



UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM MODELAGEM COMPUTACIONAL

OTIMIZAÇÃO GEOMÉTRICA DE CÉLULAS SOLARES PELO MÉTODO DESIGN CONSTRUTAL

por

Rogério Almeida Gouvêa

Dissertação para obtenção do Título de
Mestre em Modelagem Computacional

Rio Grande, março, 2018

ROGÉRIO ALMEIDA GOUVÊA

OTIMIZAÇÃO GEOMÉTRICA DE
CÉLULAS SOLARES PELO MÉTODO
DESIGN CONSTRUTAL

Dissertação de mestrado apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Modelagem Computacional, da Universidade Federal do Rio Grande, como parte dos requisitos para a obtenção do título de Mestre em Modelagem Computacional.

Área de concentração: Interdisciplinar.

Orientador: Prof. Dr. Jeferson A. Souza

Co-orientador: Prof. Dr. Mário L. Moreira

Rio Grande, 2018

Rogério Almeida Gouvêa

“ Otimização Geométrica de Células Solares pelo Método Design Construtal ”

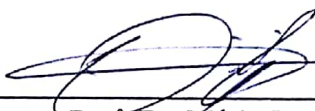
Dissertação apresentada ao Programa de Pós Graduação em Modelagem Computacional da Universidade Federal do Rio Grande - FURG, como requisito parcial para obtenção do Grau de Mestre. Área concentração: Modelagem Computacional.

Aprovada em

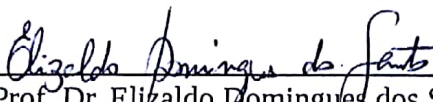
BANCA EXAMINADORA



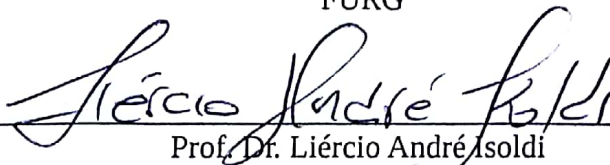
Prof. Dr. Jeferson Avila Souza
Orientador – FURG



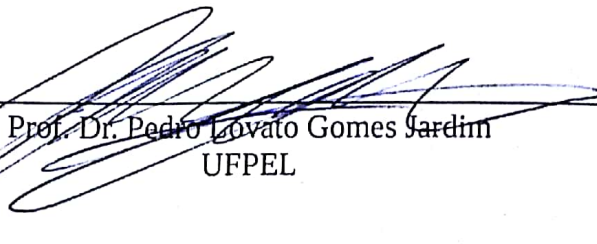
Prof. Dr. Mário Lucio Moreira
Coorientador - UFPEL



Prof. Dr. Elizaldo Domingues dos Santos
FURG



Prof. Dr. Liércio André Isoldi
FURG



Prof. Dr. Pedro Lovato Gomes Jardim
UFPEL

”Design não é a forma como se parece ou se sente.
Design é a forma que funciona.”
— STEVE JOBS

AGRADECIMENTOS

Agradeço primeiramente às agências de fomento CAPES, CNPq e à Universidade Federal do Rio Grande (FURG) cujo suporte financeiro permitiram a realização desse trabalho. Agradeço a meu orientador Jeferson Avila Souza por todo suporte e pela coragem em aceitar orientar um trabalho em parte fora do seu campo de pesquisa. Agradeço também a meu co-orientador Mário Lúcio Moreira por ter dado o suporte de conhecimento e orientação necessário para realização desse trabalho.

Agradeço à minha família, amigos e minha terapeuta que me deram o suporte emocional necessário para eu conseguir concluir essa etapa apesar dos desafios que surgiram no caminho. Agradeço a Deus e à espiritualidade pela possibilidade de crescimento e de encontrar a felicidade em cada momento da jornada da vida.

RESUMO

A modelagem computacional vem se tornando uma ferramenta importante no projeto e otimização das texturas de superfícies usadas em células solares a fim de manipular o espalhamento da luz. O espalhamento da luz em interfaces rugosas, assim como um retrorefletor eficiente, é uma forma tradicional de aumentar a absorção da luz nas camadas absorventes das células solares. Recentemente, substratos com texturas periódicas foram investigados como uma alternativa para substratos com superfícies texturizadas randomicamente alcançando melhores eficiências. Nesse trabalho, a Teoria Construtal é proposta como uma base teórica de otimização geométrica para a superfície de células solares. A magnitude da energia do campo eletromagnético calculado pelo método de diferenças finitas no domínio do tempo (FDTD) é tomada como a função de controle para evoluir a geometria da célula solar no sentido de maior absorção da luz. Diversas geometrias fixas para as texturas foram otimizadas em relação às variáveis que determinam a geometria dos enxertos. O melhor resultado entre essas foi obtido com uma geometria de extremidade circular com área de enxerto igual a $0.1 \mu\text{m}^2$ e espaçamento entre enxertos (período) de $0.4 \mu\text{m}$ atingindo um aumento de performance relativa de 63.3% em relação à célula sem textura. Construindo a textura de forma automatizada a partir da função de controle com um limite de área de até $0.1 \mu\text{m}^2$ o aumento de performance relativa obtido foi de 30.2%. Apesar de inferior ao máximo obtido com geometrias fixas, esse valor é maior que o obtido com geometrias fixas com os mesmos parâmetros de simulação para o qual o melhor resultado foi da textura com formato triangular com 26.1% de aumento de performance relativa.

Palavras-chaves: Teoria Construtal, células solares, FDTD, otimização geométrica.

ABSTRACT

Computer modelling has become increasingly important in the design and optimization of surface textures that are used in solar cells to manipulate scattering of light. Light scattering at rough interfaces together with efficient back reflector is a standard approach to enhance absorption of light in the absorber layers of solar cells. Recently, substrates with periodic surface features have been investigated as an alternative to randomly surface-textured substrates reaching improved efficiencies. In this work, Constructal Theory is proposed as a framework for geometric optimization for the surface of solar cells. Magnitude of the energy of the electromagnetic field calculated by the finite-difference time domain method (FDTD) is taken as the control function to evolve the solar cell geometry towards greater light absorption. Several textures with fixed geometries have been optimized from the variables that define the grating's geometry. Best result was obtained for a rounded-tip grating with an area of $0.1 \mu\text{m}^2$ and spacing between gratings of $0.4 \mu\text{m}$ reaching 63.3% increase in performance relative to a flat cell. Building the texture in a automated manner from the control function with area of texture limited up to $0.1 \mu\text{m}^2$ the relative increase in performance was 30.2%, despite being smaller than the maximum achieved for fixed geometries, this value is greater than that of a fixed geometry with the same simulation parameters. Best result with fixed geometries with the period of $0.1 \mu\text{m}$ was 26.1% increase in relative performance with a triangular texture.

Palavras-chaves: Constructal Theory, solar cells, FDTD, geometric optimization.

ÍNDICE

1	INTRODUÇÃO	19
1.1	Objetivo	22
2	Revisão bibliográfica	23
2.1	Método Design Construtal	23
2.1.1	Avaliação geométrica de arranjos tubulares submetido a escoamento externo utilizando Design Construtal	24
2.1.2	Projeto de cavidades de resfriamento através da aplicação do Design Construtal	26
2.2	Estado da arte em células solares texturizadas	29
2.3	Técnicas de confinamento da luz	32
2.3.1	Técnicas não-difrativas	32
2.3.2	Técnicas refrativas	34
2.3.3	Técnicas difrativas	35
2.4	Teoria do confinamento de luz em células solares texturizadas	37
2.4.1	Equação da grade de difração	37
2.4.2	Características de uma estrutura de confinamento de luz efetiva	38
2.4.3	Medindo o fator de confinamento de luz em uma célula solar	40
2.5	Contribuição do trabalho	41
3	ENERGIA SOLAR E CÉLULAS SOLARES	42
3.1	Células solares e as gerações dos sistemas fotovoltaicos	42
3.2	Célula solar clássica de junção $p - n$	43
3.3	Eletrônica e terminologia em células solares	43
3.3.1	Corrente de curto-circuito	44
3.3.2	Voltagem em circuito-aberto	44
3.3.3	Resistência em série	45
3.3.4	Resistência <i>shunt</i>	45
3.3.5	Fator de forma	46
3.3.6	Eficiência	46
3.3.7	Eficiência quântica	47
3.3.8	Fotocorrente total gerada	47
4	MODELAGEM MATEMÁTICA	49
4.1	Equações do eletromagnetismo	49
4.2	Propriedades óticas dos materiais e o modelo de Lorentz	50
4.3	Invariância de escala e adimensionalização das equações de Maxwell	51
4.4	Cálculo de fotocorrente total gerada	53

5	MODELAGEM NUMÉRICA	55
5.1	Método de diferenças finitas no domínio do tempo	55
5.1.1	Método de diferenças centradas e ordem de precisão	56
5.1.2	Algoritmo de Yee	56
5.1.3	Exemplo de aplicação 1D do FDTD	57
5.2	Resolução no método FDTD	60
5.3	Fontes e cálculo de espectros	60
5.4	Condições de contorno	62
5.5	Definição do problema	63
6	CÓDIGO COMPUTACIONAL E PROCEDIMENTO DE SIMULAÇÃO	69
6.1	MEEP	69
6.2	Verificação e validação do código computacional para estudo de células solares	70
6.3	Ferramentas de pós-processamento: VISIT e Python	72
6.4	Procedimento de simulação	72
6.5	Cálculo de performance relativa	74
6.6	Algoritmo de otimização geométrica com restrição de forma	76
6.7	Algoritmo de otimização geométrica automática	78
7	RESULTADOS	80
7.1	Otimização geométrica com restrição	80
7.2	Otimização geométrica automática	102
7.2.1	Otimização geométrica automática livre	102
7.2.2	Otimização geométrica automática por camadas	109
7.2.3	Comparação dos modos de otimização automática e geometrias geradas aleatoriamente	115
8	CONCLUSÕES	116

LISTA DE FIGURAS

Figura 2.1:	Representação da área do problema. Fonte: PEDROTTI (2015)	24
Figura 2.2:	Geometria elementar (a) e otimizada com dois (b) e três (c) cilindros. Fonte: PEDROTTI (2015)	25
Figura 2.3:	Geometria ótima de arranjo de cilindros otimizada com restrição de distância de 1.5D. Fonte: PEDROTTI (2015)	26
Figura 2.4:	Modelo da cavidade 2D e 3D mostrando as condições de contorno e cotas. Fonte: VIANNA (2016)	27
Figura 2.5:	Malha matriz estruturada e elemento fundamental hachurado de lado “D”. Fonte: VIANNA (2016)	27
Figura 2.6:	Corpo sólido: (a) início, sem cavidade elementar; (b) primeira cavidade criada; (c) próximas cavidades criadas. Fonte: VIANNA (2016)	28
Figura 2.7:	Construção da cavidade com $\Phi=0.2$ e $RC=11$. Fonte: VIANNA (2016) . .	28
Figura 2.8:	Crescimento anual de publicações em células solares. Fonte: Web of Science.	31
Figura 2.9:	Gráfico mostrando o aumento em percentual das publicações em gerencia- mento de luz para células solares. Fonte: Web of Science.	32
Figura 2.10:	Esquema de uma célula solar heterojunção usando nanofios para aumentar a área de superfície. Fonte: GHARGHI et al. (2012).	33
Figura 2.11:	(a) quando o comprimento de onda é bem maior que os detalhes da textura ($\lambda > \Lambda$) ela é percebida como multiplas camadas fazendo um meio de transição para o índice de refração dos dois meios. (b) quando o comprimento de onda é bem menor que os detalhes da textura ($\lambda < \Lambda$), a textura funciona como um meio para multiplas reflexões. Fonte: (SCHUSTER, 2017).	35
Figura 2.12:	Combinação dos efeitos de antireflexão nanoestrutura periódica e mi- croestrutura aperiódica. Fonte: B. (2017).	35
Figura 2.13:	Ilustração da propagação de uma frente de onda para obstáculo maior que o comprimento de onda (a), da ordem do comprimento de onda (b) e menor que o comprimento de onda (c). Fonte: SCHUSTER (2017).	36
Figura 2.14:	Parte microestruturada de um disco de armazenamento de dados causando difração da luz. Fonte: CHIU et al. (2011).	36
Figura 2.15:	Difração de uma onda plana de comprimento de onda λ e número de onda $k = \frac{2\pi}{\lambda}$ em uma camada de interface estruturada entre meios de índice de refração n_1 e n_2 . Fonte: SCHUSTER (2017).	38
Figura 2.16:	Ilustração do processo difrativo de um dispersor lambertiano ideal. Fonte: SCHUSTER (2017).	39
Figura 3.1:	Ilustração da zona de depleção causando a separação dos portadores de carga. Adaptado de: KHAN (2013)	44
Figura 3.2:	Circuito equivalente de uma célula solar. Fonte de: KHAN (2013)	44

Figura 3.3:	Ponto de máxima potência para uma célula solar hipotética. Fonte: PINHO; GALDINO (2014)	45
Figura 3.4:	Obtenção de resistências a partir da curva $I \times V$. Fonte: PINHO; GALDINO (2014)	46
Figura 3.5:	Espectro de irradiação AM1.5G pela norma ASTM G-173-03 (International standard ISO 9845-1, 1992).	47
Figura 4.1:	Espectro da densidade de fluxo de fótons baseado no AM1.5G.	53
Figura 5.1:	Ilustração do retículo de Yee no qual as equações de Maxwell são discretizadas. Fonte: OSKOOI et al. (2010).	55
Figura 5.2:	Ilustração do domínio discretizado do FDTD no passo temporal inicial. Adaptado de: HUANG et al. (1991)	58
Figura 5.3:	Ilustração do domínio discretizado do FDTD avançando meio passo temporal. Adaptado de: HUANG et al. (1991)	59
Figura 5.4:	Domínio computacional da célula solar sem textura na superfície.	64
Figura 5.5:	Parte real e imaginária da função dielétrica do silício usada nesse trabalho.	65
Figura 5.6:	Curva polinomial ajustada aos dados experimentais do AM1.5G.	66
Figura 5.7:	Diferente geometrias de enxertos testadas aplicando diferentes valores para os parâmetros hf e lf enquanto a área da seção transversal do enxerto foi mantida constante em $0.01 \mu\text{m}^2$ ou $0.1 \mu\text{m}^2$	67
Figura 5.8:	Ilustração da otimização automática usando blocos elementares de dimensões $50 \text{ nm} \times 50 \text{ nm}$, (a) mostra o começo da otimização para a primeira camada até o número ótimo de blocos nessa camada (ex.: 5 blocos) ; (b) otimização da segunda camada seguindo o mesmo procedimento.	68
Figura 6.1:	Ilustração do dispositivo testado experimental e usado para validação do código: (a) incidência da luz (b) substrato do dispositivo.	70
Figura 6.2:	Espectro de absorção calculado por FDTD em comparação com o método TMM representando modelo experimental (vermelho). Fonte: LUNDGREN (2013)	71
Figura 6.3:	Cálculo de verificação por FDTD usando MEEP em comparação com o cálculo da literatura usando TMM (LUNDGREN et al., 2013).	72
Figura 6.4:	Cálculo de validação comparando dados experimentais de refletividade com a curva simulada através de FDTD implementado no MEEP.	73
Figura 6.5:	Ilustração da conversão de uma placa enxertada para uma placa plana com mesmo volume de material dielétrico.	75
Figura 6.6:	Gráfico da relação de δ_{Si} com J_{ph} para uma célula solar sem textura.	75
Figura 6.7:	Diagrama de otimização geométrica com restrição de forma para os graus de liberdade A e $lf(hf)$	76
Figura 6.8:	Diagrama de otimização geométrica com restrição de forma para o grau de liberdade sz para cada enxerto otimizado.	77
Figura 6.9:	Diagrama de otimização geométrica com restrição de forma para o trapézio.	77

Figura 6.10:	Campo da função de controle (Φ) para as texturas. (a), (b) e (c) mostram passos subsequentes da otimização geométrica automática onde a região de maior contraste indica a posição onde o próximo bloco será colocado.	78
Figura 6.11:	Ilustração dos possíveis pontos de crescimento, em amarelo, para uma célula solar hipotética usando o algoritmo construtal.	79
Figura 7.1:	Eficiência das células com textura retangular de área $0.01 \mu\text{m}^2$ em função dos parâmetros geométricos hf e lf mantendo sx fixo em $1 \mu\text{m}$	80
Figura 7.2:	Efeito do espaçamento entre enxertos retangulares ($hf = 0.05 \mu\text{m}$, $lf = 0.2 \mu\text{m}$) de área $0.01 \mu\text{m}^2$ na performance relativa da célula solar.	81
Figura 7.3:	Campo da energia total para a textura retangular ($hf = 0.05 \mu\text{m}$, $lf = 0.2 \mu\text{m}$) de área $0.01 \mu\text{m}^2$ e $sx = 1 \mu\text{m}$ em passos de tempo sucessivos ($\Delta_t = 0.1 a/c$).	81
Figura 7.4:	Campo da energia total para a textura retangular ($hf = 0.05 \mu\text{m}$, $lf = 0.2 \mu\text{m}$) de área $0.01 \mu\text{m}^2$ e $sx = 0.4 \mu\text{m}$ em passos de tempo sucessivos ($\Delta_t = 0.1 a/c$).	82
Figura 7.5:	Eficiência das células com textura retangular de área $0.1 \mu\text{m}^2$ em função dos parâmetros geométricos hf e lf mantendo sx fixo em $1 \mu\text{m}$	82
Figura 7.6:	Efeito do espaçamento entre enxertos retangulares ($hf = 0.1428 \mu\text{m}$, $lf = 0.7 \mu\text{m}$) de área $0.1 \mu\text{m}^2$ na performance relativa da célula solar.	83
Figura 7.7:	Campo da energia total para a textura retangular ($hf = 0.1428 \mu\text{m}$, $lf = 0.7 \mu\text{m}$) de área $0.1 \mu\text{m}^2$ e $sx = 1 \mu\text{m}$ em passos de tempo sucessivos ($\Delta_t = 0.1 a/c$).	83
Figura 7.8:	Eficiência das células com textura retangular e extremidade circular com área $0.01 \mu\text{m}^2$ em função dos parâmetros geométricos hf e lf mantendo sx fixo em $1 \mu\text{m}$	84
Figura 7.9:	Efeito do espaçamento entre enxertos com pontas circulares ($hf = 0.0608 \mu\text{m}$, $lf = 0.1 \mu\text{m}$) com área $0.01 \mu\text{m}^2$ na performance relativa da célula solar.	85
Figura 7.10:	Campo da energia total para a textura retangular com extremidade circular ($hf = 0.0608 \mu\text{m}$, $lf = 0.1 \mu\text{m}$) de área $0.01 \mu\text{m}^2$ e $sx = 1 \mu\text{m}$ em passos de tempo sucessivos ($\Delta_t = 0.1 a/c$).	85
Figura 7.11:	Campo da energia total para a textura retangular com extremidade circular ($hf = 0.0608 \mu\text{m}$, $lf = 0.1 \mu\text{m}$) de área $0.01 \mu\text{m}^2$ e $sx = 0.3 \mu\text{m}$ em passos de tempo sucessivos ($\Delta_t = 0.1 a/c$).	86
Figura 7.12:	Eficiência das células com textura de extremidade circular de área $0.1 \mu\text{m}^2$ em função dos parâmetros geométricos hf e lf mantendo sx fixo em $1 \mu\text{m}$	86
Figura 7.13:	Efeito do espaçamento entre enxertos de extremidade circular ($hf = 0.6593 \mu\text{m}$, $lf = 0.14 \mu\text{m}$) de área $0.1 \mu\text{m}^2$ na performance relativa da célula solar.	87

Figura 7.14:	Campo da energia total para a textura retangular de extremidade circular ($hf = 0.6593 \mu\text{m}$, $lf = 0.14 \mu\text{m}$) de área $0.1 \mu\text{m}^2$ e $sx = 1 \mu\text{m}$ em passos de tempo sucessivos ($\Delta_t = 0.1 a/c$).	87
Figura 7.15:	Campo da energia total para a textura retangular de extremidade circular ($hf = 0.6593 \mu\text{m}$, $lf = 0.14 \mu\text{m}$) de área $0.1 \mu\text{m}^2$ e $sx = 0.4 \mu\text{m}$ em passos de tempo sucessivos ($\Delta_t = 0.1 a/c$).	88
Figura 7.16:	Eficiência das células com textura elipsoidal de área de enxerto $0.01 \mu\text{m}^2$ em função dos parâmetros geométricos hf e lf mantendo sx fixo em $1 \mu\text{m}$	88
Figura 7.17:	Efeito do espaçamento entre enxertos elipsoidais ($hf = 0.2123 \mu\text{m}$, $lf = 0.06$) na performance relativa da célula solar.	89
Figura 7.18:	Campo da energia total para a textura elipsoidal ($hf = 0.2123 \mu\text{m}$, $lf = 0.06$) de área $0.01 \mu\text{m}^2$ e $sx = 1 \mu\text{m}$ em passos de tempo sucessivos ($\Delta_t = 0.1 a/c$).	89
Figura 7.19:	Campo da energia total para a textura elipsoidal ($hf = 0.2123 \mu\text{m}$, $lf = 0.06$) de área $0.01 \mu\text{m}^2$ e $sx = 0.3 \mu\text{m}$ em passos de tempo sucessivos ($\Delta_t = 0.1 a/c$).	90
Figura 7.20:	Eficiência das células com textura elipsoidal de área $0.1 \mu\text{m}^2$ em função dos parâmetros geométricos hf e lf mantendo sx fixo em $1 \mu\text{m}$	90
Figura 7.21:	Efeito do espaçamento entre enxertos elipsoidais ($hf = 1.5917 \mu\text{m}$, $lf = 0.08 \mu\text{m}$) de área $0.1 \mu\text{m}^2$ na performance relativa da célula solar.	91
Figura 7.22:	Campo da energia total para a textura elipsoidal ($hf = 1.5917 \mu\text{m}$, $lf = 0.08 \mu\text{m}$) de área $0.1 \mu\text{m}^2$ e $sx = 1 \mu\text{m}$ em passos de tempo sucessivos ($\Delta_t = 0.1 a/c$).	91
Figura 7.23:	Campo da energia total para a textura elipsoidal ($hf = 1.5917 \mu\text{m}$, $lf = 0.08 \mu\text{m}$) de área $0.1 \mu\text{m}^2$ e $sx = 0.3 \mu\text{m}$ em passos de tempo sucessivos ($\Delta_t = 0.1 a/c$).	92
Figura 7.24:	Eficiência das células com textura triangular em função dos parâmetros geométricos hf e lf mantendo sx fixo em $1 \mu\text{m}$	92
Figura 7.25:	Efeito do espaçamento entre enxertos triangulares de área $0.01 \mu\text{m}^2$ ($hf = 0.4 \mu\text{m}$, $lf = 0.05 \mu\text{m}$) na performance relativa da célula solar.	93
Figura 7.26:	Campo da energia total para a textura triangular de área $0.01 \mu\text{m}^2$ e $sx = 1 \mu\text{m}$ em passos de tempo sucessivos ($\Delta_t = 0.1 a/c$).	93
Figura 7.27:	Campo da energia total para a textura triangular de área $0.01 \mu\text{m}^2$ e $sx = 0.3 \mu\text{m}$ em passos de tempo sucessivos ($\Delta_t = 0.1 a/c$).	94
Figura 7.28:	Eficiência das células com textura triangular de área $0.1 \mu\text{m}^2$ em função dos parâmetros geométricos hf e lf	94
Figura 7.29:	Efeito do espaçamento entre enxertos retangulares ($hf = 3.33 \mu\text{m}$, $lf = 0.06 \mu\text{m}$) de área $0.1 \mu\text{m}^2$ na performance relativa da célula solar.	95

