизического состава. Действительно, как было отмечено выше, нанопористость АО-покрытия может достигаться как формированием в нем воздушных нанопор [26], так и путем самосборки такого слоя из ансамблей наночастиц [27]. В обоих случаях удается достичь определенного значения градиента коэффициента преломления между окружающей средой и поверхностью СЭ, когда потери на отражение будут минимальными. Тем не менее эффективность каждого такого нанопористого слоя в качестве антиотражающего покрытия может быть существенно разной в зависимости от того, как структурно он образован. Это связано, главным образом, с различным характером трансформаций оптических полей при взаимодействии солнечного света с нанопористым АО-слоем.

В настоящей работе с помощью численного моделирования рассматривается задача возможного снижения оптических потерь Si-CЭ за счет уменьшения отражения и повышения доли поглощенного света в объеме элемента, образованного пористым 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 конструктивных решений, что позволило сформировать практические рекомендации по созданию оптимального АО-покрытия, повышающего эффективность работы типичных СЭ на основе кристаллического кремния.

Следует отметить, что для сопоставления наших модельных экспериментов с опубликованными в литературе данными по функционированию реально используемых фотоэлектрических структур теоретическое моделирование должно проводиться с учетом генерации фотоэлектронов (фототока) во всем стеке СЭ с учетом присутствия электродов и буферных слоев, что представляет собой непростую задачу, требующую отдельного исследования. Здесь мы ограничились более простой задачей и рассмотрели только начальную стадию всего процесса генерации фотоэлектронов в СЭ, а именно падение света на внешний слой СЭ и оптимизацию его оптических характеристик.

1. Модель антиотражающего пористого слоя

При моделировании АО-покрытия задавалось в виде прямоугольного 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. Дисперсионные кривые для действительной n и мнимой k частей показателя преломления Si и TiO_2 приведены на рис. 1*в* и *г*. 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 TiO_2 -наносфер (НС) фиксированного диаметра $D=30$ нм. Для этого внутри объема АО-слоя программно генерируется массив координат центров НС, распределенных в узлах гексагональной пространственной решетки без возможности частичного перекрытия объемов соседних НС. Это позволило смоделировать упорядоченную микросборку в виде заданного количества плотно упакованных слоев одинаковых НС с фиксированным значением пористости, 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. В отличие от предыдущего структурного типа пористого слоя, центры воздушных промежутков задавались случайным образом при помощи специального программного алгоритма [28] и имели равномерный закон распределения по внутренней поверхности АО-покрытия. Это приводило к созданию случайно расположенных групп НП, разделенных блоками сплошного TiO_2 с криволинейными границами. Понятно, что в каждом варианте программной генерации такая структура в общем случае характеризуется случайной плотностью материала и случайным значением параметра пористости, зависящим как от заданного количества НП, так и от их конкретного распределения по АО-слою. Поэтому при исследовании свойств такого структурного типа АО-слоя требовалось статистическое усреднение по ансамблю случайных реализаций генерируемого НП-слоя.