Figura 7.30: Campo da energia total para a textura triangular ($hf = 3.33 \mu\text{m}$, $lf = 0.06 \mu\text{m}$) de área $0.1 \mu\text{m}^2$ e $sx = 1 \mu\text{m}$ em passos de tempo sucessivos ($\Delta_t = 0.1 a/c$).	95
Figura 7.31: Campo da energia total para a textura triangular ($hf = 3.33 \mu\text{m}$, $lf = 0.06 \mu\text{m}$) de área $0.1 \mu\text{m}^2$ e $sx = 0.3 \mu\text{m}$ em passos de tempo sucessivos ($\Delta_t = 0.1 a/c$).	96
Figura 7.32: Eficiência das células com textura trapezoidal em função dos parâmetros geométricos hf e lf mantendo sx fixo em $1 \mu\text{m}$	96
Figura 7.33: Efeito do espaçamento entre enxertos trapezoidais ($hf = 0.2857 \mu\text{m}$, $lf = 0.06 \mu\text{m}$) na performance relativa da célula solar.	97
Figura 7.34: Campo da energia total para a textura trapezoidal ($hf = 0.2857 \mu\text{m}$, $lf = 0.06 \mu\text{m}$) de área $0.01 \mu\text{m}^2$ e $sx = 1 \mu\text{m}$ em passos de tempo sucessivos ($\Delta_t = 0.1 a/c$).	97
Figura 7.35: Campo da energia total para a textura trapezoidal ($hf = 0.2857 \mu\text{m}$, $lf = 0.06 \mu\text{m}$) de área $0.01 \mu\text{m}^2$ e $sx = 0.3 \mu\text{m}$ em passos de tempo sucessivos ($\Delta_t = 0.1 a/c$).	98
Figura 7.36: Eficiência das células com textura trapezoidal de área $0.1 \mu\text{m}^2$ em função dos parâmetros geométricos hf e lf	98
Figura 7.37: Efeito do espaçamento entre enxertos trapezoidais ($hf = 2.8571 \mu\text{m}$, $lf = 0.06 \mu\text{m}$) de área $0.1 \mu\text{m}^2$ na performance relativa da célula solar.	99
Figura 7.38: Campo da energia total para a textura trapezoidal ($hf = 2.8571 \mu\text{m}$, $lf = 0.06 \mu\text{m}$) de área $0.1 \mu\text{m}^2$ e $sx = 1 \mu\text{m}$ em passos de tempo sucessivos ($\Delta_t = 0.1 a/c$).	99
Figura 7.39: Campo da energia total para a textura trapezoidal ($hf = 2.8571 \mu\text{m}$, $lf = 0.06 \mu\text{m}$) de área $0.1 \mu\text{m}^2$ e $sx = 0.3 \mu\text{m}$ em passos de tempo sucessivos ($\Delta_t = 0.1 a/c$).	100
Figura 7.40: Campo de energia para diferentes passos de otimização geométrica automática usando um bloco elementar de $0.1 \mu\text{m} \times 0.1 \mu\text{m}$	103
Figura 7.41: Gráfico de J_{ph} e ξ para otimização geométrica automática com bloco elementar de lado $0.1 \mu\text{m}$ em função da área de dielétrico e número de blocos enxertados.	104
Figura 7.42: Campo de energia para diferentes passos de otimização geométrica automática usando um bloco elementar de $0.05 \mu\text{m} \times 0.05 \mu\text{m}$	105
Figura 7.43: Gráfico de J_{ph} e ξ para otimização geométrica automática livre com bloco elementar de lado $0.05 \mu\text{m}$ em função da área de dielétrico e número de blocos enxertados.	106
Figura 7.44: Campo de energia para diferentes passos de otimização geométrica automática usando um bloco elementar de $0.025 \mu\text{m} \times 0.025 \mu\text{m}$	107

Figura 7.45: Gráfico de J_{ph} e ξ para otimização geométrica automática livre com bloco elementar de lado $0.025 \mu\text{m}$ em função da área de dielétrico e número de blocos enxertados.	108
Figura 7.46: Gráfico de J_{ph} para otimização geométrica automática por camadas com bloco elementar de lado $0.1 \mu\text{m}$	110
Figura 7.47: Campo da energia total para a textura obtida pelo algoritmo construtal com crescimento por camadas para um bloco elementar de lado $0.1 \mu\text{m}$. . .	110
Figura 7.48: Gráfico de J_{ph} para otimização geométrica automática por camadas com bloco elementar de lado $0.05 \mu\text{m}$	111
Figura 7.49: Campo da energia total para a textura obtida pelo algoritmo construtal com crescimento por camadas para um bloco elementar de lado $0.05 \mu\text{m}$. . .	111
Figura 7.50: Gráfico de J_{ph} para otimização geométrica automática por camadas com bloco elementar de lado $0.05 \mu\text{m}$	112
Figura 7.50: Campo da energia total para a textura obtida pelo algoritmo construtal com crescimento por camadas para um bloco elementar de lado $0.05 \mu\text{m}$. . .	114

LISTA DE TABELAS

Tabela 1:	Resultados das melhores geometrias de enxertos encontradas através da otimização restrita com uma área de enxerto de $0.01 \mu\text{m}^2$ com sx fixado em $1 \mu\text{m}$	100
Tabela 2:	Resultados do sx ótimo para as melhores geometrias encontradas através da otimização restrita com uma área de enxerto de $0.01 \mu\text{m}^2$	101
Tabela 3:	Resultados das melhores geometrias de enxertos encontradas através da otimização restrita com uma área de enxerto de $0.1 \mu\text{m}^2$ com sx fixado em $1 \mu\text{m}$	101
Tabela 4:	Resultados do sx ótimo para as melhores geometrias encontradas através da otimização restrita com uma área de enxerto de $0.1 \mu\text{m}^2$	101
Tabela 5:	Melhores resultados de otimização automática livre e restrita juntamente com o número de blocos e área correspondente. Todas otimizações ocorreram com um $sx = 1 \mu\text{m}$	115
Tabela 6:	Comparação das médias de J_{ph} obtidas a partir de geração aleatória com o J_{ph} obtido pelo método de otimização geométrica automática livre para os diferentes tamanhos de blocos elementares testados.	115

LISTA DE SÍMBOLOS

Algarismos Romanos

A_{enxerto}	área do enxerto [μm^2]
a	Unidade padrão de distância no MEEP, igual a $1 \mu\text{m}$ nesse trabalho.
c	Velocidade da luz no espaço livre, $299.792.458 \text{ [m.s}^{-1}\text{]}$ ou 1 [adimensional] no MEEP.
$\mathbf{E}$	Vetor campo elétrico [C.m^{-1}]
E_g	Band gap do material em questão [eV ou J].
E_c	Energia do primeiro nível da banda de condução [eV ou J].
E_v	Energia do último nível da banda de valência [eV ou J].
E_i	Energia de Fermi para portadores intrínsecos [eV ou J].
E_f	Energia do nível de Fermi para uma junção $p - n$ [eV ou J].
f_i	Força da oscilação indexada [N].
FF	Fator de forma.
hf	Altura do enxerto [μm].
$\mathbf{H}$	Vetor campo magnético [A.m^{-1}].
J_{SC}	Corrente de curto-circuito [A.m^{-1}].
J_e	Densidade de corrente elétrica [A.m^{-1}].
J_m	Densidade de corrente magnética [C.m^{-1}].
J_{ph}	Fotocorrente total gerada [A.m^{-2}].
J_{ph_i}	Fotocorrente total gerada da célula solar indexada [A.m^{-2}].
lf	Largura do enxerto [μm]
m_e	Massa do elétron, $9.10938356 \times 10^{-31} \text{ [Kg]}$.
n_{otm}	Passo de otimização
q	Carga elementar do elétron, igual a $1.60217662 \times 10^{-19} \text{ [C]}$.
R_s	Resistência em série [V.A^{-1}]
R_{sh}	Resistência em paralelo [V.A^{-1}]
sx	Largura da célula computacional [μm].
S_c	Número de <i>Courant</i> [adimensional].
$\mathbf{S}$	Vetor de <i>Poynting</i> [W.m^{-2}].
t	Tempo [s] ou unidade de tempo no MEEP [a/c]. $1 a/c = 3.335641 \times 10^{-15} \text{ s}$.
u_{EM}	energia total do campo eletromagnético [J].
V_{OC}	voltagem em circuito-aberto [V].

Símbolos gregos

ϵ	Permissividade elétrica [F.m ⁻¹].
ϵ_0	Permissividade elétrica do vácuo [F.m ⁻¹] ou 1 [adimensional] no MEEP.
ϵ_r	Permissividade elétrica relativa [F.m ⁻¹].
η	Eficiência real de uma célula solar [adimensional].
μ	Permeabilidade magnética [H.m ⁻¹].
μ_0	Permeabilidade magnética do vácuo [H.m ⁻¹] ou 1 [adimensional] no MEEP.
μ_r	Permeabilidade elétrica relativa [adimensional].
ρ	Densidade de carga [C.m ⁻³].
ω	Frequência [s ⁻¹].
ω_0	Frequência de ressonância [s ⁻¹].
ω_p	Frequência de plasma [s ⁻¹].
γ	Taxa de amortecimento [adimensional].
$\Gamma(\lambda)$	Absorção do comprimento de onda λ .
λ_0	Comprimento de onda máximo que pode ser absorvido [m].
Λ	Dimensão de um dado obstáculo [m].
ϕ_{abs}	Fluxo de fótons absorvidos [m ⁻² .s ⁻¹].
ϕ_i	Fluxo de fótons incidentes [m ⁻² .s ⁻¹].
Φ_{ph}	Densidade de fluxo de fótons [m ⁻³ .s ⁻¹].
Φ	Função de controle para otimização geométrica.
δ	Valor infinitesimal usado para diferenças centradas.
$\delta_{Si-extra}$	acréscimo correspondente de dielétrico em altura da célula [μ m].
Δ_t	Separação temporal entre nós no FDTD [s] ou $[a/c]$ no MEEP.
Δ_x	Separação espacial entre nós no FDTD nas direção x [m].
Δ_y	Separação espacial entre nós no FDTD nas direção y [m].
ξ	Performance relativa de uma célula solar texturizada, estima a capacidade de confinar a luz [adimensional].

Super índices e Subíndices

x	Subscrito indicando a componente x
y	Subscrito indicando a componente y
z	Subscrito indicando a componente z
o	Subscrito indicando que a variável foi otimizada.
i	Índice de objeto de interesse, por exemplo, célula solar texturizada.
0	Índice de objeto de referência, por exemplo, célula solar plana.

LISTA DE ABREVIATURAS

ABNT	Associação Brasileira de Normas Técnicas
AM1.5G	Densidade de irradiação espectral do Sol padrão na superfície da terra, norma ASTM G-173-03 (ISO 9845-1, 1992)
DFT	<i>Discrete Fourier Transform</i> ou Transformada de Fourier Discreta
FDTD	<i>Finite-difference time domain</i> ou Diferenças finitas no domínio do tempo
MEEP	<i>MIT(Massachusetts Institute of Technology) Electromagnetic Equation Propagation</i>
MEF	Método dos elementos finitos
PML	<i>Perfectly matched layers</i> ou Camadas perfeitamente casadas
TMM	<i>Transfer Matrix Method</i> ou método de transferência de matriz

1 INTRODUÇÃO

Pode-se dizer que energia é a causa de todos fenômenos que somos capazes de estudar e aplicar. A energia pode ser transferida entre corpos permitindo realizar trabalho sendo convertida em forma, mas nunca criada ou destruída, conforme enunciado pelas leis da termodinâmica. A capacidade de transformar energia de forma eficaz e utilizá-la para facilitar a atividade humana influencia diretamente o desenvolvimento econômico e a qualidade de vida em nossa sociedade. Por esse motivo, desde o princípio da era moderna há uma busca incessante por fontes de energia capazes de suprir nossas necessidades e garantir o desenvolvimento. As principais fontes energéticas permanecem sendo os recursos fósseis, hidroelétricas e até mesmo a relativamente recente energia nuclear. O crescimento populacional assim como a conscientização do impacto ambiental causado pelas fontes clássicas de energia e a crescente preocupação com o aquecimento global tem levado a exploração de fontes renováveis de energia como as de origem eólica, solar, maremotriz, etc. (BATES; HILL, 2005; KREWITT et al., 2012).

Ao favor da produção renovável de energia estão os progressos tecnológicos que reduzem os custos dessas fontes de energia, crescimento da produção de equipamentos para conversão de energias renováveis e políticas governamentais que promovem a produção de energia por fontes renováveis assim como incentivos a sua utilização (ARENT; WISE; GELMAN, 2011; EMODI; EBELE, 2016). Fontes de energias renováveis como a do vento, sol e hídrica para produção de eletricidade vêm sendo exploradas por diversos pesquisadores como uma maneira de reduzir as emissões dos gases que causam efeito estufa e portanto lutar contra o aquecimento global (ARENT; WISE; GELMAN, 2011). Em particular, a energia solar vem sendo utilizada por seres humanos de diferentes formas desde o passado distante, porém, a urgência por desenvolvimento sustentável levou a sociedade a reavaliar essa fonte com maior importância e real interesse (BOYLE, 1994). A geração de energia fotovoltaica a partir da luz solar é atualmente viável, apresenta boa durabilidade, não envolve partes móveis e os custos de operação e manutenção são baixos, porém não é competitiva o bastante para substituir as fontes não-renováveis comercialmente (CHU, 2011).

Um sistema solar fotovoltaico converte diretamente a energia solar em eletricidade através de um dispositivo semicondutor que captura a energia do fóton solar e em seguida gera um par elétron-buraco responsável pela geração de eletricidade em corrente contínua (PINHO; GALDINO, 2014). Esse processo, porém, não é linear e diversos fatores afetam o processo de conversão total de uma célula solar incluindo sua eficiência de reflectância, eficiência termodinâmica, eficiência da separação dos portadores de carga, e valores de eficiência de condução. Esses efeitos somam-se no chamado fator de eficiência quântica que se refere à porcentagem de fótons que são convertidos em corrente elétrica (THÉRIAULT, 2015; PETTERSSON; ROMAN; INGANAS, 1999).

A eficiência de uma célula solar comercial de junção única está atualmente próxima de 20%, ainda longe do limite teórico de Shockley-Queisser de $\sim 34\%$ (SHOCKLEY; QUEISSER,

1961; MEILLAUD et al., 2006) e somente poucas células laboratoriais são capazes de alcançar eficiências em torno de 25% (GREEN et al., 2015), uma eficiência que viabiliza a exploração da energia solar em relação às fontes não renováveis de energia (CHU, 2011; ZHOU et al., 2014; YABLONOVITCH; MILLER; KURTZ, 2012).

No geral, tanto a absorção de luz em um semicondutor e a coleção de portadores de carga fotogerados nos eletrodos precisa ser otimizada para que as células solares atinjam maiores eficiências de fotoconversão. Portanto, o gerenciamento da luz é fundamental para melhorar a performance em células solares (YABLONOVITCH; MILLER; KURTZ, 2012; ZEMAN et al., 2013).

O gerenciamento da luz tem por objetivo maximizar a absorção da energia proveniente da radiação solar nas camadas absorventes. Esse gerenciamento pode ser realizado com diversas técnicas que focam principalmente nas seguintes áreas: (i) exploração eficaz do espectro solar pelo emprego de multijunções (SÖDERSTRÖM et al., 2012) e separadores de espectro (SAKAKI et al., 1981; KIM et al., 2013); (ii) minimização da absorção fora das camadas de absorção através da implementação de camadas adjacentes dopadas e óxidos condutivos transparentes (TCOs) com baixa absorção parasítica (FAÿ et al., 2010); (iii) acoplamento da luz dentro das camadas absorventes. Em particular a técnica de confinar a luz nas camadas de absorção vem se tornando uma medida popular de gerenciamento da luz. As seguintes técnicas vêm sendo usadas para acoplar a luz nas camadas responsáveis pela fotoconversão:

- acoplamento da luz incidente no lado frontal (KRC; SMOLE; TOPIC, 2006; FUJIBAYASHI; MATSUI; KONDO, 2006);
- reflexão na parte posterior da camada absorvente (YUE et al., 2009; ISABELLA et al., 2012);
- refletores intermediários em células solares multi-junção (CUONY et al., 2012);
- espalhamento da luz em interfaces rugosas (HONGSINGTHONG et al., 2010; AL., 2012);
- espalhamento da luz usando nanopartículas metálicas (através de efeitos plasmônicos) (CATCH-POLE; POLMAN, 2008).

Duas áreas no desenvolvimento de técnicas de acoplamento da luz podem ser distinguidas. A primeira área manipula a reflectância do dispositivo para produzir interferência destrutiva das frentes de ondas refletidas pela interface. É o caso, por exemplo, das camadas anti-reflexivas, sobreposição de camadas para combinação de índices, refletores intermediários e retro-refletores. Esse procedimento reduz a reflectância total na interface ar/dispositivo aumentando a quantidade de luz que entra inicialmente dentro das camadas absorventes do dispositivo. A segunda área está voltada para o espalhamento da luz. Esse fenômeno é alcançado através da implementação de interfaces nano-texturizadas, pois o espalhamento depende da morfologia dessas interfaces, geralmente introduzidas na célula solar através de portadores texturizados do substrato ou tratamento químico da superfície (ZEMAN et al., 2013).

A absorção teórica das células solares com superfícies nano-texturizadas foi calculada estatisticamente em Yablonovitch e Cody (1982). Ele mostrou que a absorção em uma superfície nano-texturizada em condições ideais (sob radiação de corpo negro e confinada com um refletor branco em um lado) aumenta por um fator de $4n^2$, onde n é o índice de refração do material absorvente.

Ainda que o uso de texturas com morfologias randômicas é atualmente a forma padrão de alcançar espalhamento eficiente dentro de uma célula solar (HONGSINGTHONG et al., 2010; AL., 2012), o espalhamento da luz por texturas periódicas como de grades de difração é uma forma alternativa de manipular a luz dentro de uma célula solar (KRC et al., 2006; YAN et al., 2011).

O limite fundamental do confinamento da luz em estruturas com padrões periódicos na superfície tem sido investigado analiticamente e por simulações numéricas. Foi mostrado por Yu (2010) que a melhora de performance no confinamento da luz quando estruturas periódicas são utilizadas pode exceder o fator convencional de $4n^2$ (YABLONOVITCH; CODY, 1982). Além disso, foi demonstrado (i) que texturas 2-D levam a maior absorção do que texturas 1-D e (ii) como a simetria da textura afeta o aumento do limite de absorção (YU; RAMAN; FAN, 2010).

Para computar o efeito da geometria na eficiência da célula solar a simulação é uma ferramenta essencial pois permite testar diferentes geometrias com facilidade. É necessário usar um código de eletromagnetismo computacional descrevendo o problema físico de forma coerente e precisa como por exemplo os métodos de diferença finita no domínio do tempo (FDTD) (YEE et al., 1966) ou o método de elementos finitos (MEF) (JIN, 2014). Recentemente, vários métodos otimizados para resolver numericamente as equações de Maxwell (YEE et al., 1966; WEILAND, 1977; MOHARAM; GAYLORD, 1981; JIN, 2014) foram aplicados para realizar simulações ópticas de células solares com texturas periódicas.

As simulações de eletromagnetismo computacional são capazes de determinar a propagação, reflexão e absorção das ondas eletromagnéticas e, para o caso de uma célula solar, a partir da perda de energia ocorrendo no interior da célula solar é possível calcular a fotocorrente total gerada, uma medida de energia produzida que serve de critério de comparação. O detalhamento do funcionamento de uma célula solar como as variáveis que definem sua eficiência de fotoconversão serão apresentados no capítulo 3.

A proposta de inovação sugerida nessa dissertação é aplicar o método Design Construtal, baseado na Teoria Construtal proposta por Adrian Bejan, como base teórica para investigar o efeito da geometria da textura na absorção da luz em uma célula solar. Não há registros até o momento da aplicação do Design Construtal à questão da geometria de células solares, porém a Lei Construtal propõe que para um sistema finito existe uma direção temporal para evolução do design de forma determinística. Como a proposição de design determinístico está fundamentada no fenômeno natural de otimizar a distribuição de imperfeições através do tempo, é sugerida a aplicabilidade da Teoria Construtal à questão de otimização geométrica de células solares tratando enxertos que formam a textura como imperfeições a serem otimamente distribuídas.

1.1 Objetivo

O objetivo desse trabalho é determinar geometrias ótimas para texturas em células solares de silício aliando o método Design Construtal com simulação computacional da absorção óptica através do método de diferenças finitas no domínio do tempo (FDTD). Serão analisados, usando o aporte teórico da Teoria Construtal, os efeitos na performance da célula tanto pelos parâmetros geométricos das texturas isoladamente quanto o efeito de construir a textura de forma determinística a partir de blocos elementares usando o método Design Construtal.

2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

O capítulo de revisão bibliográfica está dividido em uma primeira seção abordando o método Design Construtal e como ele vem sendo aplicado nos mais diversos problemas de otimização geométrica. Na segunda seção é apresentado o estado da arte sobre o efeito de diferentes geometrias de texturas no aumento de absorção de células solares. A subdivisão da revisão nesses duas subseções visa fornecer um panorama geral da técnica e da área de enfoque dessa dissertação para então apresentar os modelos matemáticos e numéricos escolhidos para realizar a otimização geométrica da textura de uma célula solar.

2.1 Método Design Construtal

A Teoria Construtal explica deterministicamente as formas que surgem na natureza baseando-se na ideia de que a forma e estrutura vem de um princípio de maximização do acesso do fluxo, no tempo, em um sistema finito com liberdade para se modificar (REIS, 2006; BEJAN; LORENTE, 2008). A visão construtal proclama uma tendência no tempo para a geração de sistemas animados e inanimados: “a maximização do acesso das correntes que fluem através de um sistema de fluxo em transformação” (BEJAN, 1997).

Adicionalmente a teoria também sugere a persistência da evolução da configuração para prover melhor acesso ao fluxo juntamente como uma direção no tempo para essa evolução ocorrer de forma determinística. Portanto a Teoria Construtal substitui a crença de que a forma na natureza é um evento aleatório e permite o projeto e a análise de sistemas sob restrições numa busca por melhor performance (BEJAN, 2000).

A Teoria construtal é portanto mais geral que o princípio de máxima produção da entropia pois não se trata de uma afirmação de otimização como mínimo e máximo, design final ou destino. A ideia Construtal é que nenhum sistema de fluxo está destinado a terminar em uma certa configuração com a passagem do tempo pois o design natural está em constante mutação (BEJAN; LORENTE, 2004, 2010). O atendimento de múltiplos objetivos impede que os sistemas naturais tenham geometrias ótimas de acordo com um objetivo específico, dessa forma só existe ótimo global em um sistema sob restrições locais para uma determinada função objetivo a ser maximizada ou minimizada.

Por ser uma teoria geral, pode ser aplicada em todos os domínios onde existe algum tipo de evolução levando a sua aplicação em diversas áreas de pesquisa para inferir de forma determinística o Design (CHEN, 2012). Pode-se citar as áreas de transferência de calor (BEJAN, 1997; LEDEZMA; BEJAN; ERRERA, 1997; KUDDUSI; DENTON, 2007; KACIMOV, 2007; CHEN; WEI; SUN, 2011), mecânica (BEJAN; ERRERA, 1997; LUO et al., 2007; JOUCAVIEL; GOSSELIN; BELLO-CHENDE, 2008; BEJAN, 2002; MUZYCHKA, 2005; BEJAN, 2004), eletricidade (MOREGA; BEJAN, 2005; CHEN; ZHOU; SUN, 2010; BHAKTA; BANDYOPADHYAY, 2005; VARGAS; BEJAN, 2004; CHEN et al., 2006), sócio-economia (BEJAN; BADESCU; DE VOS, 2000; MIGUEL, 2008; BEJAN; MERKX, 2007) química e outras disci-

plinas de engenharia. A teoria também se aplica aos organismos vivos da natureza e seus tecidos e órgãos (REIS, 2006; WANG; DAI; BEJAN, 2007; KIM; LORENTE; BEJAN, 2007), e até mesmo a sistemas não-vivos como para geomorfologia dos rios, clima, circulação de correntes oceânicas, dinâmica social e muitas outras áreas (REIS, 2006; REIS; BEJAN, 2006), sempre com sucessos e descobertas promissoras onde foi aplicada. Nessa seção serão detalhados dois trabalhos que servem de referência para o desenvolvimento do algoritmo Construtal aplicado nesse projeto. O primeiro será um problema de escoamento externo em arranjos tubulares com troca de calor (PEDROTTI, 2015) e o segundo um problema de otimização de caminho de condução em uma cavidade (VIANNA, 2016), cujas metodologias se assemelham, respectivamente, aos métodos de *otimização geométrica com restrição e construtal* que serão descritos na seção 5.5.

2.1.1 Avaliação geométrica de arranjos tubulares submetido a escoamento externo utilizando Design Construtal

No trabalho de Pedrotti (2015) o problema consistiu em determinar o posicionamento ótimo de um arranjo de cilindros submetido a uma corrente fluida visando aumentar a troca térmica entre os cilindros e o fluido, considerando o diâmetro dos cilindros $D = 0.1$ m. A análise foi bidimensional e os cilindros eram posicionados entre duas placas planas dentro de uma região de ocupação, como mostra em escala a Figura 2.1 onde a área quadrada clara da figura representa a região de ocupação dos cilindros. Esta área é mantida constante.

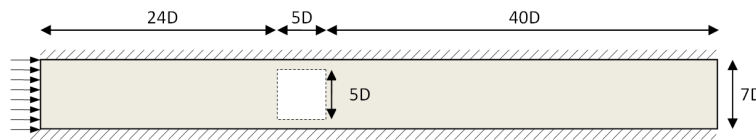


Figura 2.1 Representação da área do problema. Fonte: PEDROTTI (2015)

Trata-se de um escoamento forçado, bidimensional, laminar, permanente e incompressível. Quatro restrições para a distância mínima entre os tubos foram avaliadas: $p = 1D$, $p = 1.25D$, $p = 1.5D$ e $p = 2D$. Foram realizados estudos em matrizes com até 16 cilindros, sendo avaliada a troca térmica para diferentes valores do número de Reynolds para o escoamento: $Re_D = 10$, $Re_D = 50$ e $Re_D = 100$, e Número de Prandtl $Pr = 0.71$. Os resultados obtidos mostram que a restrição de distância e o número de Reynolds possuem influência sobre a formação dos arranjos.

O *Constructal Design* será usado para gerar a posição dos cilindros de maneira determinística, sendo feito o estudo de um cilindro por vez até atingir o número de tubos idealizado para a construção da matriz dentro das condições de evolução determinadas. Este estudo de formas geométricas em um contexto determinístico diferencia-se dos apresentados na literatura, onde os arranjos são definidos por variações de posição.

Foi definida uma função de controle para realizar a otimização geométrica determinando o valor máximo dessa função em todo domínio computacional. O ponto máximo da função de

controle é então escolhido para posicionar o próximo cilindro. A função de controle (Φ) leva em conta a velocidade e a temperatura no domínio conforme definido na equação 2.1.

$$\Phi = \frac{U}{U_{\text{inf}}} \left(\frac{T_t - T}{T_t - T_{\text{inf}}} \right) \quad (2.1)$$

sendo U a velocidade final em pontos discretos do escoamento [m/s], T_t a temperatura do tubo [K] e T a temperatura do escoamento em pontos discretos [K].

Na Figura 2.2 são mostrados os dois primeiros passos de otimização geométrica com $Re=50$. Do terceiro passo em diante a aplicação da restrição de posição passa a ser relevante nesse sistema.

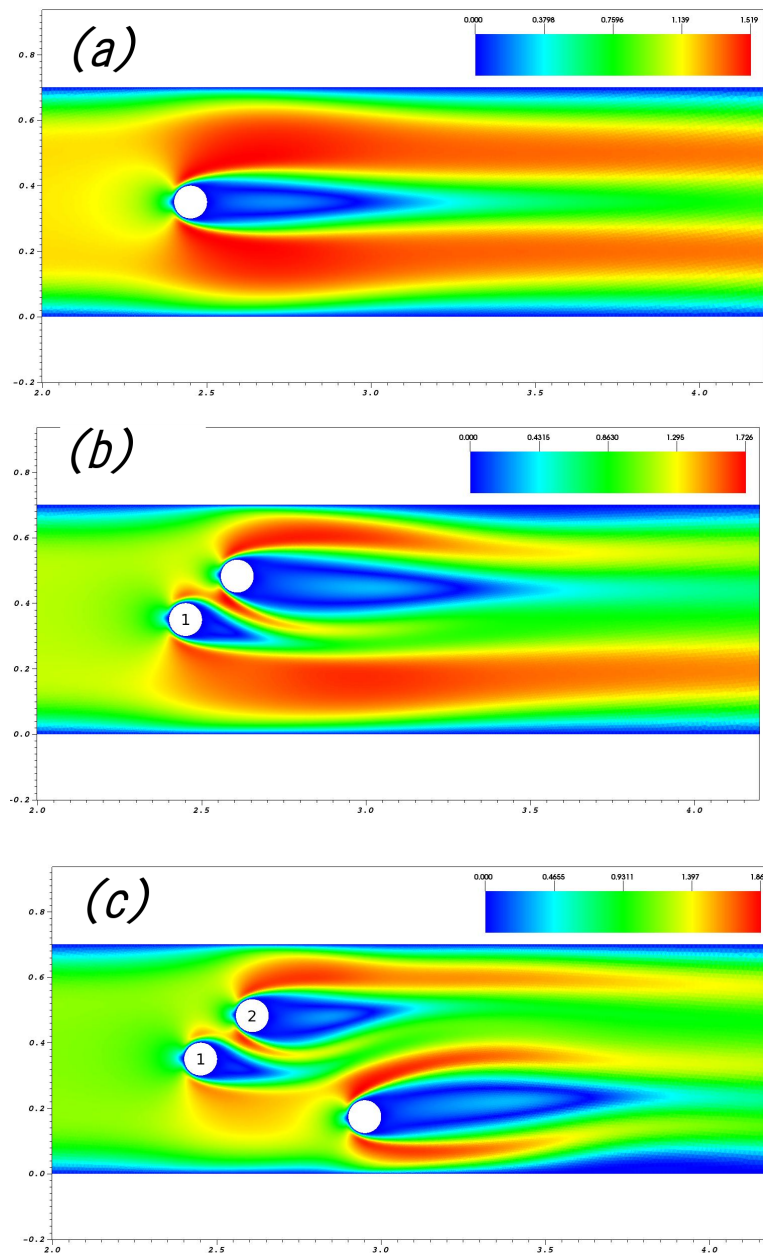


Figura 2.2 Geometria elementar (a) e otimizada com dois (b) e três (c) cilindros.
 Fonte: PEDROTTI (2015)

Já na figura 2.3 é mostrada a melhor geometria no final da otimização geométrica entre diferentes valores de restrição testados mantendo o mesmo valor de $Re=50$. Os números indicam a ordem em que cada tubo foi adicionado no escoamento. Na maioria dos casos, a restrição $1.5D$ levou à construção de arranjos mais eficientes termicamente sendo que a geometria otimizada se alterou com o valor do número de Reynolds do escoamento.

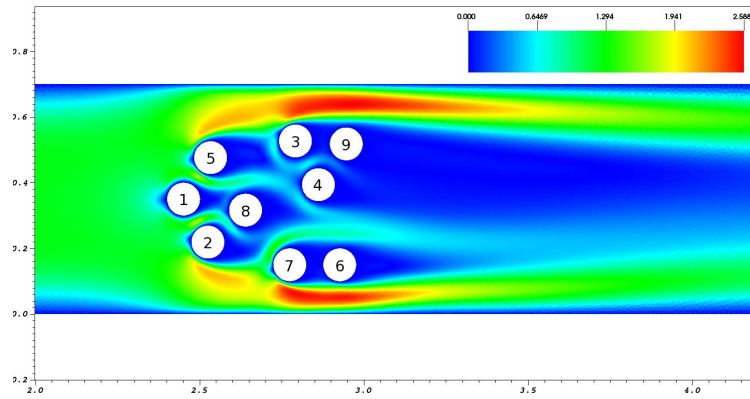


Figura 2.3 Geometria ótima de arranjo de cilindros otimizada com restrição de distância de $1.5D$. Fonte: PEDROTTI (2015)

A geração de feixes de tubos cilíndricos usando essa metodologia alcançou uma eficiência de troca térmica aproximadamente 56% maior que a matriz tubular alinhada e 71% que a matriz tubular alternada as quais são comumente estudadas na literatura e aplicadas experimentalmente.

2.1.2 Projeto de cavidades de resfriamento através da aplicação do Design Construtal

O problema tratado por Vianna (2016) foi a dissipação térmica em um corpo sólido, homogêneo, de volume finito. Este corpo se caracteriza por uma placa de grande espessura que justifica simplificação para o caso bidimensional. O objetivo foi através de um algoritmo computacional baseado na Teoria Construtal construir uma cavidade livre para moldar-se ou ramificar-se em quaisquer direções de modo a minimizar a temperatura nos pontos de máxima temperatura dentro de um domínio bidimensional previamente delimitado. Neste sentido, em cada etapa do processo de montagem da cavidade foi resolvida, numericamente, via método de elementos finitos, a equação diferencial da difusão térmica com geração interna de calor. Na figura 2.4 são mostradas as condições de contorno para essa cavidade.

O volume da placa é fixo. Como a análise é bidimensional, a restrição do volume repercute na área da placa (A_p), definida na equação 2.2. A outra restrição está no volume, ou área, da cavidade. A razão entre área da cavidade (A_c) e área da placa (A_p) define a variável Φ dada na equação 2.3.

$$A_p = H \times L \quad (2.2)$$

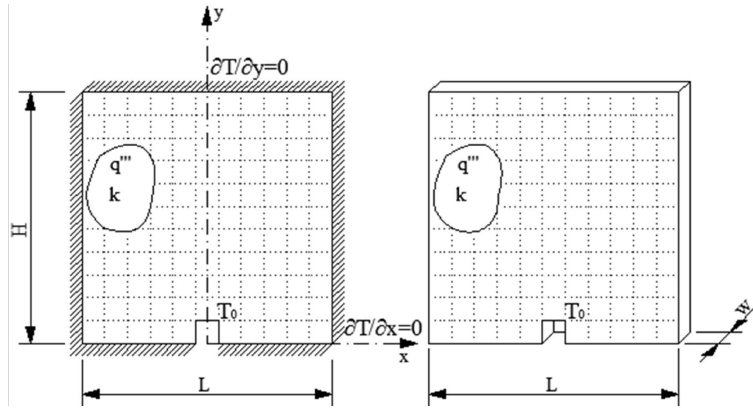


Figura 2.4 Modelo da cavidade 2D e 3D mostrando as condições de contorno e cotas. Fonte: VIANNA (2016)

$$\Phi = \frac{A_c}{A_p} \quad (2.3)$$

É importante salientar que a taxa de geração de calor interna é proporcional a redução da área total da placa pela formação da cavidade definida por Φ .

A rotina principal do algoritmo construtal teve por função criar uma matriz estruturada a qual, por sua vez, é responsável por gerar uma malha de elementos quadrados, de lados D , que fica disposta sobre todo o domínio (A) conforme a figura 2.5. A partir da definição do tamanho

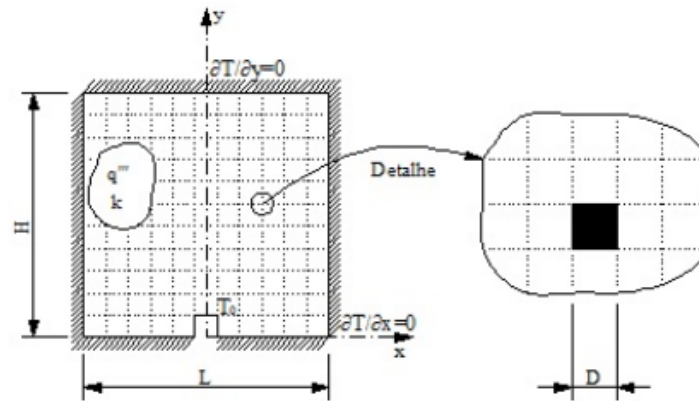


Figura 2.5 Malha matriz estruturada e elemento fundamental hachurado de lado “D”. Fonte: VIANNA (2016)

do elemento fundamental fica determinada a resolução da cavidade (RC) que será maior quanto menor o tamanho do elemento. Um aumento da resolução da cavidade implica que maior é a quantidade de elementos da malha matriz e maior será a liberdade de expansão da cavidade durante sua construção e, potencialmente, mais complexa poderá tornar-se a cavidade.

A ideia é então montar a cavidade a partir do crescimento de pequenos quadrados de tamanho fixo que são posicionados na direção de maior temperatura do sistema até o critério de restrição da área ser alcançado. Dessa forma, dois parâmetros devem ser informados toda vez que o modelo computacional é acionado: a resolução da cavidade (RC) e o limite da área da cavidade, relacionado a Φ . Algumas etapas desse processo de otimização são ilustrados na

figura 2.6:

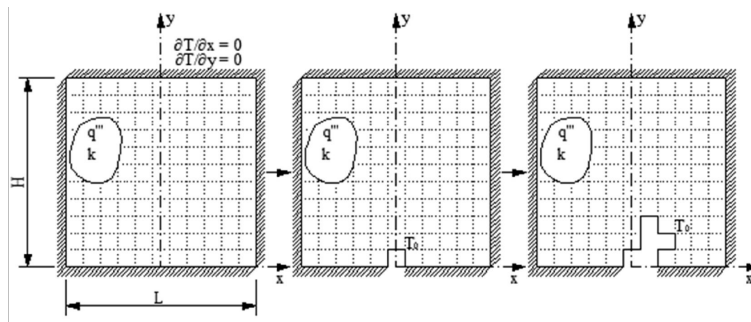


Figura 2.6 Corpo sólido: (a) início, sem cavidade elementar; (b) primeira cavidade criada; (c) próximas cavidades criadas. Fonte: VIANNA (2016)

Como esperado, o algoritmo foi capaz de construir, evolutivamente e de forma determinística, uma cavidade de resfriamento. A cavidade da primeira simulação, utilizando $RC = 11$ e $\Phi = 0.2$, evoluiu em direção às regiões mais quentes do domínio do sólido de tal forma que, a cada passo de sua construção, no caso constituída de trinta etapas, os valores das temperaturas máximas tenderam a reduzir. Também se observou que a cavidade naturalmente assumiu configurações mais complexas, semelhantes as tratadas pela literatura, conforme a construção avançava. A primeira configuração encontrada foi do tipo I a qual se modificou, posteriormente, para as formas em T e Y, respectivamente. Os resultados para essa simulação estão mostrados na figura 2.7.

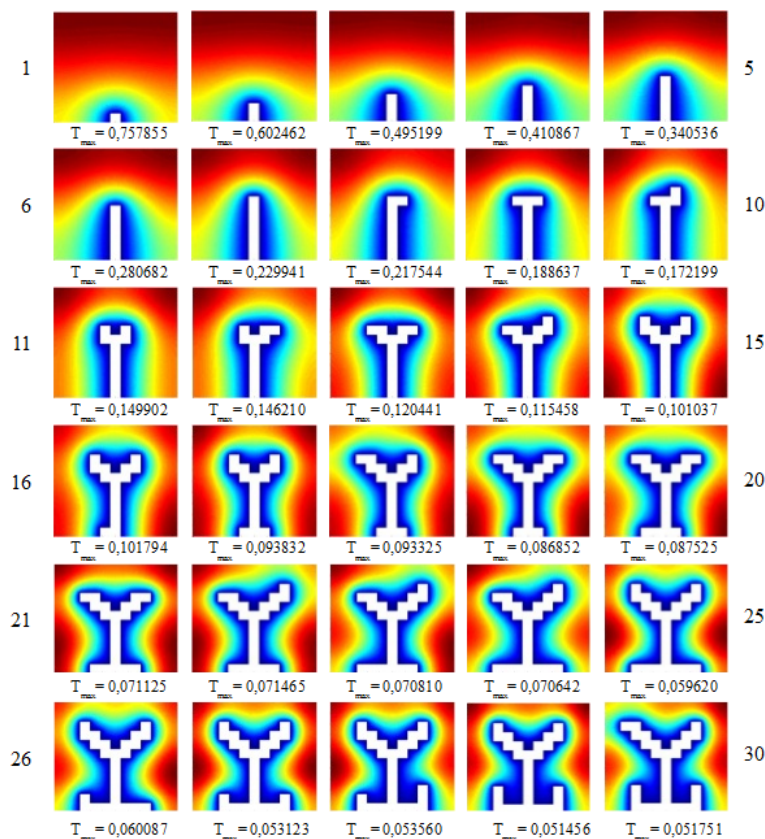


Figura 2.7 Construção da cavidade com $\Phi=0.2$ e $RC=11$. Fonte: VIANNA (2016)

O algoritmo também conseguiu se adaptar a situações onde a cavidade inicia seu processo de construção de forma assimétrica em comparação ao eixo de simetria do domínio do sólido obtendo redução das temperaturas máximas. O efeito do parâmetro da resolução da cavidade (RC) também foi estudado mantendo Φ fixo e foi constatada influência significativa sobre o processo de construção permitindo maior complexidade na geometria da cavidade acompanhada por redução das temperaturas máximas conforme a resolução aumenta. Uma descrição detalhada do algoritmo foi publicada no artigo de Vianna *et al.* (VIANNA *et al.*, 2018).

2.2 Estado da arte em células solares texturizadas

Conforme o artigo de revisão de Bergmann (1999) o melhoramento de células solares de silício, que é o material mais utilizado em módulos fotovoltaicos, está intimamente associado ao tamanho dos cristais. Bergmann (1999) indica que o comportamento padrão é uma redução da eficiência da célula solar com a redução do tamanho do grão de silício, enquanto a obtenção de silício monocristalino ou com grãos maiores implica em um aumento considerável do preço de produção. Além da granulometria ainda a presença de um *band gap* indireto no silício dificulta a absorção completa da luz numa única passagem. Esse efeito é ainda mais acentuado nas células solares de filmes finos pois a luz percorre apenas alguns micrometros de camada absorvente (BERGMANN, 1999; MÜLLER *et al.*, 2004). Essa constatação levou a uma procura por materiais mais eficazes para fotoconversão e ao desenvolvimento de células solares multi-junção para compensar as perdas do silício, além do desenvolvimento de células solares de terceira geração, que atualmente engloba as diversas tecnologias emergentes para painéis fotovoltaicos.