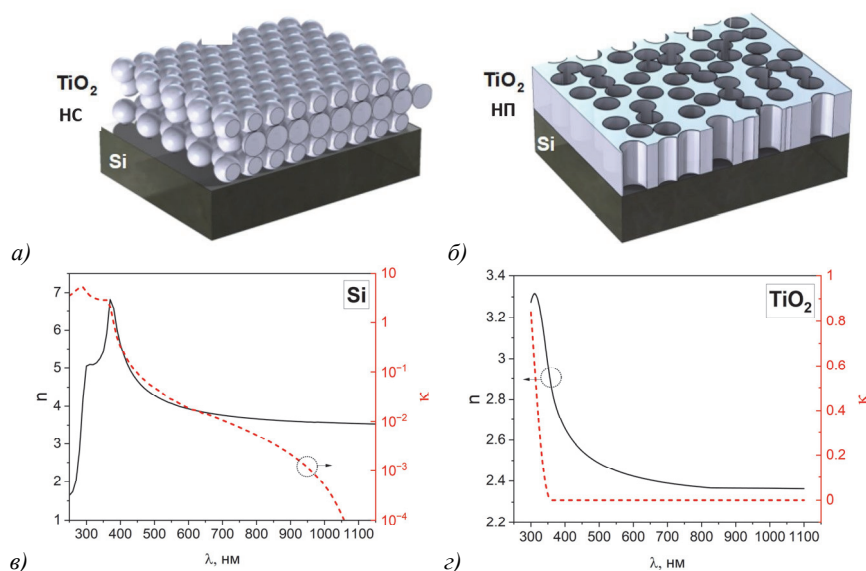


Рис. 1. Структурные типы АО-слоя для моделирования оптического пропускания СЭ: самосборка НС (а) и случайное распределение НП (б). (в, г) Дисперсионные зависимости оптических параметров материала подложки из Si (в) и материала АО слоя из TiO_2 (г). Принадлежность кривых к соответствующим осям показана кружками со стрелками

Численное моделирование оптического пропускания АО-покрытия проводилось с помощью программного пакета COMSOL Multiphysics 5.1 с вычислительным модулем «Wave Optics», реализующим решение дифференциальных уравнений волновой оптики методом конечных элементов (FEM). Использовалась трехмерная (3D) геометрия задачи. Оптическое излучение с длиной волны λ 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, которые связаны очевидным выражением: $T + R + A = 1$. На боковых границах расчетной области применялись периодические условия Блоха для моделирования бесконечно протяженной слоистой структуры.

Задание падающего оптического излучения на верхней границе вычислительного домена осуществлялось с помощью установки излучающего порта, генерирующего плоскую электромагнитную волну с ТЕМ-поляризацией. Для дискретизации всех расчетных областей использовалась тетрагональная сетка с ребрами элементов менее $\lambda/20$. Для численного решения волнового уравнения для оптического поля был выбран стандартный нелинейный решатель, основанный на итерационном методе Ньютона с затуханием (Newton method with dumping). Линейный шаг этого решателя выполняется с помощью распараллеленного метода для больших разреженных систем алгебраических уравнений (MUMPS). Как правило, надежная сходимость решаемой численной задачи достигалась при оптимизированных параметрах нелинейного решателя, т.е. при числе

итераций около 30 и пороговой точности алгоритма 10^{-4} . Пространственные размеры прямоугольной расчетной области составляли (длина×высота×ширина): $800 \times 1000 \times 800 \text{ нм}^3$. Время расчета каждого варианта задачи на многопроцессорном компьютере (2×Xenon Silver) могло быть от получаса до 2 часов в зависимости от типа рельефа АО-слоя.

2. Результаты численного моделирования и их обсуждение

Как известно, в процессе преобразования света в электричество солнечными элементами часть падающей на поверхность СЭ энергии неизбежно теряется на паразитное отражение. Для минимизации потерь, связанных с отражением, чрезвычайно важно правильно подобрать параметры АО-слоя (толщина, конструкционные особенности – количество и размер пор или НЧ). Для этого нами проведены численные расчеты основных энергетических коэффициентов – отражения $R(\lambda)$ и поглощения $A(\lambda)$ на нижней грани подложки для различных модификаций внешнего слоя, формирующего АО-покрытие.