Apesar do uso de multi-junção e o desenvolvimento de outros materiais e tecnologias ser ainda a principal forma de aumentar a eficiência de uma célula solar, com a descoberta do fenômeno de confinamento de luz e sua aplicação em células solares, Sec.2.3, tem sido demonstrado que ainda é possível melhorar a eficiência das células solares apenas mudando seu projeto em micro- e macro-escala como nos trabalhos de RAMPLEY; LAVER; WOOD (2014) e MYERS; BERNARDI; GROSSMAN (2010).

Quando uma célula solar têm sua superfície texturizada, o caminho óptico da luz incidente aumenta. Esse aumento melhora as chances de um fóton ser absorvido e por esse motivo tem influência direta na sua eficiência de fotoconversão. O aumento do espalhamento causado pela texturização também beneficia as células solares sensibilizadas por corante conforme mostrado no trabalho de Sutthana (2016) que texturizou uma célula solar de ZnO com ácido nítrico causando um maior número de moléculas de corante a serem excitadas incrementando a taxa de geração de elétrons nos fotoeletrodos.

As técnicas para realizar a texturização de células solares foram até recentemente limitadas à obtenção de texturas rugosas aleatórias com resoluções variadas. Pode-se citar, Kluth *et al.* (1999) que produziram células solares de filme fino de ZnO:Al aspergido em substrato de vidro e posteriormente texturizado com uma solução de ácido clorídrico e finalmente recoberta com uma

camada de silício amorfo obtendo eficiências excedendo 10%. Inomata et al. (1997) ao invés de produzir as texturas rugosas com ácido utilizou feixe de íons alcançando uma textura mais homogênea em célula de silício policristalino cuja eficiência chegou a 17.1%. Enquanto, Hupkes et al. (2006) obteve um módulo de silício amorfo e microcristalino sob ZnO:Al usando técnica de *sputtering* magnético alcançando eficiências, respectivamente, de 7.5% e 9.7%. Recentemente, Wang et al. (2015) obteve uma textura piramidal com alta uniformidade usando uma solução híbrida orgânica-inorgânica alcalina para produzir a textura.

Porém, com avanço das técnicas experimentais, texturas micrométricas e nanométricas periódicas têm se tornado cada vez mais comuns (BATTAGLIA et al., 2012; MEIER et al., 2015; DEHGHANPOUR; PARVIN; ABDOLAH, 2015; ALTINOLUK et al., 2016; MA et al., 2017). A obtenção de células com texturas periódicas apesar de requerer maior sofisticação experimental tem maior eficiência de absorção provada teoricamente (YABLONOVITCH; CODY, 1982; YU; RAMAN; FAN, 2010). BATTAGLIA et al. (2012) demonstrou experimentalmente a superioridade das texturas periódicas na eficiência produzindo texturas periódicas e randômicas de silício amorfo sob um substrato texturizado de ZnO. Já Meier et al. (2015) obteve nanotexturas periódicas por um processo escalável de nano-impressão. Altinoluk et al. (2016) conseguiu obter células solares periódicas com eficiência de 15.7% usando técnicas de gravação com raio de íons em um substrato de silício. Dehghanpour et al. (2015) obtiveram células solares com textura periódica usando um laser de ArF para produzir a textura de forma prática e rápida; quando a pulsação do laser era suficientemente alta, uma estrutura quasi-periódica com forte propriedade de confinamento de luz surgia espontaneamente. De forma similar, Ma et al. (2017) conseguiu obter também uma estrutura com característica de confinamento de luz usando apenas um método de deposição química de vapor com nanocristais de silício.

A abordagem computacional do aumento de absorção pela texturização de superfície se tornou viável com os códigos computacionais que simulam a interação entre luz e matéria com cada vez mais precisão (JIN, 2014; CHEW et al., 2001; TAFLOVE; HAGNESS et al., 1995; HAGNESS; TAFLOVE, 2000). Estão se tornando comuns os trabalhos teóricos investigando diferentes superfícies sobre células solares (SAI et al., 2007; SOLNTSEV; ZEMAN, 2011; ZEMAN et al., 2013) e os próprios trabalhos experimentais estão começando a usar as ferramentas computacionais para ter uma visão mais ampla de propriedades possível apenas através da simulação (WANG et al., 2012; GREULICH et al., 2015; EISENHAUER et al., 2016).

A simulação dos efeitos das texturas na absorção tem auxiliado muito o entendimento desse fenômeno; Solntsev et al. (2011) realizaram simulações de células solares de filmes finos de silício amorfo hidrogenado (a-Si:H) com formas geométricas PIN e NIP baseadas em células experimentais e investigaram os efeitos dos parâmetros geométricos como altura, comprimento e período da textura geométrica mostrando a sensibilidade da absorção em relação a esses parâmetros obtendo algumas vezes uma fotocorrente quase 3 vezes maior que àquela sem textura. Contudo, para algumas determinadas combinações de parâmetros as texturas produziam resultados iguais ou até inferiores a do caso plano.

Texturas randômicas também podem ser investigadas através da simulação como fez Rock-

stuhl et al. (2010) mostrando os efeitos da rugosidade média, altura lateral e comprimento médio na dispersão da luz por nanotexturas randômicas relacionando a transformada de Fourier das texturas com as propriedades de espalhamento.

A simulação também permite estudar o efeito de texturas bidimensionais porém, para uma grande variedade de geometrias como é feito para o caso das texturas 1-D se torna inviável pelo custo computacional, uma vez que texturas bidimensionais exigem uma simulação em domínio tridimensional. O trabalho de Zeman et al. (2013) mostrou que para textura 2-D submicrométrica testada, não houve vantagem em relação a textura 1-D na absorção de comprimentos de ondas curtos, tendo inclusive a textura 1-D melhor performance. Já no caso de comprimentos de onda superiores a 600 nm foi observada uma notável melhora de absorção até região de aproximadamente 750 nm.

Nos últimos anos o número de pesquisas envolvendo células solares cresceu continuamente tornando-se uma das principais áreas de pesquisa em energias renováveis (PINHO; GALDINO, 2014). Dentre essas pesquisas, o fenômeno de confinamento de luz vem sendo estudado de forma consistente para aumentar a absorção em células solares. As Figs. 2.8 e 2.9 mostram o aumento do número de publicações em células solares com os anos e também o aumento percentual das pesquisas em gerenciamento de luz em relação ao todo.

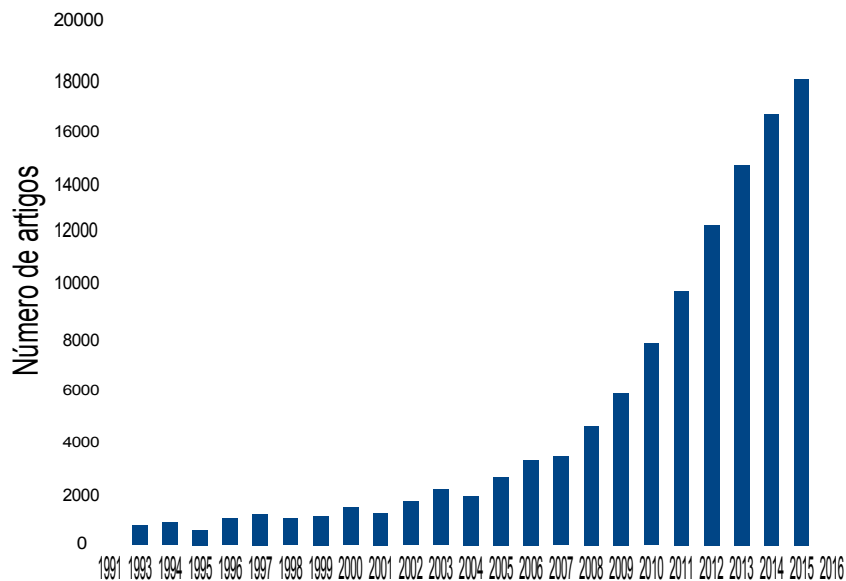


Figura 2.8 Crescimento anual de publicações em células solares. Fonte: Web of Science.

Diversas pesquisas no desenvolvimento de células mostram de forma contundente que um processo de texturização de superfície apropriado causa ganhos na eficiência de praticamente todos os tipos de células solares (GREULICH et al., 2015; MÜLLER et al., 2004; SUTTHANA et al., 2016; HU et al., 2017).

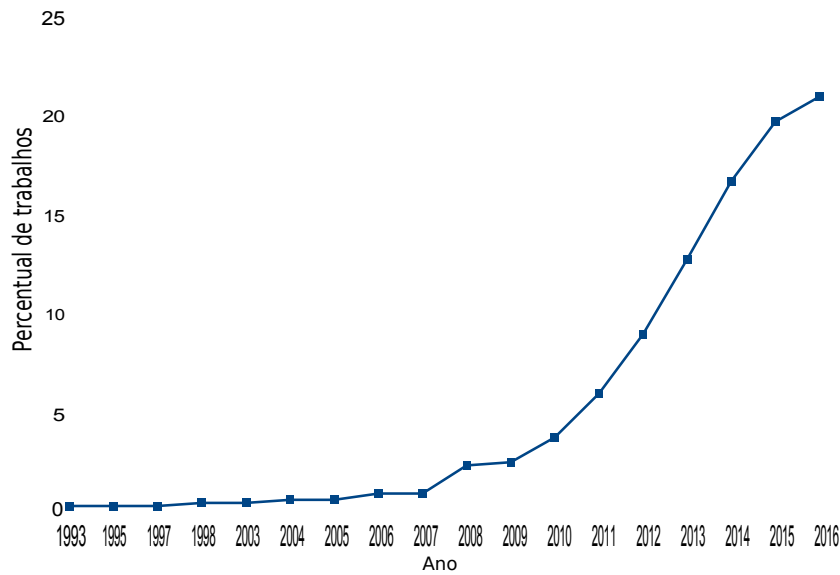


Figura 2.9 Gráfico mostrando o aumento em percentual das publicações em gerenciamento de luz para células solares. Fonte: Web of Science.

2.3 Técnicas de confinamento da luz

Nessa seção serão apresentadas as diferentes técnicas usadas na literatura para realizar o aprisionamento da luz. Essas técnicas são divididas em não-difrativas, refrativas e difrativas, sendo as duas ultimas técnicas apresentadas em maiores detalhes com a teoria pertinente pois são aplicadas para texturas de células solares que são o foco desse trabalho.

2.3.1 Técnicas não-difrativas

A ideia de todas as técnicas de aprisionamento de luz é aumentar a probabilidade de absorção do fóton pela célula solar. A forma mais direta que pode-se facilitar a captação do fóton é aumentando a razão entre volume e área de superfície. Um exemplo famoso na literatura são as células em nanofios de silício mostradas na Figura 2.10. Utilizando esse tipo de superfície é possível chegar a eficiências de 17% (SHEN et al., 2013; LIN et al., 2013).

Apesar de resultados promissores no uso dessas texturas, muitos desafios de pesquisa ainda devem ser transpostos para aplicação em produtos comerciais. Principalmente quanto a estabilidade da formação da junção e passivação da superfície, questões práticas como aumentar a escala de produção e a integração dos nanofios em módulos requer também aperfeiçoamento (SCHUSTER, 2017).

Outro método que se popularizou para aumentar a absorção de fótons faz uso da ressonância plasmônica de nanopartículas metálicas (ATWATER; POLMAN, 2010). Quando a nanopartícula metálica tem tamanho da ordem do comprimento de onda da luz incidente ela fica altamente polarizada e promove o espalhamento da luz e a geração de elétrons livres. Quando

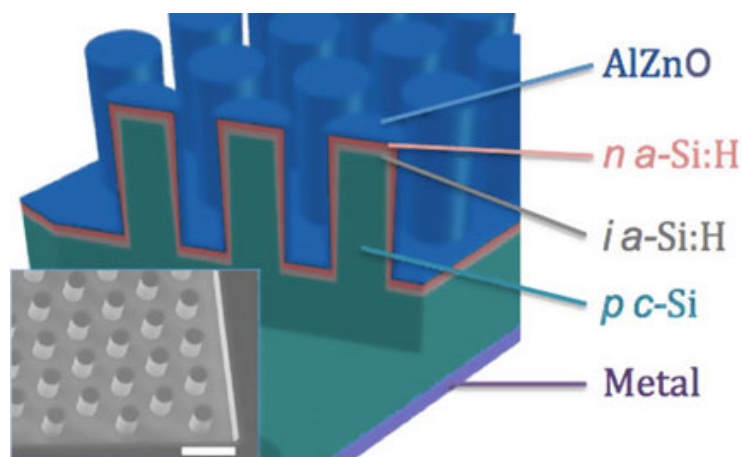


Figura 2.10 Esquema de uma célula solar heterojunção usando nanofios para aumentar a área de superfície. Fonte: GHARGHI et al. (2012).

essas partículas são colocadas sobre a superfície de uma célula solar a luz incidente é espalhada para o interior da célula e também dificulta a subsequente reflexão para o meio aprisionando a luz. A combinação do efeito plasmônico-ótico, levando ao aprisionamento, assim como o efeito plasmônico-elétrico que gera elétrons livres passíveis de serem captados, torna essa tecnologia muito promissora. Porém, a alta sensibilidade da eficiência de conversão com os parâmetros do material e também devido às perdas dissipativas essa tecnologia apresenta alguns obstáculos em sua implementação e sua capacidade de conversão absoluta permanece em torno de 10% (MORAWIEC et al., 2014; PARK et al., 2013; ATWATER; POLMAN, 2010; FERRY et al., 2010).

Resultados mais promissores e de mais fácil implementação do que aqueles obtidos com nanopartículas metálicas, foram obtidos usando ressonadores de Mie. De forma simplificada, o ressonador de Mie são partículas de material dielétrico que devido a ocorrência de múltiplas reflexões internas ocasionam uma interferência construtiva do raio de luz incidente dependente do tamanho e forma da partícula. Quando essas partículas são distribuídas sobre a superfície de uma célula solar promovem o espalhamento e subsequente aprisionamento da luz no interior da célula. Para tanto, é necessário que o coeficiente de absorção do ressonador seja pequeno e a diferença de seu índice de refração para o do meio seja máxima (BOHREN; HUFFMAN, 2008).

Spinelli et al. (2012) usaram partículas de Mie para atingir refletividades muito baixas (< 3%) em um célula solar de filme fino de silício em todo espectro de 450-900 nm texturizando a célula solar com uma camada de nanofios revestidos com Si_3N_4 . A literatura também mostra que é possível adicionar ressonadores de Mie sobre uma célula solar já finalizada para aprimorar sua performance de conversão conforme mostrado por Grandidier et al. (2011).

Uma forma bem direta de confinar a luz num dispositivo fotovoltaico são os clássicos filmes anti-reflexivos. Esses filmes são finas camadas de material dielétrico transparente que fornece um meio de refração intermediário entre o ar e a célula solar. O princípio de funcionamento se baseia em minimizar a reflexão conforme ela é expressa pela lei de Fresnel, mostrada na

equação 2.4. Uma vez que a reflexão depende fortemente do contraste entre índices de refração dos meios de propagação, com índices n_1 e n_2 , se for construída uma camada intermediária de índice $n_{12} = \sqrt{n_1 \cdot n_2}$ e com uma espessura de um quarto do comprimento de onda no meio ($\frac{\lambda}{4 \cdot n_{12}}$). A onda incidente e a refletida se cancelarão por interferência destrutiva mantendo a luz confinada no meio dielétrico.

$$R = \left(\frac{n_1 - n_2}{n_1 + n_2} \right)^2 \quad (2.4)$$

Materiais comumente usados para esse fim são SiO_x , Si_3N_4 , e alguns óxidos condutivos como SnO_2 , ZnO ou óxido de índio dopado com estanho (ITO). Como idealmente o melhor efeito antirreflexivo é obtido variando continuamente o índice de refração do ar para o do semicondutor, é muito comum o uso de filmes antirreflexivos multicamadas. Como por exemplo o filme de $\text{ZnS}/\text{MgF}_2/\text{SiO}_2$ produzido por Zheng et al. (1996) que apresentou uma redução da refletância do silício para apenas 2% na faixa de comprimentos de onda de 440 a 960 nm. No entanto, a fabricação de filmes como esse são muito caras para uso comercial, além de seu efeito antirreflexivo serem muito sensível quanto ao comprimento dos filmes e sua eficácia pode mudar drasticamente ao considerar a incidência oblíqua da luz no filme.

2.3.2 Técnicas refrativas

A ideia básica por trás das técnicas refrativas é reproduzir um meio de índice de refração variável entre o ar e o semicondutor aplicando uma textura na superfície. Existem exemplos desse fenômeno na natureza como é o caso do olho da mariposa que é totalmente coberto por estruturas em formato de cone com dimensões inferiores ao do comprimento de onda da luz, o que permite às mariposas evadir dos predadores e maximizar a luz captada na sua visão.

Para comprimentos de onda com dimensões micrométricas a luz será refletida múltiplas vezes nas formações da textura antes de ser emitida para o ar em torno da célula reduzindo a reflexão externa da luz. Já para comprimentos de onda maiores que os detalhes da textura, o efeito para a luz é similar a quebra da textura em múltiplas camadas que fazem a transição do índice de refração da região do ar para a do semicondutor. Esses fenômenos são ilustrados na Figura 2.11.

A refração em texturas de superfície é portanto uma escolha natural para melhorar as propriedades de uma célula solar, porque causa o redirecionamento da luz aumentando o caminho óptico dentro da célula solar sem perdas adicionais. E concomitantemente, quando os enxertos da texturas são menores que o comprimento de onda da luz, existe um efeito combinado de confinamento da luz sobre uma larga faixa espectral e de ângulo de incidência, fenômeno que não ocorre quando são usados somente filmes finos de material anti-reflexivo. Essa vantagem já é explorada comercialmente. A superfície da maior parte dos módulos de silício cristalino são revestidos com camadas antirreflexivas texturizadas para aumentar a absorção. O princípio de combinar esses efeitos de texturas em escalas diferentes foi aprimorado na literatura, conforme mostrado na Figura 2.12. Han et al. (HAN; PAUL; CHANG, 2012), por exemplo, encontrou uma forma econômica para suprimir a reflexão da superfície em módulo de silício polido de 30%

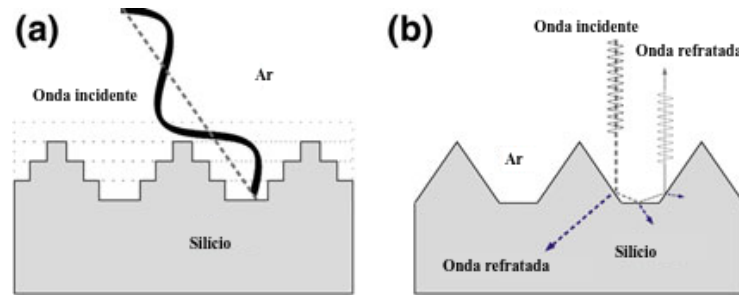


Figura 2.11 (a) quando o comprimento de onda é bem maior que os detalhes da textura ($\lambda > \Lambda$) ela é percebida como múltiplas camadas fazendo um meio de transição para o índice de refração dos dois meios. (b) quando o comprimento de onda é bem menor que os detalhes da textura ($\lambda < \Lambda$), a textura funciona como um meio para múltiplas reflexões. Fonte: (SCHUSTER, 2017).

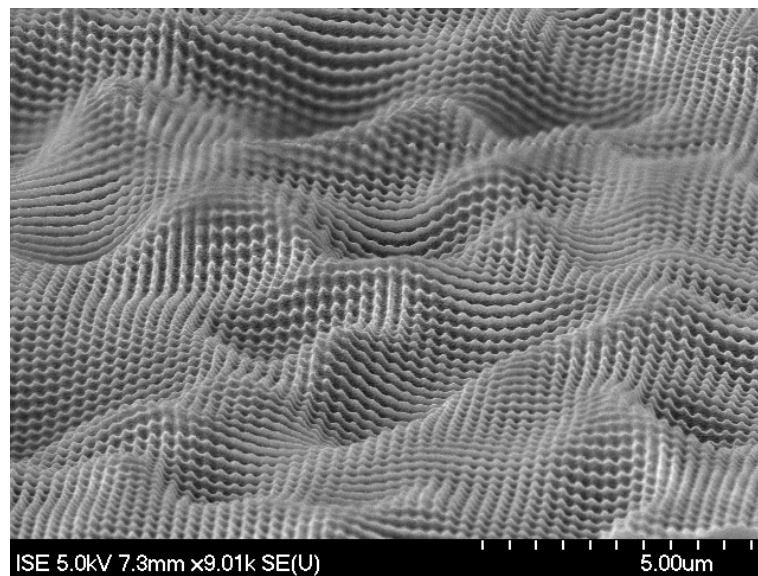


Figura 2.12 Combinação dos efeitos de antirreflexão nanoestrutura periódica e microestrutura aperiódica. Fonte: B. (2017).

para apenas 3% na faixa de 400-900 nm de comprimento de onda.

2.3.3 Técnicas difrativas

A luz é redirecionada quando encontra uma barreira (reflexão) ou vai de um meio para outro (refração), porém, a luz também pode mudar sua direção de propagação quando passa por um obstáculo ou abertura em seu trajeto. A luz incidente nesse caso se divide em diferentes direções no fenômeno denominado difração. Consequentemente, a luz pode ser difratada se as dimensões do obstáculo ou abertura (Λ) são da ordem do seu comprimento de onda (λ). Esse fenômeno é ilustrado na Figura 2.13. Um exemplo de difração ocorre quando ondas de rádio são capazes de ultrapassar uma montanha por ser um obstáculo de mesma ordem que a onda, porém o mesmo não ocorre com o sinal de celular (menor comprimento de onda). Isto também acontece com o sonar de certos animais que pelo comprimento de onda bem menor que a presa é refletido revelando a posição da mesma, enquanto seres da ordem do comprimento de onda

ou menores não podem ser detectados.

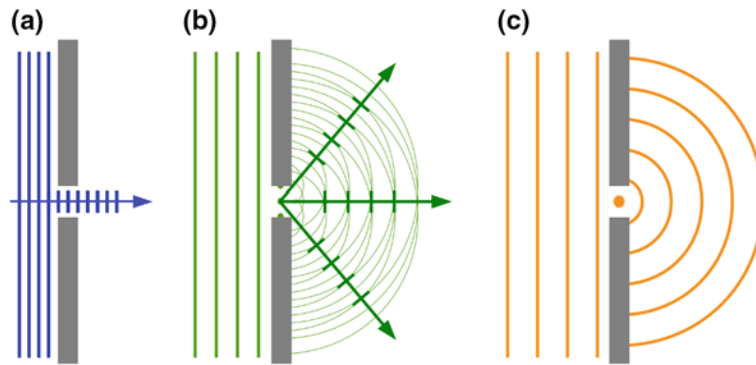


Figura 2.13 Ilustração da propagação de uma frente de onda para obstáculo maior que o comprimento de onda (a), da ordem do comprimento de onda (b) e menor que o comprimento de onda (c). Fonte: SCHUSTER (2017).

Consequentemente, a luz pode ser difratada em uma textura de superfície, se suas elevações (Λ) são da ordem do seu comprimento de onda. Esse fenômeno ocorre visivelmente em discos de armazenamento de dados onde a presença de um meio difrativo de ordem nanométrica (padrões que armazenam os dados) difrata a luz branca em uma matriz de diferentes comprimentos de onda conforme ilustrado na Figura 2.14.

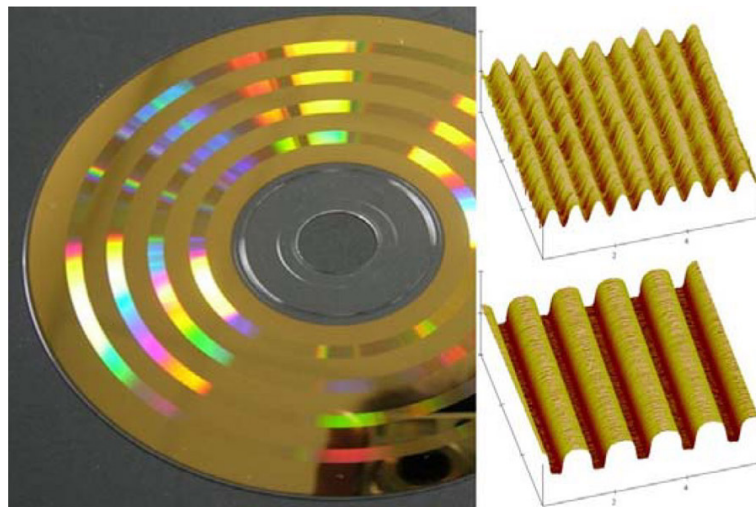


Figura 2.14 Parte microestruturada de um disco de armazenamento de dados causando difração da luz. Fonte: CHIU et al. (2011).

Idealmente, uma estrutura difrativa na superfície da célula solar de silício defletiria os comprimentos de ondas maiores no plano do material absorvente, porque esses comprimentos requerem maior espessura do material absorvente. Como geralmente a textura faz a transição para um material de baixo índice de refração como ar, a luz difratada também deve ser totalmente refletida internamente impedindo a luz de escapar a camada absorvente. Portanto, a técnica de criar texturas além de promover um meio de refração artificial intermediário entre o semiconductor e o ar que dificulta a reflexão inicial, também possibilita absorver comprimentos de ondas maiores pelo efeito de difração e aprisionamento da luz no meio absorvente.

2.4 Teoria do confinamento de luz em células solares texturizadas

Nessa seção é apresentada a teoria que explica a teoria que permite o confinamento de luz e como mensurar o fator de confinamento de uma determinada textura.

2.4.1 Equação da grade de difração

Como a difração resultada numa mudança de direção da luz incidente, o fóton deve trocar momento com a grade de difração. A energia e o momento do fóton incidente devem ser portanto conservados e, assim como ocorre no momento cristalino de um sólido, a transferência do momento da grade G é restrito a múltiplos inteiros de G , os quais são direcionados paralelamente a superfície da grade de difração.

$$k.\text{sen}(\theta_{in}) + m.G = k.\text{sen}(\theta_m) \quad \text{com } G = \frac{2\pi}{a} \quad (2.5)$$

onde a é o período espacial da grade de difração e θ_{in} e θ_m são os ângulos incidentes e o ângulo de difração da m -ésima ordem, respectivamente, como ilustrado na Figura 2.15. Os ângulos são definidos como positivos quando medidos no sentido anti-horário. Se λ representa o comprimento de onda da luz em espaço livre, $k = \frac{2\pi}{\lambda}$ é o número de onda, e n_1 e n_2 são, respectivamente, os índices de refração dos meios de propagação dependentes do comprimento de onda. Ao reorganizar a equação 2.5 explicitamente pode ser observado o caráter dispersivo da grade porque θ_m depende diretamente do comprimento de onda incidente λ :

$$n_1(\lambda).\text{sen}(\theta_{in}) + m.\frac{\lambda}{a} = n_2(\lambda).\text{sen}(\theta_m) \quad (2.6)$$

A equação da grade de difração nessa forma sugere reconciliar a difração como uma extensão da lei de refração de Snell, a qual é reproduzida para $m = 0$ na equação 2.6. Essa ideia foi discutida em detalhes por Larouche e Smith (2012), que foram capazes de estabelecer uma equivalência formal entre a refração generalizada e as grades de difração abertas. A equação também mostra que enquanto k se conserva durante a interação, a difração requer uma transferência de momento com a estrutura da grade de difração. Porém, a periodicidade da grade restringe a transferência de momento para múltiplos inteiros de m de $\frac{2\pi}{a}$ e na direção das rugosidades periódicas conforme ilustrado na Figura 2.15. Quando a ordem de difração é mais alta o resultado é uma interação mais forte com a estrutura periódica aumentando o caminho óptico percorrido pela luz e portanto a sua absorção. Uma descrição mais detalhada das correlações entre periodicidade de um sistema e o momento de uma onda serão explicados na seção de modelagem matemática.

Algumas derivações podem ser feitas em relação a equação da grade de difração (Eq. 2.5). Se for considerado uma incidência normal, $\theta_{in} = 0$ e calculada a maior ordem de difração obtém-se a equação 2.7. Isolando θ_m obtém-se a relação mostrada na equação 2.8.

$$|m| \leq \frac{a}{\lambda/n_2(\lambda)} \quad \theta_m = \frac{\pi}{2} \quad (2.7)$$

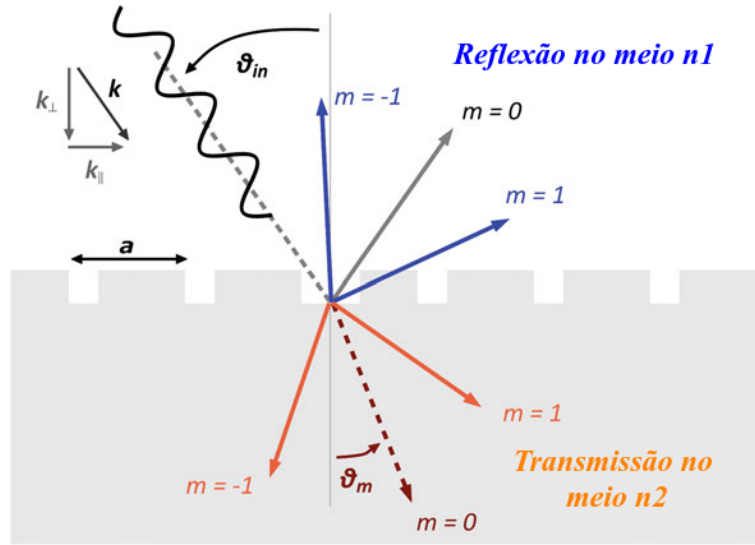


Figura 2.15 Difração de uma onda plana de comprimento de onda λ e número de onda $k = \frac{2\pi}{\lambda}$ em uma camada de interface estruturada entre meios de índice de refração n_1 e n_2 . Fonte: SCHUSTER (2017).

$$\theta_m = \arcsin \left(\frac{\lambda/n_2(\lambda)}{a/m} \right) \quad (2.8)$$

As equações 2.7-2.8 permitem tirar algumas conclusões: embora o número da ordem de difração $m(\theta)$ seja proporcional ao período da grade de difração a , o ângulo de difração $\theta_m(\lambda)$ cai com o comprimento de onda $\lambda = \lambda/n_2$ menor que a . Portanto, quanto mais ordens de difração existirem, mais luz será difratada em ângulos menores. Além disso, cada ordem contém apenas uma pequena fração da intensidade total, quando a energia é espalhada por um contínuo de ordens de difração. Por outro lado, escolher períodos iguais a alguns comprimentos de onda λ resultará em algo mais intensivo, mas somente em algumas ordens de difração. Uma vez que as ordens de difração mais baixas tendem a ser mais intensas, uma estratégia promissora para aumentar a absorção da luz é deslocar a energia das ordens mais baixas para as ordens mais altas, já que essas são mais prováveis de sofrer reflexão interna total no revestimento da célula solar. Dessa forma também não ocorrem perdas ópticas pois a energia é apenas redistribuída entre as ordens de difração.

De fato, essa estratégia se baseia principalmente na habilidade de controlar a fase das ondas interferentes. Mudando o ciclo de trabalho é um exemplo de como eliminar certas ordens de difração, por exemplo, se as cristas da grade de difração forem metade (ou um terço) do período da grade, a segunda (ou terceira) ordem será suprimida por interferência destrutiva.

2.4.2 Características de uma estrutura de confinamento de luz efetiva

A luz é refletida e refratada em uma interface não-estruturada, enquanto uma interface estruturada permite também a ocorrência de espalhamento em direções com maior angulação. O conceito de “bruma” é uma possível forma de usufruir os benefícios de uma superfície estru-

turada, porque o valor da bruma quantifica a porcentagem da luz não-refratada. A noção de bruma procura quantificar a razão entre luz difusamente refletida ou transmitida e a luz total refletida ou transmitida. A diferenciação se dá pelo desvio do feixe de luz acima de um determinado ângulo (usualmente 2.5°) (SIMONSEN et al., 2009). Quanto maior o valor da bruma mais luz é espalhada e, por consequência, mais luz irá experimentar um caminho maior na camada absorvente.

Alcançar altos valores de bruma em um grande espectro de comprimentos de onda é portanto um objetivo desejável para aumentar a absorção de uma célula, principalmente tratando-se de uma célula solar em filme fino. Porém, se o tamanho das trajetórias da luz espalhada e da luz refratada não diferem muito, um alto valor de bruma não necessariamente significa uma alta absorção. Portanto, somente a bruma não é suficiente para caracterizar uma estrutura com confinamento de luz eficiente.

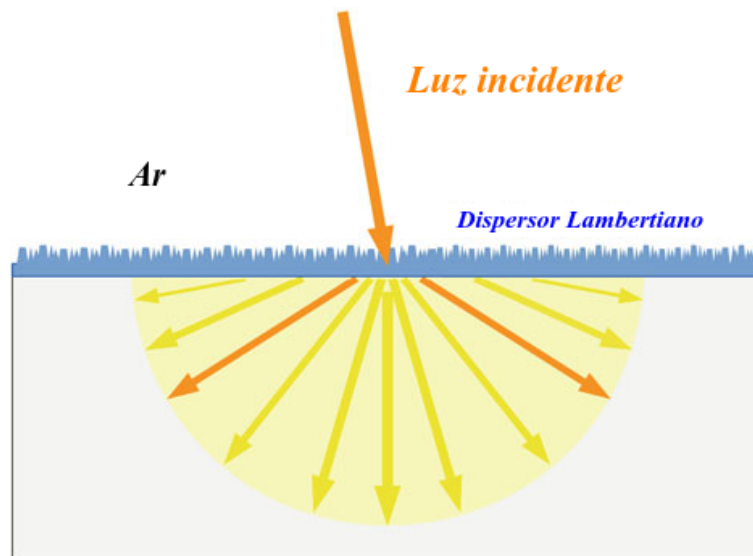


Figura 2.16 Ilustração do processo difrativo de um dispersor lambertiano ideal.
Fonte: SCHUSTER (2017).

Um parâmetro melhor é o aumento do caminho óptico. O quanto maior o ângulo de espalhamento θ , maior o caminho percorrido no absorvente. Pode-se então definir a eficiência de espalhamento em termos do aumento do caminho óptico l/d onde d representa a espessura do absorvente. A questão de alcançar um aumento máximo do caminho óptico foi estudada para placas de material pouco absorvente por Yablonovitch e Cody (1982), que assumiram uma camada com espalhamento isotrópico. Tais camadas são denominadas dispersores Lambertianos porque são capazes de espalhar a radiação de forma isotrópica de acordo com a lei do cosseno de Lambert (1760), conforme ilustrado na Figura 2.16. Na Figura 2.16 pode-se observar que um dispersor Lambertiano transmite a luz igualmente em todas direções formando uma calota hemisférica. Uma superfície com essa característica apresenta a mesma radiância vista por qualquer ângulo. Este é o efeito que se costuma procurar com as pinturas de parede. Esse fenômeno também traz vantagens na absorção de células solares principalmente se a superfície com dispersão Lambertiana for a do retrorefletor (SHENG et al., 2011; SANTBERGEN et al.,

2013), dessa forma a probabilidade da luz ficar presa na camada absorvente é ainda maior. A otimização da absorção e do caminho óptico máximo para uma célula solar foi deduzida teoricamente por diversos autores para casos diferentes. O limite teórico clássico para o aumento da absorção através do confinamento da luz é aquele de $4n^2$, deduzido a partir de um dispersor Lambertiano. Porém como toda a dedução do dispersor Lambertiano e a própria definição de caminho óptico estão firmados na óptica geométrica, esse limite pode não se aplicar a estruturas fotônicas onde efeitos de interferência violam a aproximação da luz como raios. O estudo de BOZZOLA; LISCIDINI; ANDREANI (2012) mostra como isso se aplica e como muitas vezes a desordem produz melhores resultados de confinamento de luz que uma estrutura com fotônica de alta periodicidade.

O limite de confinamento clássico de Yablonovitch foi demonstrado não ser um limite rígido por YU; RAMAN; FAN (2010) que mostrou ser somente válido quando tanto a periodicidade quanto a espessura são muito maiores que o comprimento de onda, caso contrário um aumento substancial do limite de $4n^2$ pode acontecer. Esse efeito ocorre por uma forte dependência espectral de estruturas periódicas que permite atingir aumentos de performance acima de $4n^2$ em faixas estreitas de comprimento de onda. Porém, a redução das faixas de frequência não maximiza também a absorção integrada, porque a absorção cairia em outras regiões do espectro. Outra conclusão importante de Yu et al. (2010) foi a forte dependência angular de estruturas periódicas, seja θ_{in} o ângulo limitante da incidência em relação a normal da superfície, a força de acoplamento escala de acordo com $1/\sin^2(\theta_{in})$, o que aumenta os limites para melhora do confinamento de luz para um valor de $4n^2/\sin^2(\theta_{in})$. No entanto, uma vez que a operação eficaz de uma célula solar requer uma faixa angular e espectral vasta para a luz solar, o limite de Yablonovitch de $4n^2$ permanece, na maioria dos casos, o fator limitante para células solares.

2.4.3 Medindo o fator de confinamento de luz em uma célula solar

O confinamento de luz é geralmente estimado pelo aumento da absorção da estrutura comparada a uma placa lisa do mesmo material, portanto uma figura de mérito comum é a razão entre a absorção máxima de uma placa de material texturizada em relação a uma placa não-texturizada:

$$F \equiv \frac{\int \Gamma_{max}(\lambda) d\lambda}{\int \Gamma_{ref} d\lambda}. \quad (2.9)$$

Porém o fator de melhoramento F é máximo na região de baixa absorção (ou seja, quando $\int \Gamma_{ref} d\lambda \rightarrow 0$) que corresponde a uma profundidade óptica pequena. No entanto, para confinamento de luz em aplicações fotovoltaicas o interesse é aumentar a absorção em toda a faixa de comprimentos de onda do espectro solar, isto é, desde 300 nm até o comprimento de onda máximo (λ_{max}) absorvido pelo material semiconductor. Logo, ao invés de usar o fator de melhoramento conforme definido na equação 2.9 é mais proveitoso associar o melhoramento com a corrente elétrica gerada pela célula solar. Se não houvesse queda de voltagem, a corrente de curto-circuito seria a maior corrente que pode ser obtida de uma célula solar. Portanto,

o confinamento da luz pode ser estimado em termos do aumento de J_{sc} comparado com uma referência sem textura conforme a equação 2.10. Em termos de simulação, esse J_{sc} é substituído pela fotocorrente total gerada que foi abordada na seção 4.4.

$$F* \equiv \frac{J_{max}}{J_{ref}} = \frac{\int_{300nm}^{\lambda_{max}} \Gamma_i(\lambda) \cdot \Phi(\lambda) d\lambda}{\int_{300nm}^{\lambda_{max}} \Gamma_0(\lambda) \cdot \Phi(\lambda) d\lambda} \quad (2.10)$$

onde Φ representa o fluxo de fótons do espectro de referência AM1.5G e A representa a absorção da estrutura em função do comprimento de onda.

É importante notar que usando a figura de mérito da equação 2.10 não há distinção entre as causas do melhoramento, seja ela por texturização ou mudança no material antireflexivo ou do próprio absorvente. Dependendo do estudo sendo realizado, pode ser mais conveniente usar uma figura de mérito que faça esse tipo de distinção como aquela proposto por Bozzola et al. (2012) que compara J_{max} com um J_{LL} que seria a corrente de curto-circuito obtida com o mesmo material com uma textura Lambertiana ideal. Ou ainda a proposta de Basch et al. (2012) que leva em conta também a espessura da célula solar na figura de mérito. Além dessas considerações uma figura de mérito mais recente e de ordem maior foi proposta por Schuster et al. (2014) que leva em conta também a qualidade da célula solar de referência que está sendo comparada. Para os fins de comparação desse trabalho o fator de melhoramento conforme calculado na equação 2.10 é suficiente pois não há comparações com células solares experimentais. O material do dielétrico é sempre silício e a espessura do mesmo se mantém constante durante as simulações.

2.5 Contribuição do trabalho

A contribuição dessa dissertação para o estado da arte é a inédita aplicação da Teoria Construtal para obter uma textura com ótima capacidade de confinamento de luz. Otimização de texturas com geometrias de forma fixa já existem na literatura conforme descrito na seção 2.2, porém além de um estudo extenso de geometrias fixas 1D para texturas, essa dissertação apresenta também a técnica de otimização geométrica automática direcionada por uma função de controle. A Teoria Construtal abrange ambos modos de otimização geométrica pois visa maximizar as correntes de fluxo que atravessam o sistema. Dessa maneira, a contribuição desse trabalho ocorre tanto pela aplicação da Teoria Construtal em um novo problema quanto pela demonstração de que células solares podem ser estudadas e otimizadas como um sistema de fluxo.

3 ENERGIA SOLAR E CÉLULAS SOLARES

Nesse capítulo é apresentada a tecnologia das células solares, suas perspectivas e os desafios tecnológicos encarados para ampliar sua aplicação como fonte de energia. Também serão brevemente abordados os fatores que afetam a eficiência de fotoconversão e como essa eficiência é calculada. A partir desse conhecimento pode-se falar com maior propriedade no modelo matemático e numérico onde será apresentada a forma como uma célula solar é simulada usando eletromagnetismo computacional. Também o cálculo de eficiência será base para compreender o cálculo de performance relativa que serve como critério de comparação para as células solares simuladas.

3.1 Células solares e as gerações dos sistemas fotovoltaicos

Dentre todas fontes renováveis e abundantes de energia em nosso planeta a energia solar é esperada ter um papel vital como fonte de energia do futuro. O planeta recebe através da luz solar o equivalente a 3×10^{24} J/ano de energia que corresponde a aproximadamente 10^4 vezes mais que o consumo anual de energia (GRÄTZEL, 2005). Apesar da capacidade do Sol em fornecer energia, uma forma eficiente de conversão é necessária para captação e conversão dessa energia a qual viabilize a sua distribuição e utilização. Sistemas fotovoltaicos, mais conhecidos como células solares são, portanto, a principal forma de exploração da energia solar convertendo a energia dos fótons da radiação solar em energia elétrica através da geração de pares elétron-buraco. Porém, existem diversos obstáculos a serem transpostos a fim de tornar a geração de energia fotovoltaica uma solução pragmática para resolver a crise energética. Entre estes pode-se citar:

1. Aumento da eficiência de conversão em potência;
2. Redução do custo;
3. Durabilidade a longo prazo para algumas células de nova geração;
4. Uso de materiais abundantes e amigáveis ao meio-ambientes.

Atender esses requisitos simultaneamente é o maior desafio da pesquisa e desenvolvimento em células solares desde o começo de sua aplicação como fonte de energia.

Células solares são categorizadas em três gerações baseadas na sua relação entre custo e eficiência. A primeira geração de células solares tem uma eficiência relativamente maior com alto custo de produção. Elas são o exemplo clássico de células solares disponíveis comercialmente, principalmente na forma de módulos de silício. A energia é gerada através de uma junção $p - n$ do semicondutor dopado que separa e coleta pares elétron-buraco. Células solares de filmes finos baseadas em cádmio-telúrio ou cobre-índio-gálio-selênio formam a segunda geração de células solares. Elas costumam apresentar menor eficiência que aquelas de primeira geração,

porém empregam um processo de fabricação mais simples e que consome menos material. A tecnologia de filmes finos consegue reduzir a espessura de um filme de alguns milímetros de semicondutor para apenas alguns micrômetros ou até nanômetros, permitindo um custo de produção menor. Atualmente, o preço de comercialização de células por filmes finos é similar ou menor que o dos módulos fotovoltaicos e é muito mais versátil em suas aplicações (SAHAYA; SETHIA; TIWARIB, 2013; BOSSERT et al., 2000).