На рис. 2 показан спектральный ход отражения $R(\lambda)$ и поглощения $A(\lambda)$ света солнечными элементами с различными типами АО-поверхности. В первом случае пористость АО-слоя обеспечивается упорядоченной микросборкой монодисперсных частиц, во втором – хаотично расположенными вертикальными нанопорами. Диаметр пор $D = 30 \text{ нм}$ соответствовал диаметру наносфер. Полная толщина АО-слоя равнялась $h_L = 240 \text{ нм}$, что приблизительно соответствует нечетному числу четвертьволновых слоев $h_L \approx 3h_{AR} = 3\lambda/4n_e$ для длины волны $\lambda = 600 \text{ нм}$ в материале с эффективным показателем преломления $n_e = 2$. Такое значение n_e достигается в АО-слое при учете воздушных полостей в сплошном массиве диоксида титана и использования для получившейся эффективной среды правила смешивания Бруггемана. Отметим, что наличие доверительного интервала у точек, соответствующих нанопористому слою на рис. 2а, связано с разбросом параметра R вследствие случайного характера формирования пористой структуры. Плотная упаковка моноразмерных частиц позволила реализовать пористую восьмислойную структуру АО-слоя фиксированной толщины (240 нм) при приблизительном совпадении плотности формируемых слоев. Для сравнения пунктирной линией на рис. 2 показаны значения оптических коэффициентов для кремниевой подложки без какого-либо внешнего покрытия («Si» на графиках). Здесь и далее считается, что солнечный свет падает на СЭ вертикально.

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 TiO_2 -покрытием различного структурного дизайна (рис. 2б).

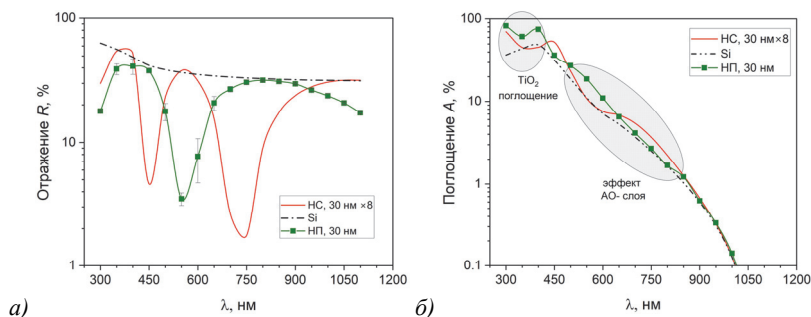


Рис. 2. Спектральный ход коэффициентов оптического отражения R (а) и поглощения A (б) в подложке Si с различными типами верхнего пористого TiO_2 -слоя

При этом спектральное положение минимумов отражения для разных типов микроструктуры АО-слоя также различное. Действительно, абсолютный минимум коэффициента $R \approx 3\%$ от НП поверхности реализуется для длины волны около 550 нм, в то время как для АО-покрытия, собранного из восьми слоев НС, видны уже два минимума отражения: $R \approx 5\%$ на 450 нм и $R \approx 1,6\%$ при 750 нм. Диапазон длин волн от 450 нм до 750 нм характеризуется наибольшей изменчивостью значений отражения R пористого АО-слоя и при этом содержит максимальное количество энергии солнечной радиации, приходящей к поверхности Земли в видимом свете. Поэтому именно в этом спектре рассматриваемые пористые АО-покрытия наиболее эффективны и обеспечивают повышение оптического поглощения рабочего слоя кремниевого СЭ. На рис. 2б эта спектральная область отмечена соответствующим эллипсом. Заметим, что повышение коэффициента поглощения в УФ-длинах волн никак не связано с антибликовым эффектом покрытия. Как видно на рис. 1б, до длин волн $\lambda < 350 \text{ нм}$ диоксид титана имеет большое собственное поглощение, что приводит к практически стопроцентному поглощению падающего света еще в самом АО-слое, а не в рабочей зоне СЭ (кремнии).

Для оценки АО-эффективности различных покрытий удобно использовать интегральный коэффициент отражения R_T , определяемый как усредненный по стандартному солнечному спектру AM1,5 спектральное отражение слоя:

$$R_T = \left(\int_{300}^{1100} [AM1, 5] d\lambda \right)^{-1} \int_{300}^{1100} [AM1, 5] R(\lambda) d\lambda. \quad (1)$$

Параметр R_T был рассчитан для двух микроструктурных типов покрытий с различной суммарной толщиной, составленных из разного числа слоев НС, или вертикальных нанопор. Итоговый результат сравнения в виде зависимости коэффициента R_T от толщины антиотражающего покрытия h_L показан на рис. 3а. При моделировании покрытия из НС мы создавали плотно упакованный слой монодисперсных TiO_2 сфер с диаметром $D=30$ нм и затем варьировали количество таких слоев, размещенных в узлах гексагональной пространственной решетки. При формировании АО-слоя из нанопор было выполнено условие сохранения для любого размера НП приблизительно равными отношения суммарной объемной доли воздуха и диоксида титана (пористость). Это достигалось путем соответствующего изменения числа НП. В результате, средняя пористость АО-слоев из НС и НП при моделировании всегда составляла около 25 %.

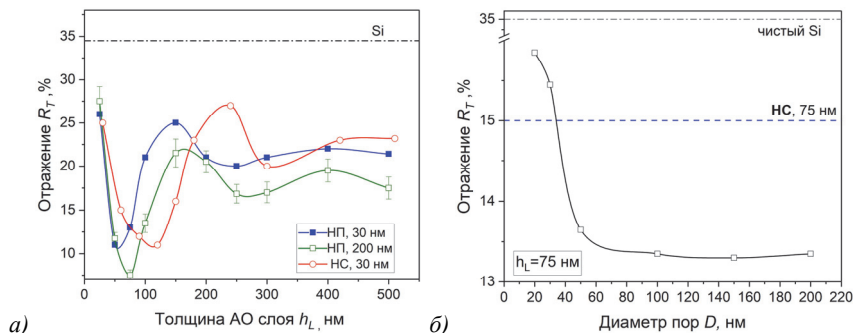


Рис. 3. (а) Зависимость интегрального отражения R_T от толщины h_L АО-покрытия и (б) от диаметра D НП для $h_L = 75$ нм

Видно, что в целом, независимо от микроструктурного состава, более тонкий АО-слой с $h_L = 50 \div 120$ нм обладает большей эффективностью с точки зрения улавливания солнечной энергии благодаря минимальным потерям на отражение. При этом интегральный по спектру Солнца коэффициент отражения снижается ниже 10 % от своего значения ~ 35 % для чистой кремниевой поверхности. При повышении толщины АО-покрытия наблюдается рост его оптического отражения до значений порядка $R_T = 20$ %. Этот подъем носит осциллирующий характер и очевидно связан с увеличением рассеяния оптического излучения на наноструктурных неоднородностях толстого пористого покрытия.

Косвенно о влиянии этого фактора свидетельствуют более низкие значения отражения света в АО-покрытии с крупными нанопорами, $D=200$ нм, поскольку в этом случае при сохранении пористости слоя уменьшается число границ раздела воздух – TiO_2 с резким градиентом показателя преломления. Более подробно влияние размера НП показано на рис. 3б. Здесь толщина АО-покрытия была фиксирована, $h_L = 75$ нм, а изменялся диаметр пор. Как хорошо видно, при любом размере НП наличие дополнительного TiO_2 -слоя всегда приводит к снижению потерь на оптическое отражение в сравнение с поверхностью чистого кремния. При этом пористый слой с диаметром пор $D > 50$ нм демонстрирует меньшее интегральное отражение, чем аналогичный по параметру пористости и толщине слой из двух слоев НС (показано синим пунктиром на рисунке).

В оценке эффективности функционирования любого СЭ важным параметром является сохранение его способности к оптико-электрическому преобразованию при изменении угла освещения падающим светом. Очевидно, что вследствие дифракции Френеля наклонное падение света на плоскую поверхность СЭ всегда будет характеризоваться усилением отраженной компоненты и, следовательно, понижением эффективности работы активного слоя элемента по сравнению с его нормальным освещением. С этой точки зрения использование в качестве внешней поверхности СЭ слоя с субволновыми неоднородностями имеет перспективы снизить суммарное отражение за счет «запутывания» оптической волны при дифракции на нанорельефе.