A principal desvantagem de células solares de primeira e segunda geração é que elas estão condicionadas pelo limite teórico de Shockley-Queisser de $\approx 30\%$ para uma única junção $p - n$ (SHOCKLEY; QUEISSER, 1961). Já as células solares de terceira geração, por falta de um consenso, consistem de qualquer tipo de células que não estão agrupadas na primeira e segunda gerações. Estas últimas empregam diversas tecnologias diferentes não estando condicionadas pelo limite de eficiência de Shockley-Queisser.

3.2 Célula solar clássica de junção $p - n$

Os dispositivos fotovoltaicos de primeira e segunda geração consistem de um semicondutor tipo p e um semicondutor tipo n colocados em contato para formar uma junção. Sem a presença de um campo externo um campo elétrico é formado nessa junção (chamado zona de depleção) devido a inter-difusão dos portadores de carga majoritários em cada semicondutor. A absorção dos fótons da irradiação solar através do efeito fotovoltaico produz um par elétron-buraco na zona de depleção os quais são separados pelo campo elétrico formado no contato entre os semicondutores. Enquanto as cargas separadas saírem da zona de depleção, elas tornam-se o portador de carga majoritário e podem ser coletadas nos contatos elétricos associados ao eletrodo e ao contra-eletrodo dando origem a uma corrente elétrica no circuito (HALL, 1981).

Na figura 3.1 é ilustrado no diagrama de energia, a zona de depleção e a forma com que o par elétron-buraco é dissociado por forças de difusão e deslocamento causadas pelo campo elétrico entre os dois tipos de semicondutores. Na figura 3.1, E_c corresponde a energia do início da banda de condução, E_v à energia do topo da banda de valência, E_i ao nível de Fermi para os portadores intrínsecos e E_f ao nível de Fermi da junção $p - n$.

3.3 Eletrônica e terminologia em células solares

O circuito equivalente de uma célula solar ideal pode ser expresso por uma fonte de corrente em paralelo com um diodo posicionado na direção da corrente conforme figura 3.2. Resistências em série e em paralelo são adicionadas para contabilizar pelos diversos mecanismos de perda.

Nas subseções a seguir serão apresentados alguns parâmetros que caracterizam uma célula solar e estão intimamente relacionados a sua capacidade de fotoconversão. São eles: corrente de curto-circuito (J_{SC}), voltagem em circuito-aberto (V_{OC}), resistência em série (R_S), resistência em paralelo ou resistência *shunt* (R_{Sh}), fator de forma (FF), eficiência (η) e eficiência quântica (HALL, 1981; PINHO; GALDINO, 2014).

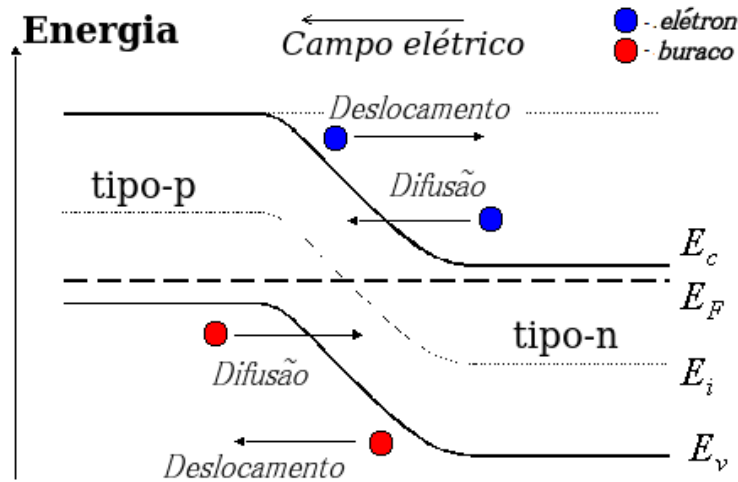


Figura 3.1 Ilustração da zona de depleção causando a separação dos portadores de carga. Adaptado de: KHAN (2013)

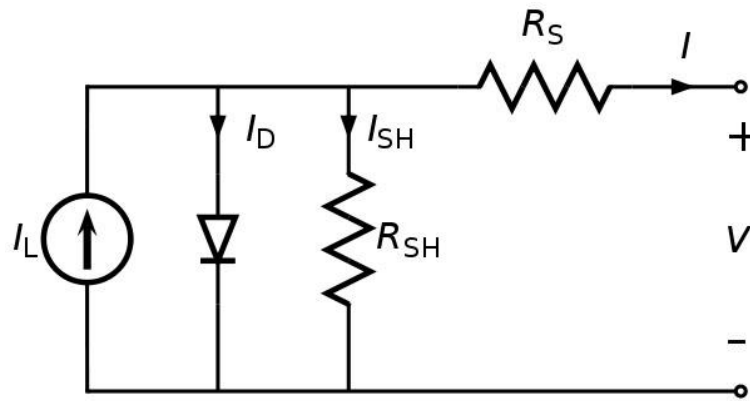


Figura 3.2 Circuito equivalente de uma célula solar. Fonte de: KHAN (2013)

3.3.1 Corrente de curto-circuito

É a corrente obtida na célula quando em curto-circuito, isto é, quando não há resistência a carga. A corrente da célula solar é normalmente representada como uma densidade de corrente, J_{SC} , conforme equação 3.1 (HALL, 1981):

$$J_{SC} = \frac{I_{SC}}{A} \quad (mA/cm^2) \quad (3.1)$$

onde A é a área efetiva da célula solar. O valor dessa corrente é uma função da iluminação solar (padrão de 1000 W/cm^2), propriedades óticas e probabilidade de transferência de carga da célula.

3.3.2 Voltagem em circuito-aberto

A voltagem em circuito aberto (V_{OC}) é a voltagem máxima disponível por uma célula solar e é obtida quando uma resistência infinita é ligada aos terminais. Depende da corrente

de saturação (J_0), corrente elétrica fotogerada (J_L) e da temperatura conforme a equação 3.2 (HALL, 1981):

$$V_{OC} = \frac{kT}{q} \ln \left(\frac{J_L}{J_0} + 1 \right) \quad (V) \quad (3.2)$$

Onde k é a constante de Boltzmann e q é a carga eletrônica elementar. Por depender da corrente de saturação é dependente do *bandgap* do semicondutor e da recombinação da carga na célula. Na figura 3.3 se pode ver um gráfico de $I \times V$ onde estão indicados os pontos da corrente de curto-circuito e a voltagem de circuito aberto.

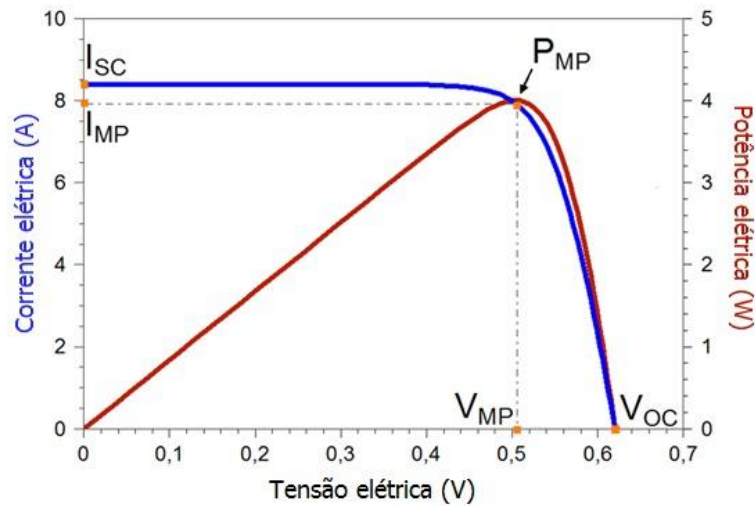


Figura 3.3 Ponto de máxima potência para uma célula solar hipotética. Fonte: PINHO; GALDINO (2014)

3.3.3 Resistência em série

A resistência em série, R_S , em uma célula solar depende da espessura da junção, das impurezas do material e da resistência de contato (HALL, 1981). A resistência em série reduz o fator de forma afetando a máxima potência, enquanto valores muito altos de R_S afetam também a corrente de curto-circuito. Somente a voltagem de circuito-aberto não é afetada pois nesse caso a corrente total sobre a célula e as resistências em série são nulas. Uma aproximação da resistência em série pode ser obtida através da inclinação da curva $I \times V$ no ponto de V_{OC} , conforme mostrado na figura 3.4.

3.3.4 Resistência *shunt*

Baixa resistência em paralelo promove um caminho alternativo para a corrente fotogerada causando perda de potência significativa. O efeito de uma baixa resistência *shunt* é uma redução do fator de forma e uma voltagem de circuito-aberto mais baixa afetando a potência máxima da célula (HALL, 1981). A corrente de curto-circuito não é afetada a menos por um valor muito baixo da resistência, pois nesse caso a corrente prefere o caminho externo do circuito. Uma

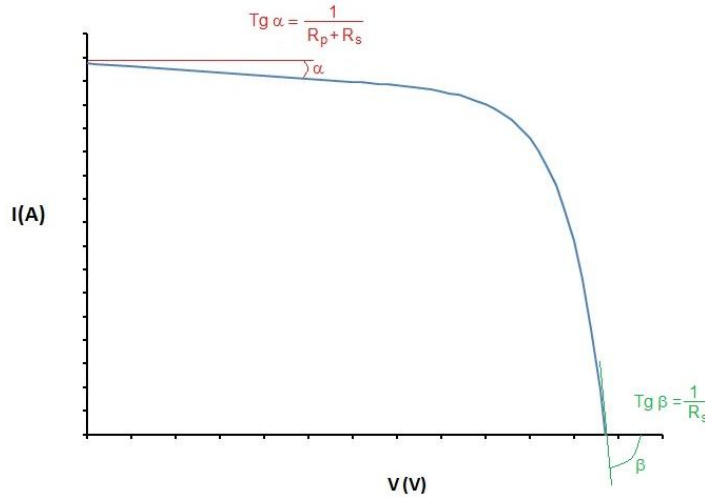


Figura 3.4 Obtenção de resistências a partir da curva $I \times V$. Fonte: PINHO; GALDINO (2014)

aproximação para R_{Sh} pode ser obtido pela inclinação no ponto da corrente de curto-circuito como pode ser visto no gráfico da Figura 3.4.

3.3.5 Fator de forma

O fator de forma é uma medida da máxima potência de uma célula solar. Ele é representado por quanto a curva $I \times V$ se aproxima da forma quadrada e é a razão entre a potência máxima pelo produto de V_{OC} e I_{SC} para a célula solar (KHAN, 2013). Conforme mostrado na Eq. 3.3:

$$FF = \frac{V_{MP} \times I_{MP}}{V_{OC} \times I_{SC}} \quad (3.3)$$

onde V_{MP} e I_{MP} são, respectivamente, a voltagem e a corrente no ponto de máxima potência. Conforme pode ser visto na Fig. 3.3, os valores da corrente e da voltagem no ponto de máxima potência são ligeiramente menores que os respectivos valores da tensão de circuito-aberto e da corrente de curto-circuito.

O fator de forma por ser razão de parâmetros físicos de mesma unidade, é adimensional. Em última análise, o fator de forma é uma função das resistências em série e resistência *shunt*. Para melhorar a razão do fator de forma (que idealmente seria 1), é preciso aproximar-se do caso idealizado de uma resistência em série próxima de zero e uma resistência em paralelo próxima do infinito.

3.3.6 Eficiência

A eficiência de uma célula solar é definida como a razão entre a saída de energia elétrica máxima e a energia de entrada proveniente do Sol. Portanto a definição matemática de eficiência é expressa por:

$$\eta = \frac{V_{OC} \times I_{SC} \times FF}{P_{in}} \quad (3.4)$$

onde P_{in} é a potência de entrada da luz solar. A eficiência é geralmente expressa como uma porcentagem (KHAN, 2013).

A eficiência da célula solar depende também do espectro da luz incidente e da sua intensidade, assim como a temperatura de operação. O padrão reconhecido internacionalmente para medição da eficiência em células solares é o chamado *AM1.5 Global* em uma temperatura de 25°C, mostrado na Fig. 3.5.

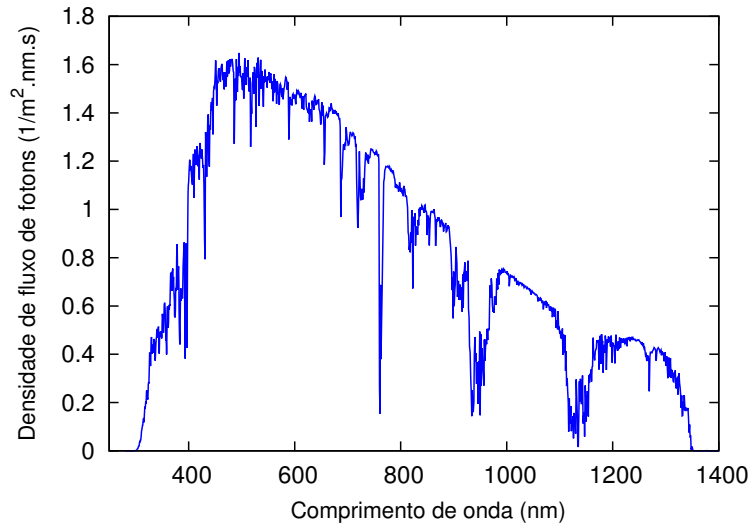


Figura 3.5 Espectro de irradiação AM1.5G pela norma ASTM G-173-03 (International standard ISO 9845-1, 1992).

3.3.7 Eficiência quântica

A eficiência quântica ou eficiência quântica externa (EQE) é uma medida da eficiência da célula solar em produzir carga fotogerada em uma dada frequência do fóton incidente (KHAN, 2013). É definida como a razão entre o número de fótons incidentes e o número de portadores de carga gerados e é uma função do comprimento de onda de excitação:

$$\eta = 1240 \times \frac{I_{SC}}{\lambda \times \phi} \quad (3.5)$$

onde, I_{SC} é a corrente de curto-circuito, λ é o comprimento de onda (nm) e ϕ é o fluxo de luz radiativa incidente.

3.3.8 Fotocorrente total gerada

Tanto a eficiência tradicional quanto a eficiência quântica levam em consideração os efeitos de perdas por recombinação de portadores de carga, perda de eficiência por temperatura e resistência do circuito. Essas medidas são geralmente obtidas experimentalmente a partir do gráfico $I \times V$ usado para caracterizar as células solares. Porém a obtenção de um gráfico $I \times V$ não é facilmente obtida através de um cálculo de eletromagnetismo computacional pois

nesse caso levar em conta fatores como recombinação e resistência do circuito requer grande complexidade de simulação.

Tendo em vista essa limitação, o que é mais facilmente obtido através de simulações eletromagnéticas em células solares é a chamada fotocorrente total gerada. Essa fotocorrente contabiliza o número de pares elétron-buraco que devem ser gerados pela absorção dos fótons incidentes pelo material. Desconsiderando os efeitos de recombinação e resistência que possam aniquilar esses pares antes de produzirem uma corrente no circuito determina-se a fotocorrente total gerada (QUANXI; ENKE, 1987). Essa fotocorrente será maior que a corrente de curto-circuito obtida experimentalmente mas serve para critérios de comparação entre células solares simuladas computacionalmente. O detalhamento do cálculo da fotocorrente total gerada será abordado na seção 4.4 do capítulo de Modelagem Matemática.

De acordo com o objetivo desse trabalho, o efeito de modificar a textura da superfície da célula solar aumenta as reflexões internas aproveitando melhor a luz incidente. Portanto, a formação de uma textura influi diretamente no valor de J_L (vide Eq. 3.2) e por esse motivo é capaz de aumentar a eficiência de fotoconversão da célula solar.

4 MODELAGEM MATEMÁTICA

A modelagem computacional procura simular fenômenos físicos através de protótipos virtuais que representam o problema de interesse. Para que essa simulação seja realística, é necessária a presença de um modelo matemático que descreva a física do problema a ser estudado de maneira fidedigna. Além disso, um modelo numérico eficiente precisa ser utilizado traduzindo as equações matemáticas para um formato compatível com o procedimento de resolução do computador. A resolução de maneira analítica do modelo matemático é geralmente impossível de ser obtida sendo preciso traduzir as equações físicas, baseadas em derivadas, em equações algébricas que possam ser calculadas localmente e então combinadas numa resposta final com excelente aproximação do resultado real. Esse processo é feito usualmente através dos métodos de diferenças finitas, volumes finitos e etc, os quais discretizam o domínio computacional de interesse e traduzem as equações que descrevem a física do problema em equações algébricas (MOELLER, 2003).

O modelo matemático é o responsável pela descrição dos fenômenos físicos envolvidos no problema e por isso deve ser cuidadosamente elaborado para garantir acuidade dos resultados obtidos na simulação com o esperado experimentalmente. Nesse capítulo será definido o problema a ser tratado nessa dissertação, apresentando inicialmente as equações governantes e a Teoria Construtal juntamente com o método Design Construtal que será aplicado para otimização geométrica do problema proposto.

4.1 Equações do eletromagnetismo

Os princípios do eletromagnetismo foram deduzidos a partir de observações experimentais por diversos cientistas e a relação contígua entre eletricidade e magnetismo foi dada em sua forma completa por Maxwell no que é chamado hoje em dia de equações de Maxwell (MAXWELL, 1865; HAGNESS; TAFLOVE, 2000):

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\mu \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial t} - \mathbf{J}_m, \quad (4.1)$$

$$\nabla \times \mathbf{H} = \epsilon \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} + \mathbf{J}_e, \quad (4.2)$$

$$\nabla \cdot (\mu \mathbf{H}) = 0, \quad (4.3)$$

$$\nabla \cdot (\epsilon \mathbf{E}) = \rho. \quad (4.4)$$

onde

$$\mathbf{E} = (E_x(x, y, z, t), E_y(x, y, z, t), E_z(x, y, z, t)) \quad (4.5)$$

é a intensidade do campo elétrico,

$$\mathbf{H} = (H_x(x, y, z, t), H_y(x, y, z, t), H_z(x, y, z, t)) \quad (4.6)$$

é a intensidade do campo magnético (t é o tempo e x,y,z são dimensões espaciais), ϵ e μ (permissividade elétrica e permeabilidade magnética, respectivamente) são parâmetros dos meios de propagação, ρ é a densidade de carga e $\mathbf{J}_e$ e $\mathbf{J}_m$ são as densidades de corrente elétrica e magnética, respectivamente.

As primeiras duas equações são chamadas equações rotacionais e as duas ultimas são chamadas equações de divergência. A solução das equações de Maxwell resulta na determinação das intensidades dos campos usando parâmetros dos materiais e algumas condições de contorno iniciais. As equações podem descrever basicamente qualquer sistema envolvendo correntes ou ondas eletromagneticas e sua interação de primeira ordem com o meio material quando efeitos da mecânica quântica não são relevantes.

Quando a propagação ocorre em um meio dielétrico é preciso definir outras duas grandezas, o deslocamento elétrico $\mathbf{D}$ e a densidade de fluxo magnético $\mathbf{B}$ formando as equações de campo auxiliares dadas a seguir:

$$\mathbf{D} = \epsilon_0 \mathbf{E} + \mathbf{P} \quad (4.7)$$

$$\mathbf{H} = \frac{1}{\mu_0} \mathbf{B} - \mathbf{M} \quad (4.8)$$

onde $\mathbf{P}$ é o campo de polarização e $\mathbf{M}$ é o campo de magnetização que surge pela interação dos campos elétricos e magnéticos da onda eletromagnética com a nuvem eletrônica dos átomos constituintes do meio que formam dipolos microscópicos. A descrição do campo de polarização é essencial para descrever meios materiais mais complexos que apresentem relações de dispersão, não-linearidade ou anisotropia.

4.2 Propriedades óticas dos materiais e o modelo de Lorentz

O modelo de Lorentz assume que quando um campo eletromagnético penetra um meio, os elétrons são forçados a um movimento da sua posição de equilíbrio resultando numa pequena separação dos elétrons de carga negativa e o núcleo de carga positiva. Esse deslocamento dá origem a um momento dipolo que tem a forma $\mathbf{p}(t) = -q\mathbf{r}(t)$ onde $\mathbf{r}$ descreve o deslocamento do elétron em relação ao núcleo e q o valor de sua carga. Para um dado campo eletromagnético com frequência angular ω , os elétrons oscilam na mesma frequência e podem ter diversas ressonâncias geralmente na região ultravioleta ou infravermelho próximo (KITTEL, 2005). A partir dessas considerações, os elétrons podem ser tratados como osciladores harmônicos amortecidos, ou elétrons ligados, e seu movimento pode ser descrito através da equação diferencial (LEVI, 2016):

$$m_e \frac{d^2 \mathbf{r}}{dt^2} + m_e \gamma \frac{d\mathbf{r}}{dt} + m_e \omega_0 \mathbf{r} = -e \mathbf{E} \quad (4.9)$$

onde m_e é a massa do elétron, γ é a taxa de amortecimento e ω_0 é a frequência de ressonância. Os termos no lado esquerdo da equação representam as forças agindo nos elétrons devido a aceleração, amortecimento e restauração, respectivamente, enquanto no lado direito da equação está a força motriz linear do deslocamento. Usando a relação temporal para o deslocamento e o campo elétrico temos: $\mathbf{r}(t) = \mathbf{r}_0 e^{-j\omega t}$ e $\mathbf{E}(t) = \mathbf{E}_0 e^{-j\omega t}$ na equação diferencial, uma expressão para r_0 pode ser obtida. Assumindo que o meio contém N moléculas por unidade de volume, a polarização macroscópica pode ser escrita como:

$$\mathbf{P} = N\mathbf{p} = (-eN)\mathbf{r}_0 e^{-j\omega t} = \frac{Ne^2}{m_e} \frac{1}{\omega_0^2 - \omega^2 - j\gamma\omega} \mathbf{E} \quad (4.10)$$

Logo, de acordo com a Eq. 4.10 e considerando as diferentes frequências de ressonância, a permissividade relativa complexa do modelo de Lorentz é dada por:

$$\epsilon(\omega) = 1 + \sum_i \frac{f_i \omega_p^2}{\omega_i^2 - \omega^2 - j\gamma_i \omega} \quad (4.11)$$

onde $\omega_p = (Ne^2/m_e \epsilon_0)^{1/2}$ é a frequência de plasma e o fator f_i é a força da oscilação i .