Для исследования данного эффекта нами был проведен расчет функции пропускания различных нанопористых АО-покрытий при изменении угла падения оптической волны. Интегральный коэффициент отражения R_T таких покрытий представлен на рис. 4 для четырех углов падения излучения α , при этом нормальное освещение соответствует углу $\alpha = 0$. В качестве АО-покрытий с приблизительно одинаковой толщиной 75 нм моделировались два пористых слоя с различным диаметром пор (30 и 200 нм) и два слоя из НС различного диаметра. В последнем случае использовались либо сферы с диаметром 40 нм, собранные в гексагональную решетку из двух слоев (общей высотой 70 нм) и обозначенные на рисунке «НС, 36×2 », или же монослой 75 нм наносфер с соответствующим обозначением «НС, 76×1 ». Для учета того, что в реальности солнечный свет является неполяризованным, расчет отражения проводился отдельно для s- и p-поляризаций монохроматических волн из солнечного спектра, а затем полученные значения усреднялись.

Из анализа рис. 4 следует, что, в целом, полученные зависимости демонстрируют монотонное поведение с увеличением угла падения света. При этом в диапазоне углов от 0 до 25° интегральное отражение НС поверхности

изменяется незначительно, однако при более высоких значениях α отражение АО-слоя кремниевого СЭ начинает резко повышаться и при $\alpha = 60^\circ$ оно может почти вдвое превысить свой минимальный уровень. Важно отметить, что, независимо от угла падения солнечного света, просветляющие поверхности в виде вертикальных нанопор всегда характеризуются более низким отражением вследствие более равномерного по объему АО-слоя распределения преломленного света. Следовательно, именно такой тип нанопористого слоя из диоксида титана может быть рекомендован в качестве АО-покрытия для создания более энергоэффективных СЭ на основе кремния.

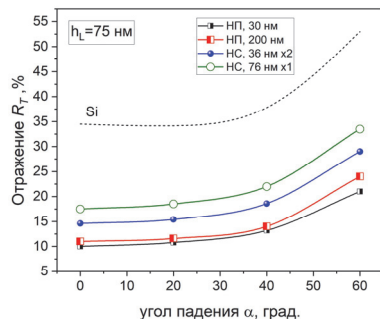


Рис. 4. Зависимость интегрального отражения R_T пористых АО-покрытий различной микроструктуры от угла освещения α

Заключение

Таким образом, в работе рассмотрена проблема рассеяния оптического излучения в спектральном диапазоне солнечного света на специфическом наноструктурированном материале, моделирующем поверхность кремниевого солнечного элемента, покрытого антиотражающим слоем из нанопористого диоксида титана в виде вертикальных нанопор, заполненных воздухом, или же нескольких слоев, плотно упакованных TiO_2 -наносфер. С помощью численного ФЕМ-моделирования оптических полей в окрестности рассматриваемой фотонной структуры мы детально изучили влияние микроструктурного типа НП-покрытия на пропускающие свойства АО-слоя, нанесенного на подложку из Si. Результаты нашего моделирования подтверждают сложившееся в научной литературе мнение о позитивном влиянии такого НС покрытия на снижение доли паразитного отраженного света от тестовых подложек в широком диапазоне углов освещения и дают физическое объяснение этому эффекту.

Немаловажно, что наше исследование позволяет дать практические рекомендации по оптимальной структуре нанопористого АО-покрытия для получения максимального пропускания оптического излучения в кремниевую подложку. В частности, установлено, что из всех типов рассмотренных нанопористых структур наименьшее отражение обеспечивает именно пористое покрытие с крупными воздушными порами субволнового диаметра (200 нм), которое способно снизить коэффициент отражения чистого кремниевого слоя интегрально до трех раз. При этом многослойная микросборка из TiO_2 -наносфер с таким же значением пористости АО-структуры демонстрирует практически двукратно меньший эффект.