Os materiais cuja função dielétrica pode ser descrita pela Eq. 4.11 são chamados materiais de dispersão de Lorentz. Essa relação permite descrever as relações de dispersão para um determinado material, isto é, como um material real se comporta quando em contato com ondas eletromagnéticas de diferentes frequências. Pode-se então reescrever as equações constitutivas dos campos auxiliares permitindo implementação direta desses materiais nas equações de Maxwell:

$$\mathbf{D} = \epsilon_0 \hat{\epsilon} \mathbf{E} \quad (4.12)$$

$$\mathbf{B} = \mu_0 \hat{\mu} \mathbf{H} \quad (4.13)$$

$$\mathbf{J}_e = \hat{\sigma} \mathbf{E} \quad (4.14)$$

onde $\hat{\epsilon}$, $\hat{\mu}$ e $\hat{\sigma}$ são tensores da permissividade elétrica relativa, da permeabilidade magnética relativa e da condutividade elétrica, obtidos com as mesmas considerações da permissividade elétrica relativa da Eq. 4.11 porém generalizada para tensores de forma a abranger o caso de materiais anisotrópicos (SALEH; TEICH; SALEH, 1991).

4.3 Invariância de escala e adimensionalização das equações de Maxwell

Uma característica interessante do eletromagnetismo em um meio dielétrico é que não há uma escala fundamental de tamanho exceto pela suposição de que o sistema é grande o suficiente para que efeitos mecânico-quânticos de confinamento possam ser negligenciados. Para sistemas fotônicos, não existe uma constante fundamental para as dimensões de tamanho, isto é, a equação geral é invariante de escala. Por esse motivo, existe uma relação muito simples entre problemas eletromagnéticos que diferem apenas por uma contração ou expansão das

distâncias. Para demonstrar essas propriedades considera-se, por simplicidade, a equação de Maxwell independente do tempo desacoplada para o campo magnético (dedução encontrada em JOANNOPOULOS et al. (2011)):

$$\nabla \times \left(\frac{1}{\epsilon(\mathbf{r})} \nabla \times \mathbf{H}(\mathbf{r}) \right) = \left(\frac{\omega}{c} \right)^2 \mathbf{H}(\mathbf{r}), \quad (4.15)$$

onde ω é a frequência do harmônico e c é a velocidade da luz no vácuo. Se for considerado, por exemplo, a solução para os modos harmônicos para um sistema cuja configuração dielétrica seja $\epsilon'(\mathbf{r})$ que é apenas uma versão expandida ou contraída de $\epsilon(\mathbf{r})$ da equação acima: $\epsilon'(\mathbf{r}) = \epsilon(\mathbf{r}/s)$ para um fator de escala s . Fazendo a mudança de variável na Eq. 4.15 usando $\mathbf{r}' = s\mathbf{r}$ e $\nabla' = \nabla/s$:

$$s\nabla \times \left(\frac{1}{\epsilon(\mathbf{r}'/s)} s\nabla' \times \mathbf{H}(\mathbf{r}'/s) \right) = \left(\frac{\omega}{c} \right)^2 \mathbf{H}(\mathbf{r}'/s), \quad (4.16)$$

Porém, como $\epsilon(\mathbf{r}'/s)$ é simplesmente $\epsilon'(\mathbf{r}')$ dividindo s nos dois lados mostra-se que:

$$\nabla \times \left(\frac{1}{\epsilon'(\mathbf{r}')} \nabla' \times \mathbf{H}(\mathbf{r}'/s) \right) = \left(\frac{\omega}{cs} \right)^2 \mathbf{H}(\mathbf{r}'/s), \quad (4.17)$$

A Eq.4.17 é simplesmente a equação desacoplada do campo magnético onde o novo modo e sua frequência correspondente podem ser obtidos pela simples correção de escala do modo antigo, $\mathbf{H}(\mathbf{r})$, e sua frequência ω . Essa constatação tem considerável importância prática, pois enquanto a microfabricação de uma estrutura fotônica pode ser difícil de ser construída, modelos equivalentes em macroescala, com mesmo vetor dielétrico, em um regime de comprimento de onda maior (por exemplo, em microondas) serão equivalentes do ponto de vista do seu comportamento eletromagnético (JOANNOPOULOS et al., 2011). Com base nesse fato, as simulações realizadas nesse trabalho podem ser seguramente transpostas a outras escalas desde que redimensionada também a frequência dos campos eletromagnéticos mantendo o mesmo material dielétrico.

Uma vez que as equações de Maxwell são invariantes em escala, é conveniente que em problemas eletromagnéticos as unidades também sejam invariantes. Por esse motivo, na implementação computacional é natural escolher uma unidade de comprimento característica, por exemplo, a , e usar como unidade de distância.

Impondo que as constantes físicas c , ϵ_0 , μ_0 sejam idênticas a unidade, portanto a (reduzido de a/c) também se torna a unidade de tempo enquanto a unidade de frequência se torna $1/a$. A conversão para unidades padrão (como as do sistema internacional) requer apenas substituir a pela unidade de interesse e fazer as conversões necessárias. Em simulações eletromagnéticas o usuário está geralmente interessado em quantidades adimensionais como um espectro de transmissão ou reflexão sendo bastante conveniente a adimensionalização das equações.

4.4 Cálculo de fotocorrente total gerada

O valor de referência para comparar a eficiência de uma célula solar é a fotocorrente total gerada (J_{ph}) por essa célula ao ser submetida a luz solar. Para calcular essa grandeza usamos a densidade de irradiação espectral do Sol padrão na superfície da terra, o AM1.5G, em unidades de $W/nm.m^2$. A irradiação espectral é uma função do comprimento de onda (ou energia) dos fótons, chamado de $F(\lambda)$, e é a forma mais comum de caracterizar uma fonte de luz fornecendo a densidade de potência em um comprimento de onda particular. O gráfico do espectro AM1.5G é mostrado na Fig. 3.5.

A fotocorrente total gerada por uma célula solar nas condições de iluminação padrão depende apenas do seu espectro de absorção, denotado aqui como $\Gamma(\lambda)$. Porém é necessário converter a irradiação espectral da fonte para densidade de fluxo de fótons, pois a absorção da célula é um razão entre fluxo absorvido (ϕ_{abs}) e fluxo incidente (ϕ_i) (BARUGKIN et al., 2015). Essa conversão é feita através da relação de Planck:

$$\Phi_{ph}(\lambda) = \frac{F(\lambda)}{E_p h} = \frac{F(\lambda)}{h \cdot c} \times \lambda, \quad (4.18)$$

onde h é a constante de Planck e c é a velocidade da luz, fornecendo o espectro da densidade de fótons da luz solar mostrado na Fig. 4.1:

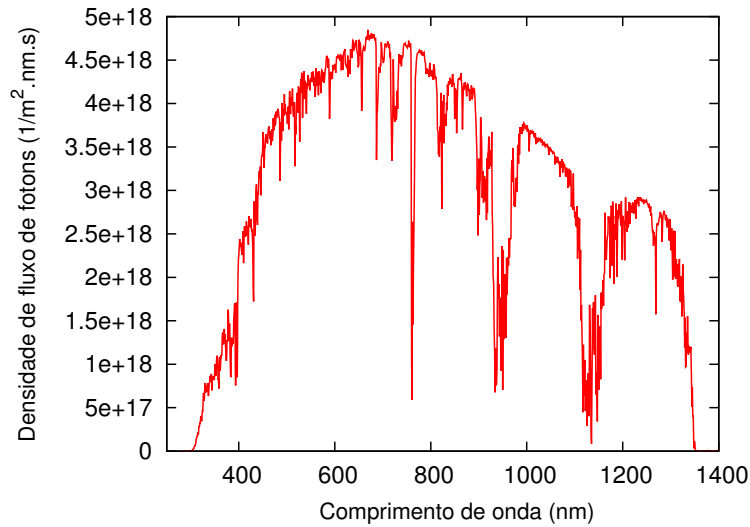


Figura 4.1 Espectro da densidade de fluxo de fótons baseado no AM1.5G.

Finalmente, no cálculo da fotocorrente gerada não devem ser considerados fótons com comprimento de onda menor que λ_0 o que corresponde a um fóton com energia igual ao *band gap* do material absorvente, visto que fótons com menor energia não causam excitação eletrônica pelo efeito fotoelétrico. Também no cálculo da conversão em energia deve-se atentar que fótons com energia maior que o *band gap* (E_g) do material perdem essa energia extra por decaimento não contribuindo para fotocorrente gerada. Contudo, os fótons absorvidos são capazes de excitar um elétron contribuindo com uma carga elementar (q) para a corrente (BARUGKIN et al., 2015). A partir dessas considerações a equação para a fotocorrente gerada total pela célula

solar será dada por:

$$J_{ph} = q \times n_{fótons} = q \times \int_0^{\lambda_0} \Phi(\lambda) \times \Gamma(\lambda) d\lambda, \quad (4.19)$$

Naturalmente, essa corrente não corresponde a energia elétrica efetivamente gerada pela célula solar, a fotoconversão em energia útil requer o cálculo de eficiência quântica que inclui os efeitos de perdas por recombinação de portadores de carga, perda de eficiência por temperatura e resistência do circuito. Essas perdas porém estão fora do escopo desse trabalho sendo suficiente para a comparação de geometrias o cálculo da fotocorrente total gerada conforme a Eq. 4.19.

5 MODELAGEM NUMÉRICA

Nesse capítulo, será explicado e exemplificado o método de resolução numérica das equações de Maxwell, o FDTD. Também serão abordadas as configurações da simulação para realizar os cálculos com precisão. Finalmente, o problema é traduzido em um modelo numérico a ser implementado no software de simulação.

5.1 Método de diferenças finitas no domínio do tempo

O método de diferenças finitas no domínio do tempo (FDTD) é uma solução direta das equações rotacionais de Maxwell dependentes do tempo, Eq. 4.1 e Eq. 4.2, e resolve o problema no domínio do tempo. Por incluir a dependência temporal FDTD pode incorporar efeitos de reflexão e radiação que são geralmente negligenciados por outros métodos. O FDTD pode modelar a propagação de uma onda em um meio complexo, tais como variantes no tempo, anisotrópico, absorvente, dispersivo e também meios não-lineares (CHU; CHAUDHURI, 1989).

O método de FDTD foi inicialmente usado por Yee (1966) para analisar problemas de espalhamento bidimensionais. Somente mais tarde foi estendido para casos 3D por Taflov e Brodwin (1975) e subsequentemente aplicado a problemas maiores e mais complexos com o aumento do poder computacional. O algoritmo de FDTD está baseada na expressão de diferenças finitas das equações de Maxwell com evolução temporal discreta. O propagador de FDTD é formulado discretizando o volume em células, conhecidas como retículo de Yee ou *Yee lattice*, nos quais os componentes $\mathbf{E}$ e $\mathbf{H}$ estão posicionados em semi-intervalos alternados conforme mostra a Fig. 5.1.

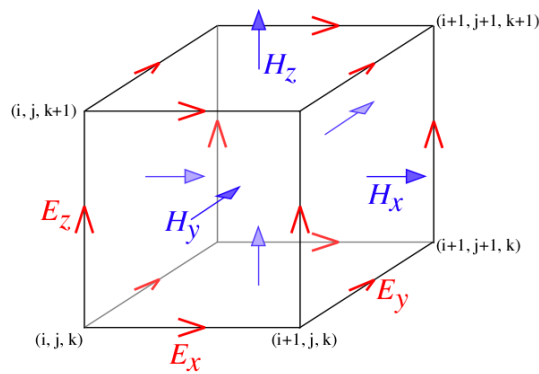


Figura 5.1 Ilustração do retículo de Yee no qual as equações de Maxwell são discretizadas. Fonte: OSKOOI et al. (2010).

A formulação computacional local juntamente com o tempo dado de forma explícita fazem do FDTD o método mais simples e versátil para resolver as equações de Maxwell. Além disso, a interação completa entre onda incidente e geometria pode ser analisada porção por porção em qualquer instante de tempo sem exigir a solução simultânea do problema inteiro o que reduz consideravelmente o custo computacional e a complexidade do código.

5.1.1 Método de diferenças centradas e ordem de precisão

O método de FDTD emprega diferenças finitas centradas como aproximações tanto para as derivadas espaciais quanto temporais que aparecem nas equações de Maxwell, Eqs. 4.1-4.2. A fim de exemplificar o método, considere-se uma expansão em série de Taylor para a função $f(x)$ expandida sobre o ponto x_0 com um deslocamento de $\pm \frac{\delta}{2}$.

$$f(x_0 + \frac{\delta}{2}) = f(x_0) + \frac{\delta}{2}f'(x_0) + \frac{1}{2!}(\frac{\delta}{2})^2f''(x_0) + \frac{1}{3!}(\frac{\delta}{2})^3f'''(x_0) + \dots \quad (5.1)$$

$$f(x_0 - \frac{\delta}{2}) = f(x_0) - \frac{\delta}{2}f'(x_0) + \frac{1}{2!}(\frac{\delta}{2})^2f''(x_0) - \frac{1}{3!}(\frac{\delta}{2})^3f'''(x_0) + \dots \quad (5.2)$$

Onde os apóstrofes indicam diferenciação. Subtraindo a Eq. 5.2 da Eq. 5.1 resulta em:

$$f(x_0 + \frac{\delta}{2}) - f(x_0 - \frac{\delta}{2}) = \frac{\delta}{2}f'(x_0) + \frac{2}{3!}(\frac{\delta}{2})^3f'''(x_0) + \dots \quad (5.3)$$

Dividindo ambos lados por δ produz:

$$\frac{f(x_0 + \frac{\delta}{2}) - f(x_0 - \frac{\delta}{2})}{\delta} = f'(x_0) + \frac{2}{3!}(\frac{\delta}{2})^2f'''(x_0) + \dots \quad (5.4)$$

Portanto, o termo na esquerda é igual a derivada da função no ponto x_0 mais um termo que depende de δ^2 mais um número infinito de termos dependendo de potências pares de δ . Esses termos são chamados de termos de ordem superior e podem ser negligenciados para escrever uma aproximação de diferenças centradas para a derivada no ponto (HUANG et al., 1991):

$$\left. \frac{df(x)}{dx} \right|_{x=x_0} = \frac{f(x_0 + \frac{\delta}{2}) - f(x_0 - \frac{\delta}{2})}{\delta} \quad (5.5)$$

Uma vez que o termo de menor potência sendo ignorado é de ordem dois, é dito que o método de diferenças finitas centradas apresenta precisão de segunda ordem ou comportamento de segunda ordem. Essa precisão é suficiente para a maioria dos problemas e é por isso implementada em praticamente todos códigos FDTD.

5.1.2 Algoritmo de Yee

O algoritmo do FDTD conforme proposto em 1966 por Yee (1966), emprega diferenças centradas de segunda ordem e o algoritmo pode ser resumido nas seguintes etapas:

1. Substituir todas derivadas nas leis de Maxwell por diferenças finitas. Discretizar espaço e tempo de forma que os campos elétricos e magnéticos fiquem espaçados tanto no espaço como no tempo, vide Fig. 5.1;
2. Resolver as equações de diferenças resultantes para obter equações atualizadas que expressam os campos futuros (desconhecidos) e os campos passados (conhecidos);

3. Calcular os campos magnéticos um passo de tempo no futuro de forma que sejam conhecidos;
4. Calcular os campos elétricos um passo de tempo no futuro de forma que sejam conhecidos;
5. Repetir os dois passos anteriores até que os campos sejam conhecidos sobre a duração de interesse.

Nesse ponto a explicação do método ainda é abstrata, de forma que a simplicidade do método será demonstrada com um exemplo unidimensional.

5.1.3 Exemplo de aplicação 1D do FDTD

Considerando um domínio unidimensional na direção x onde o campo elétrico tem somente a componente z . A lei de Faraday pode ser escrita como:

$$-\mu \frac{\partial H}{\partial t} = \nabla \times E = \begin{vmatrix} \mathbf{a}_x & \mathbf{a}_y & \mathbf{a}_z \\ \frac{\partial}{\partial x} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & E_z \end{vmatrix} = -\mathbf{a}_y \frac{\partial E_z}{\partial x} \quad (5.6)$$

Portanto, H_y deve ser o único componente não-zero do campo magnético que varia no tempo. Sabendo disso pode-se escrever a lei de Ampere

$$-\epsilon \frac{\partial E}{\partial t} = \nabla \times H = \begin{vmatrix} \mathbf{a}_x & \mathbf{a}_y & \mathbf{a}_z \\ \frac{\partial}{\partial x} & 0 & 0 \\ 0 & H_y & 0 \end{vmatrix} = -\mathbf{a}_z \frac{\partial H_y}{\partial x} \quad (5.7)$$

As duas equações escalares que relacionam campos magnéticos e elétricos tornam-se, para esse problema:

$$\mu \frac{\partial H_y}{\partial t} = \frac{\partial E_z}{\partial x} \quad (5.8)$$

$$\epsilon \frac{\partial E_z}{\partial t} = \frac{\partial H_y}{\partial x} \quad (5.9)$$

Essas equações são usadas, respectivamente, para avançar o campo magnético e o campo elétrico no tempo de forma alternada no que se chama de método *leapfrog*. Para ser implementado é preciso substituir as derivadas das equações Eq. 5.8 e Eq. 5.9 por diferenças finitas, discretizando o espaço e o tempo. A seguinte notação é utilizada para definir os campos em um domínio discretizado:

$$E_x(x, t) = E_z(m\Delta_x, q\Delta_t) = E_z^q[m] \quad (5.10)$$

$$H_y(x, t) = H_y(m\Delta_x, q\Delta_t) = H_y^q[m] \quad (5.11)$$

onde Δ_x é a separação no espaço entre pontos amostrados e Δ_t é a separação no tempo. O índice m corresponde ao passo espacial, efetivamente a localização no espaço, enquanto o índice q corresponde ao espaço temporal. Apesar de sobrescrito, o índice q está sendo usado

para identificar o passo temporal, não é expoente. Embora, exista apenas uma dimensão espacial, o tempo pode ser pensando como uma outra dimensão. De forma que este problema é efetivamente bidimensional. Para atualizar os campos a cada passo de tempo de forma alternada, conforme requer o FDTD é necessário que os nós onde são calculados os campos sejam posicionados de forma alternada no espaço-tempo. Essa configuração é mostrada na Fig. 5.2.

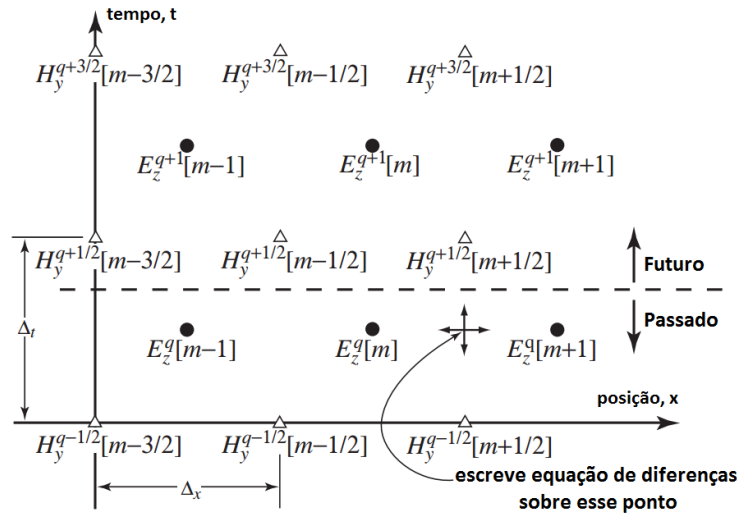


Figura 5.2 Ilustração do domínio discretizado do FDTD no passo temporal inicial.
Adaptado de: HUANG et al. (1991)

Os nós de campos elétricos são mostrados como círculos e os nós dos campos magnéticos como triângulos. Considerando que todos os campos abaixo da linha tracejada são conhecidos - isto é, são considerados no passado - enquanto os campos acima da linha tracejada são desconhecidos e se encontram no futuro. O FDTD fornece uma forma de obter os campos do futuro a partir dos campos do passado, conforme indicado na Fig. 5.2 considera-se o ponto no espaço-tempo $((m+1/2)\Delta_x, q\Delta_t)$.

$$\mu \frac{\partial H_y}{\partial t} \Big|_{(m+1/2)\Delta_x, q\Delta_t} = \frac{\partial E_z}{\partial x} \Big|_{(m+1/2)\Delta_x, q\Delta_t} \quad (5.12)$$

A derivada temporal é substituída pela diferença finita de $H_y^{(q+\frac{1}{2})}[m+\frac{1}{2}]$ e $H_y^{(q-\frac{1}{2})}[m+\frac{1}{2}]$ (o campo magnético em um local fixo mas em tempos diferentes) enquanto a derivada espacial é substituída pela diferença finita de $E_z^{(q)}[m+1]$ e $E_z^{(q)}[m]$ (o campo elétrico em dois locais diferentes mas no mesmo tempo) resultando em:

$$\mu \frac{H_y^{(q+\frac{1}{2})}[m+\frac{1}{2}] - H_y^{(q-\frac{1}{2})}[m+\frac{1}{2}]}{\Delta_t} = \frac{E_z^{(q)}[m+1] - E_z^{(q)}[m]}{\Delta_x} \quad (5.13)$$

Isolando na equação $H_y^{(q+\frac{1}{2})}[m+\frac{1}{2}]$

$$H_y^{(q+\frac{1}{2})}[m+\frac{1}{2}] = H_y^{(q-\frac{1}{2})}[m+\frac{1}{2}] + \frac{\Delta_t}{\mu\Delta_x} (E_z^{(q)}[m+1] - E_z^{(q)}[m]). \quad (5.14)$$

A equação anterior é conhecida como uma equação de atualização, especificamente para o campo H_y . Essa forma de equação pode ser aplicada para qualquer nó de campo magnético, mostrando que o valor futuro de H_y depende apenas dos valores prévios e dos campos elétricos vizinhos. Após aplicar a Eq. 5.14 para todos os nós de campos magnéticos, a linha divisório entre passado e futuro avançou meio passo de tempo. A malha de espaço-tempo aparenta portanto como a mostrada na Fig. 5.3.