Благодарности

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

References

- [1] Chapin D.M., Fuller C.S., Pearson G.L. A New Silicon *p-n* Junction Photocell for Converting Solar Radiation into Electrical Power. *J Appl Phys* 1954; 25(5): 676–677. <https://doi.org/10.1063/1.1721711>.
- [2] Loferski J.J. The first forty years: A brief history of the modern photovoltaic age. *Prog Photovolt: Res Appl* 1993; 1(1): 67–78. <https://doi.org/10.1002/pip.4670010109>.
- [3] Stabler H.P. Silicon Solar Cells. *Am J Phys* 1960; 28: 994. doi:10.1119/1.1935994
- [4] Bailey S., Raffaele R. Operation of Solar Cells in a Space Environment in Practical Handbook of Photovoltaics. Editors McEvoy A, Markvart T, Castañer L. Second Edition Boston: Academic Press; 2012: 863–880. doi:10.1016/B978-0-12-385934-1.00027-1
- [5] Green M., Dunlop E., Hohl-Ebinger J., Yoshita M., Kopidakis N., Hao X. Solar Cell Efficiency Tables (Version 57). *Prog Photovolt Res Appl* 2021; 29: 3–15. doi:10.1002/pip.3371.
- [6] Thomas R.E., Varma S., Waechter D., Dodd C.X., Das S.R. Screen Printed Ta₂O₅ and TiO₂ Antireflection Coatings for Crystalline and Polycrystalline Silicon Solar Cells. *Can J Phys* 1989; 67: 430–434. doi:10.1139/p89-076.
- [7] Singh G., Verma S.S. Design and Analysis of Thin Film GaAs Solar Cells Using Silver Nanoparticle. *Plasmons Photon Nanostructures - Fundamentals*. 2019; 37: 100731. doi:10.1016/j.photonics.2019.100731.
- [8] Abu-Shamleh A., Alzubi H., Alajlouni A. Optimization of Antireflective Coatings with Nanostructured TiO₂ for GaAs Solar Cells. *Photon Nanostructures – Fundamentals*. 2021; 43: 100862. doi:10.1016/j.photonics.2020.100862.
- [9] Sagar R., Rao A. Nanoscale TiO₂ and Ta₂O₅ as Efficient Antireflection Coatings on Commercial Monocrystalline Silicon Solar Cell. *J Alloys Comp* 2021; 862: 158464. doi:10.1016/j.jallcom.2020.158464.
- [10] Citek K. Anti-reflective coatings reflect ultraviolet radiation. *Optom J Am Optom Assoc*. 2008; 79: 143–148. DOI:10.1016/j.optm.2007.08.019

- [11] O'Regan B., Grätzel M. A Low-Cost, High-Efficiency Solar Cell Based on Dye-Sensitized Colloidal TiO₂ Films. *Nature*. 1991; 353: 737-740. <http://dx.doi.org/10.1038/353737a0>.
- [12] Kim Y.J., Lee Y.H., Lee M.H., Kim H.J., Pan J.H., Lim G.I., et al. Formation of Efficient Dye-Sensitized Solar Cells by Introducing an Interfacial Layer of Long-Range Ordered Mesoporous TiO₂ Thin Film *Langmuir*. 2008; 24: 13225–13230. doi:10.1021/la802340g.
- [13] Wan D., Chen H.-L., Tseng T.-C., Fang C.-Y., Lai Y.-S., Yeh F.-Y. Antireflective Nanoparticle Arrays Enhance the Efficiency of Silicon Solar Cells. *Adv Funct Mater*. 2010; 20: 3064–3075. doi:10.1002/adfm.201000678.
- [14] Manea E., Parvulescu C.C., Purica M., Budianu E., Comanescu F. Antireflective Coatings with Nanostructured TiO₂ Thin Films for Silicon Solar Cells. *J Nano Res*. 2013; 21: 89–94. doi:10.4028/www.scientific.net/JNanoR.21.89.
- [15] Salvaggio M.G., Passalacqua R., Abate S., Perathoner S., Centi G., Lanza M., et al. Functional Nano-Textured Titania-Coatings with Self-Cleaning and Antireflective Properties for Photovoltaic Surfaces. *Solar Energy*. 2016; 125: 227–242. doi:10.1016/j.solener.2015.12.012.
- [16] Fujishima A., Rao T.N., Tryk D.A. Titanium dioxide photocatalysis. *J Photochem Photobiol C: Photochem Rev*. 2000; 1(1): 1–21. [https://doi.org/10.1016/S1389-5567\(00\)00002-2](https://doi.org/10.1016/S1389-5567(00)00002-2).
- [17] Fujishima A., Zhang X., Tryk D.A. TiO₂ photocatalysis and related surface phenomena. *Surf Sci Rep*. 2008; 63(12): 515–582. <https://doi.org/10.1016/j.surfrep.2008.10.001>
- [18] Paz Y., Luo Z., Rabenberg L., Heller A. Photooxidative Self-Cleaning Transparent Titanium Dioxide Films on Glass. *J Mater Res*. 1995; 10: 2842–2848. doi:10.1557/JMR.1995.2842.
- [19] Muraca A.R., Kershis M.D., Camillone N., White M.G. Ultrafast Dynamics of Acetone Photooxidation on TiO₂(110). *J Chem Phys*. 2019; 151: 161103. doi:10.1063/1.5122269.
- [20] Adak D., Ghosh S., Chakrabarty P., Mondal A., Saha H., Mukherjee R., Bhattacharyya R. Self-cleaning V-TiO₂:SiO₂ thin-film coatings with enhanced transmission for solar glass cover and related applications. *Solar Energy*. 2017; 155: 410–418. DOI:10.1016/j.solener.2017.06.014.
- [21] Son J, Kundu S, Verma LK, Sakhua M, Danner AJ, Bhatia CS, Yang H. A practical superhydrophilic self cleaning and antireflective surface for outdoor photovoltaic applications. *Solar Energy Materials and Solar Cells*. 2012; 98: 46–51. <https://doi.org/10.1016/j.solmat.2011.10.011>.
- [22] Verma LK, Sakhua M, Son J, Danner AJ, Yang H, Zeng HC, Bhatia CS. Self-cleaning and antireflective packaging glass for solar modules. *Renewable Energy*. 2011; 36(9): 2489–2493. <https://doi.org/10.1016/j.renene.2011.02.017>.
- [23] Tamar Y, Tzabari M, Haspel C, Sasson Y. Estimation of the porosity and refractive index of sol-gel silica films using high resolution electron microscopy. *Solar Energy Materials & Solar Cells* 2014; 30: 246–256. <http://dx.doi.org/10.1016/j.solmat.2014.07.020>
- [24] Katagiri K, Yamazaki S-I, Inumaru K, Koumoto K. Anti-reflective coatings prepared via layer-by-layer assembly of mesoporous silica nanoparticles and polyelectrolytes. *Polym. J*. 2015; 47: 190–194. <https://doi.org/10.1038/pj.2014.104>
- [25] Zhou Q, McIntosh DC, Chen Y, Sun W, Li Z, Campbell J.C. Nanosphere natural lithography surface texturing as anti-reflective layer on SiC photodiodes. *Opt. Express*. 2011; 19: 23664–23670. <https://doi.org/10.1364/OE.19.023664>
- [26] Miao L, Su LF, Tanemura S, Fisher CAJ, Zhao LL, Liang Q, Xu G. Cost-effective nanoporous SiO₂-TiO₂ coatings on glass substrates with antireflective and self-cleaning properties. *Applied Energy* 2013; 112: 1198–1205 <https://doi.org/10.1016/j.apenergy.2013.03.043>
- [27] Krogman KC, Druffel T, Sunkara MK. Anti-reflective optical coatings incorporating nanoparticles. *Nanotechnology*. 2005; 16(7): 338–343 DOI:10.1088/0957-4484/16/7/005
- [28] Geints YE, Panina EK. Boosting Light Absorption of a Therapeutic Microcapsule by Means of Auxiliary Solid Nanoparticles. *Opt Commun*. 2023. 537, 129444. <https://doi.org/10.1016/j.optcom.2023.129444>.

Сведения об авторах

Гейнц Юрий Эльмарович, 1963 года рождения, в 1986 году окончил Томский государственный университет по специальности «Оптические приборы и системы», работает главным научным сотрудником в Институте оптики атмосферы им. В.Е. Зуева СО РАН, доктор физико-математических наук. Область научных интересов: компьютерная оптика, нанофотоника, нелинейная оптика волновых процессов. E-mail: ygeints@iao.ru

Панина Екатерина Константиновна, 1968 года рождения, в 1991 году окончила Томский государственный университет по специальности «Оптические приборы и системы», работает ведущим научным сотрудником в Институте оптики атмосферы им. В.Е. Зуева СО РАН, доктор физико-математических наук. Область научных интересов: нелинейная оптика волновых процессов, нанофотоника. E-mail: pek@iao.ru

Поступила в редакцию 25 апреля 2025 г. Окончательный вариант – 19 сентября 2025 г.

Numerical analysis of the efficiency of a nanoporous titanium dioxide antireflection coating for the use in silicon solar panels

Y.E. Geints¹, E.K. Panina¹

¹ V.E. Zuev Institute of Atmospheric Optics SB RAS, Ploschad Akademika Zueva 1, Tomsk, 634055, Russia

Abstract

The efficiency of solar cells is limited by optical losses due to the partial reflection of incident sunlight. The losses are reduced by using antireflection coatings, in particular a nanoporous titanium dioxide layer. We theoretically study a problem of scattering of the solar light from a silicon substrate of thickness 300 nm with a titanium dioxide coating varying in thicknesses from 25 to 500 nm and of different structural designs. Characteristics of light absorption and scattering by an antireflective layer of two different structural types, formed either as several layers of densely packed nanospheres or as a continuous layer with randomly arranged vertical nanoscale pores filled with air, are studied in detail. It is found that an antireflection coating with large air pores (200 nm in diameter) has the lowest optical reflection and can reduce the reflection coefficient of a silicon layer by up to three times across the entire solar spectrum.

Keywords: antireflective coating, nanoporous layer, solar cell, light absorption and scattering, sunlight.

Citation: Geints YE, Panina EK. Numerical analysis of the efficiency of a nanoporous titanium dioxide antireflection coating for the use in silicon solar panels. *Computer Optics* 2026; 50(2): 1722. DOI: 10.18287/COJ1722.

Acknowledgements: This work was funded by the RF Ministry of Science and Higher Education within a government project of V.E. Zuev Institute of Atmospheric Optics SB RAS.

About authors

Yuri El'marovich Geints (b. 1963), graduated from Tomsk State University in 1986 with a degree of “optical devices and systems”, works as a Chief Researcher at the V.E. Zuev Institute of Atmospheric Optics SB RAS, Doctor of Physical and Mathematical Sciences. Research interests: computer optics, nanophotonics, nonlinear optics of wave processes. E-mail: ygeints@iao.ru

Ekaterina Konstantinovna Panina (b. 1968), graduated from Tomsk State University in 1991 with a degree of “optical devices and systems”, works as a Leading Researcher at the V.E. Zuev Institute of Atmospheric Optics SB RAS, Doctor of Physical and Mathematical Sciences. Research interests: nanophotonics, nonlinear optics of wave processes. E-mail: pek@iao.ru

Received April 25, 2025. The final version – September 19, 2025.