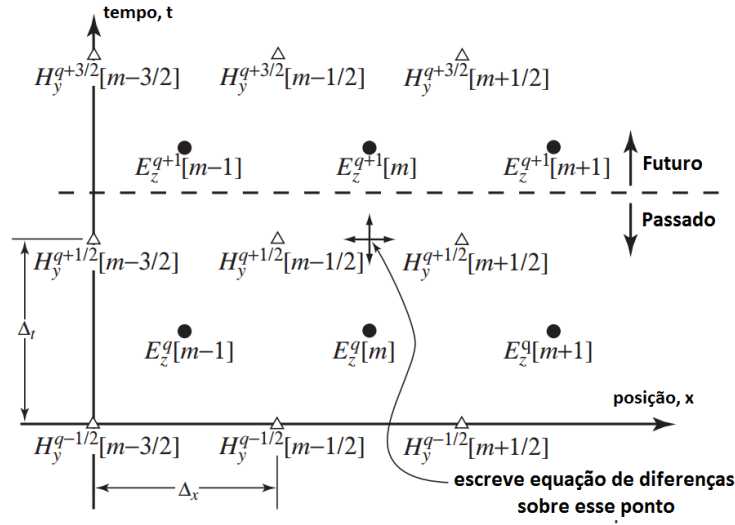


Figura 5.3 Ilustração do domínio discretizado do FDTD avançando meio passo temporal. Adaptado de: HUANG et al. (1991)

Agora considerando a lei de Ampère aplicada ao ponto de espaço-tempo $(m\Delta_x, (q+1/2)\Delta_t)$, que fica indicada como:

$$\epsilon \frac{\partial E_z}{\partial t} \Big|_{m\Delta_x, (q+1/2)\Delta_t} = \frac{\partial H_y}{\partial x} \Big|_{m\Delta_x, (q+1/2)\Delta_t} \quad (5.15)$$

Fazendo as substituições pertinentes em termos de diferenças finitas chega-se à forma:

$$\epsilon \frac{E_z^{(q+1)}[m] - E_z^{(q)}[m]}{\Delta_t} = \frac{H_y^{(q+\frac{1}{2})}[m+\frac{1}{2}] - H_y^{(q+\frac{1}{2})}[m-\frac{1}{2}]}{\Delta_x}. \quad (5.16)$$

Isolando $E_z^{(q+1)}[m]$, se obtém a equação de atualização para o campo elétrico:

$$E_z^{(q+1)}[m] = \frac{E_z^{(q)}[m]}{\Delta_t} + \frac{\Delta_t}{\epsilon\Delta_x} \left(H_y^{(q+\frac{1}{2})}[m+\frac{1}{2}] - H_y^{(q+\frac{1}{2})}[m-\frac{1}{2}] \right) \quad (5.17)$$

Observa-se que o valor futuro de E_z depende apenas do seu valor passado e o valor dos

campos magnéticos vizinhos.

Após aplicar Eq. 5.17 para cada um dos nós de campo elétrico na malha, a linha divisória entre passado e futuro se move outro meio passo de tempo. Portanto, retornou-se a situação descrita na Fig. 5.2, permitindo aplicação dos passos anteriores para atualizar campos elétricos e magnéticos avante no tempo.

5.2 Resolução no método FDTD

Existe uma relação íntima entre a resolução espacial e temporal na implementação do FDTD, como foi possível ver nas equações de atualização onde aparecem as razões $\frac{\Delta_t}{\mu\Delta_x}$ e $\frac{\Delta_t}{\epsilon\Delta_x}$. Também considerando a maneira como os campos são atualizados pelo FDTD, não faz sentido que a energia se propague mais do que um passo espacial para cada passo temporal.

A distância máxima que a energia pode viajar é a velocidade da luz no espaço livre vezes o intervalo de tempo, isto é, $c\Delta_t$. Portanto, a razão $\frac{c\Delta_t}{\Delta_x}$ denominada número de Courant (S_c) tem um importante papel em determinar a estabilidade da simulação numérica e nunca deve exceder o valor de 1 (OSKOOI et al., 2010).

$$S_c = \frac{c\Delta_t}{\Delta_x} < 1 \quad (5.18)$$

Para as simulações realizadas nesse trabalho foi usado o valor $S_c = 0.5$ que é suficiente para simulações em 1D a 3D e comumente aplicada na maioria das simulações FDTD. Esse valor determina que quando a resolução espacial é dobrada, o número de passos temporais também é dobrado. Portanto, em duas dimensões, ao dobrar a resolução a quantidade de memória alocada é quadruplicada e o tempo computacional é aumentado em, no mínimo, 8 vezes.

O FDTD requer que todo domínio computacional seja discretizado de forma regular e também é necessário que a discretização espacial da malha seja suficiente para discernir o menor comprimento de onda e o menor detalhe da geometria no modelo de forma que pode resultar em domínios computacionais grandes. Por esse motivo é importante aplicar condições de simetria e simplificações sempre que possível. Nas simulações realizadas nesse trabalho foi usada uma resolução que manteve no mínimo 10 passos espaciais para resolver cada detalhe do modelo.

5.3 Fontes e cálculo de espectros

O termo J_e da densidade de corrente na Eq. 4.2 pode representar a corrente de condução devido ao fluxo de uma carga em um material sob a influência de um campo elétrico assim como a corrente associada com uma fonte. Nas implementações do FDTD esse termo é usado para imprimir fontes no modelo (OSKOOI et al., 2010). Reorganizando a Eq. 4.2 encontra-se:

$$\frac{\partial E}{\partial t} = \frac{1}{\epsilon} \nabla \times H - \frac{1}{\epsilon} J_e. \quad (5.19)$$

A Eq. 5.19 fornece a derivada temporal de um campo elétrico em termos da derivada espacial do campo magnético e o termo adicional da fonte que pode ser pensado como uma função de força no sistema. Essa corrente pode ser portanto ajustada para representar as características da fonte de interesse no modelo.

Para implementação numérica, a Eq. 5.19 é traduzida em termos de diferenças finitas. Usando a mesma notação e processo aplicado na seção 5.1.3 para um ponto $(m\Delta_x, (q+1/2)\Delta_t)$ no espaço-tempo, resulta na seguinte expressão:

$$E_z^{(q+1)}[m] = \frac{E_z^{(q)}[m]}{\Delta_t} + \frac{\Delta_t}{\epsilon\Delta_x} (H_y^{(q+\frac{1}{2})}[m + \frac{1}{2}] - H_y^{(q+\frac{1}{2})}[m - \frac{1}{2}]) - \frac{\Delta_t}{\epsilon} J_z^{(q+\frac{1}{2})}[m] \quad (5.20)$$

O termo da fonte pode ser facilmente distribuído sobre diversos nós definindo a fonte numa região espacial específica. Também deve-se notar que o sinal da fonte ou sua amplitude apesar de serem facilmente determinadas são quase sempre irrelevantes para problemas físicos onde as quantidades de interesse são normalizadas em relação ao fluxo incidente. A função que determina a forma da fonte, no entanto, é relevante para simulação sendo as formas mais comuns a gaussiana e a harmônica. As fontes harmônicas são usadas, por exemplo, para determinar a resposta de uma determinada estrutura a luz de certa frequência, já os pulsos gaussianos são aplicados para computar os espectros de fluxo. O algoritmo de FDTD deve acionar a fonte lentamente, seguindo uma forma matemática que minimize a geração de erros numéricos na simulação. A computação de espectro de frequências é quase sempre necessária para caracterizar a resposta da luz de um sistema. Essa computação é realizada pela emissão de um pulso gaussiano contendo as frequências de interesse. São determinadas regiões R onde as frequências serão monitoradas possibilitando calcular quantidades como o fluxo de energia em função da frequência, mostrado na Eq. 5.21 (OSKOOI et al., 2010).

$$P(\omega) = Re[\oint\oint_R \mathbf{E}_\omega^*(\mathbf{x}) \times \mathbf{H}_\omega(\mathbf{x}) d\mathbf{A}], \quad (5.21)$$

onde $\mathbf{E}_\omega$ e $\mathbf{H}_\omega$ são os campos produzidos pela fonte com frequência ω . Para computar essas quantidades a partir dos campos $\mathbf{E}(t)$ e $\mathbf{H}(t)$, que são obtidos naturalmente na simulação, é realizada uma transformada discreta de Fourier (DFT) para todas frequências de interesse conforme as expressões:

$$\mathbf{E}_\omega = \sum_q e^{i\omega q\Delta_t} \mathbf{E}(q\Delta_t)\Delta_t \quad (5.22)$$

$$\mathbf{H}_\omega = \sum_q e^{i\omega q\Delta_t} \mathbf{H}(q\Delta_t)\Delta_t \quad (5.23)$$

As Eqs. 5.22 e 5.23 são acumuladas nas regiões específicas R e então são usadas para fazer as computações como da Eq. 5.21 assim como espectros de transmissão, reflexão ou absorção. Nesse trabalho foi aplicado esse procedimento para computar os espectros de reflexão e absorção

das células solares usando um pulso gaussiano contendo frequências de 300 nm a 800 nm, abrangendo a região do visível e infravermelho curto. Também foram realizadas simulações com fonte harmônica contínua para determinar os pontos de máxima energia para otimização da geometria.

5.4 Condições de contorno

A condição de contorno mais simples e natural em uma simulação de FDTD é impor que os campos se anulem no final do domínio. Porém pela natureza ondulatória e interdependente das equações de Maxwell, essa imposição resulta numa reflexão total com sinal trocado do campo incidente. Essa condição simula o caso idealizado de um condutor perfeito onde a condutividade, σ , tende ao infinito. Como a presença de um campo no interior de um material com condutividade infinita implicaria em uma corrente elétrica infinita, o campo é obrigado a ser refletido.

Devido a necessidade de simular em um domínio computacional finito uma condição de contorno aberta, isto é, onde a onda incidente simplesmente deixaria o domínio de interesse sem reflexão, foram desenvolvidas condições de contorno absorventes. Essas condições são baseadas em leis matemáticas simples baseadas nos valores assumidos pelo campo em nós interiores ao domínio. Por exemplo, no caso unidimensional que foi apresentado, poderia se determinar a seguinte relação $E_z^{(q)}[0] = E_z^{(q)}[1]$ e $E_z^{(q)}[L] = E_z^{(q)}[L-1]$, onde o índice espacial 0 e L determinam o começo e o término do domínio. Se um pulso fosse gerado no interior do domínio, com essas condições, ao se encontrar com os limites do domínio a simulação computaria o equivalente a uma absorção progressiva do pulso nas paredes. Essa técnica porém não apresentaria a mesma eficácia no caso 2D ou 3D onde uma onda pode incidir obliquamente nas paredes. Por esse e outros motivos foram desenvolvidas condições de contorno absorventes mais sofisticadas como é o caso das *PML's* (*Perfectly Matched Layers*) ou camadas perfeitamente casadas que são hoje a melhor opção para tratar esse problema.

Diversos tipos e formas de *PML's* são formuladas, mas de forma geral pode-se dizer que são materiais anisotrópicos artificiais que funcionam como materiais fortemente dispersivos mas que não ocasionam qualquer reflexão da onda incidente proveniente do meio. Esse fenômeno ocorre pelo casamento perfeito da impedância transversal da *PML* com a impedância do meio adjacente. A condutividade da região então aumenta progressivamente levando a onda incidente a ser absorvida rapidamente após percorrer uma distância muito pequena dentro da *PML* independente da direção de incidência ou da frequência da onda eletromagnética.

A outra condição de contorno muito usual para um problema de eletromagnetismo computacional é a condição periódica de Bloch onde os campos de uma extremidade do domínio são repassados a extremidade lateral simulando o domínio computacional como uma célula que se repete em todas direções. Essa condição, no caso bidimensional, pode ser expressa pela relação:

$$\mathbf{E}(x + m\Delta_x, y + n\Delta_y) = \mathbf{E}(x, y)e^{ik_x m\Delta_x}e^{ik_y n\Delta_y} \quad (5.24)$$

onde m e n determinam os índices dos últimos nós no domínio computacional e k_x e k_y são componentes do vetor de onda que descrevem sua direção de propagação.

Nesse trabalho, conforme descrito na seção de Definição do Problema e ilustrado na Fig. 5.4, foram utilizadas condições periódicas de Bloch no sentido horizontal, com o posicionamento de camada *PML* no topo do domínio e um retrorefletor na base da célula com características de um condutor perfeito ($\mathbf{H}=\mathbf{E}=0$). Essas condições de contorno têm o objetivo de simular o domínio como uma unidade que se repete indefinidamente na direção x com condição de contorno aberta no topo e onde um refletor perfeito garante que não haverá transmissão através do dispositivo.

5.5 Definição do problema

O problema tratado nessa dissertação é a simulação da interação da luz do espectro solar com o material absorvente de uma célula solar. São avaliados os efeitos de absorção quando texturas com diferentes geometrias são usadas e são determinados os parâmetros que levam aos melhores resultados de absorção da luz. O espectro solar simulado foi aquele correspondendo a faixa de 390 nm a 700 nm que condiz com a faixa da luz visível e as intensidades de cada frequência obedecem o padrão AM1.5G.

Inicialmente realizou-se uma **otimização geométrica com restrição**, onde a geometria fica pré-determinada e os parâmetros que definem sua geometria são variados mantendo a área da seção transversal do enxerto constante. Num segundo momento foi realizada uma **otimização geométrica automática**, onde a partir de sucessivas iterações a geometria é construída passo-a-passo buscando otimizar a absorção da luz ao inserir blocos elementares em pontos onde há maior energia eletromagnética na célula computacional.

O domínio computacional para uma simulação sem textura é apresentado na Fig. 5.4 onde pode-se ver o posicionamento da fonte, da camada absorvente (silício) e do retrorefletor, assim como estão indicadas as posições das linhas para cálculo de fluxo (*l.refl* e *l.trans*) e as medidas do domínio computacional. A fotocorrente total gerada para essa célula sem textura serve de referência para determinar o aumento de performance causado pela criação de textura quando um enxerto é inserido. Ainda na Fig. 5.4, os parâmetros δ_{pml} , δ_{refl} e δ_{si} correspondem às espessuras das camadas absorventes PML, do retrorefletor e do material dielétrico que constitui a célula solar, enquanto sx e sy correspondem às dimensões da célula computacional bidimensional que apresenta condições de contorno periódicas.

A escolha dos valores de espessura para as camadas PML seguiram o padrão aconselhado de a espessura corresponder no mínimo ao maior comprimento de onda presente na simulação (COLLINO; MONK, 1998). Foi possível observar nas simulações de verificação e validação que essa espessura foi capaz de impedir reflexões numéricas. Já para a escolha da espessura do material dielétrico (a camada de silício) partiu-se das informações experimentais (GREEN; KEEVERS, 1995) que uma espessura de 10 μm de silício é capaz de extinguir a intensidade da luz até um comprimento de 780 nm que está além do espectro estudado nesse trabalho, sendo, portanto, suficiente uma camada de 5 μm acoplada um refletor perfeito (du-

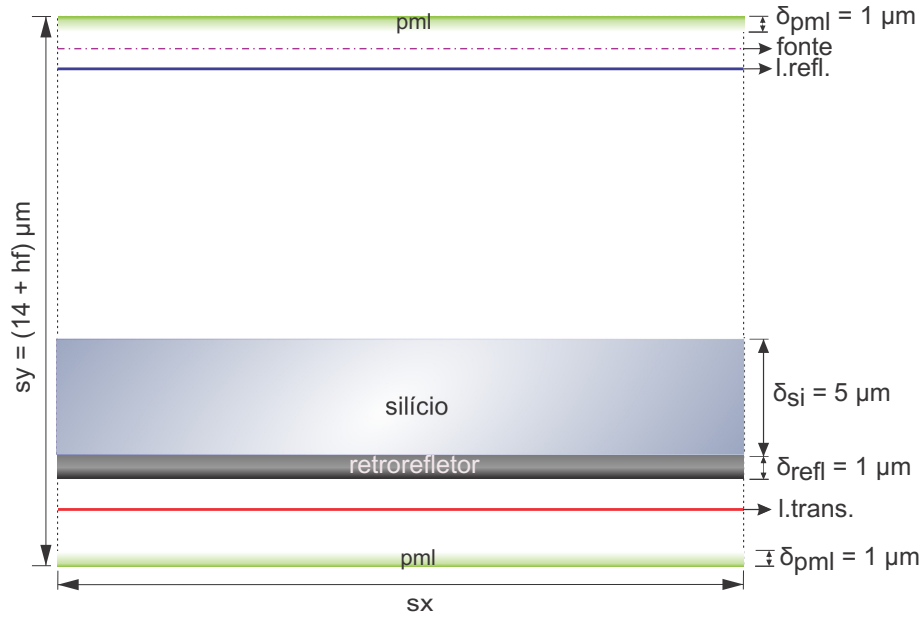


Figura 5.4 Domínio computacional da célula solar sem textura na superfície.

plica o caminho percorrido no dielétrico) para simular a absorção de uma célula solar cujas espessuras excedem facilmente esse valor.

Para realizar o cálculo do espectro de frequências a fonte emite um pulso gaussiano contendo as frequências de interesse, que no caso correspondem à faixa dos principais comprimentos de onda visíveis emitidos pelo Sol, de 390 nm a 700 nm. A direção da propagação da onda se mantém perpendicular à superfície da célula o que é uma simplificação para uma célula solar estacionária. As linhas de fluxo, indicadas como $l.refl$ e $l.trans$ na Figura 5.4 acumulam as componentes de Fourier quantificando a intensidade das frequências transmitidas e refletidas em função da frequência. A intensidade é normalizada em relação a uma simulação realizada com a mesma fonte e mesmas condições de contorno, mas sem a presença da célula solar.

A descrição dos materiais segue aquela proposta pelo modelo de Lorentz que é facilmente implementada no método numérico de resolução das equações de Maxwell, o FDTD, que será abordado no próximo capítulo. Em particular, no caso do silício é realizado um ajuste de curva da função experimental de dispersão $\epsilon(\omega)$, mostrada na Fig. 5.5, em termos de Lorentzianas centradas na frequência de interesse do espectro sendo calculado. Esse processo foi realizado utilizando uma ferramenta de *fitting* disponível online (KINTECHLAB, 2016) que fornece os parâmetros da Lorentziana que foram usadas no software de FDTD.

Para garantir que os campos eletromagnéticos calculados para as estruturas condizem com o de uma emissão solar real foi realizada um ajuste de curva dos dados experimentais do espectro do AM1.5G com uma função polinomial conforme mostrado na Fig. 5.6. Essa função polinomial foi implementada na fonte de emissão que passou a conter uma sobreposição de diversas fontes com comprimentos de ondas fixos e com intensidades correspondentes ao espectro solar padrão.

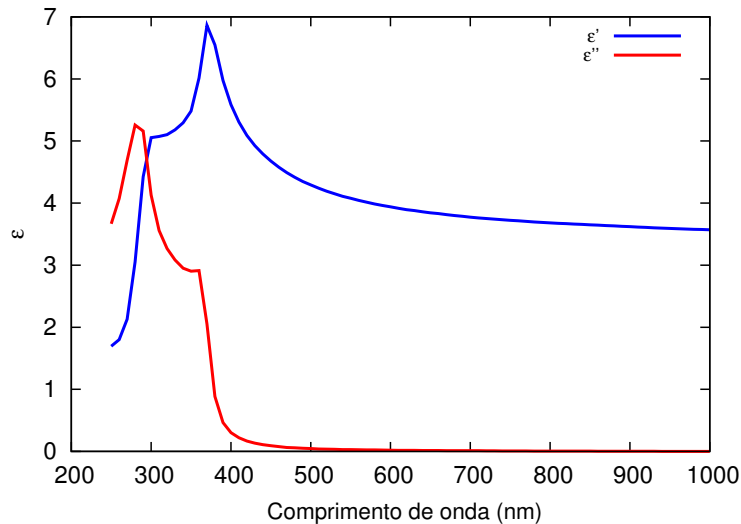


Figura 5.5 Parte real e imaginária da função dielétrica do silício usada nesse trabalho.

Para determinar os efeitos da geometria da superfície na absorção da célula solar foram realizados alguns cálculos mantendo uma geometria fixa com área constante, no caso um retângulo de silício foi inserido sobre a geometria formando uma textura periódica regular. O domínio dessa geometria é mostrado na Fig. 5.7(a). Foi observado então os efeitos da alteração das dimensões que correspondem a altura (hf) e a largura (lf) da textura, e a distância entre texturas pela alteração da dimensão sx do domínio computacional. Também foram caracterizadas formas geométricas alternativas ao simples retângulo: uma textura com extremidade circular, uma textura elipsoidal, uma textura triangular e outra textura trapezoidal. O domínio computacional para cada uma dessas formas é mostrado na Fig. 5.7(b-e) juntamente com as dimensões características. Para essas formas alternativas estudou-se igualmente o efeito da altura e largura da textura (hf e lf) e da separação entre elas (sx).

Após caracterizar os resultados com as geometrias fixas verificando a coerência com o esperado pela literatura, partiu-se para a etapa de construir uma geometria usando o método de otimização automática onde as restrições ficam determinadas por uma dada função de controle ao invés da forma geométrica.

Na otimização geométrica automática, inicia-se a simulação com uma geometria conforme a mostrada na Fig. 5.8(a) contendo apenas o quadrado de número 1 como textura. Logo, uma função de controle baseada na intensidade dos campos eletromagnéticos (vide seção 6.7) é calculada e funciona como parametro de otimização da geometria em construção. É determinada a próxima posição de crescimento da geometria a partir do ponto máximo da função de controle que nesse estudo foi a energia total do campo eletromagnético (definição no capítulo 3). Partindo do pressuposto de que se a geometria crescer para a direção onde houver maior fluxo de energia aumenta a absorção da célula solar, e portanto, a fotocorrente gerada, é posicionada a próxima textura no ponto de máximo. Ilustrativamente o quadrado 2 da Fig. 5.8(a). A adição de blocos sucessivos juntamente com o gráfico da intensidade da função de controle é mostrado

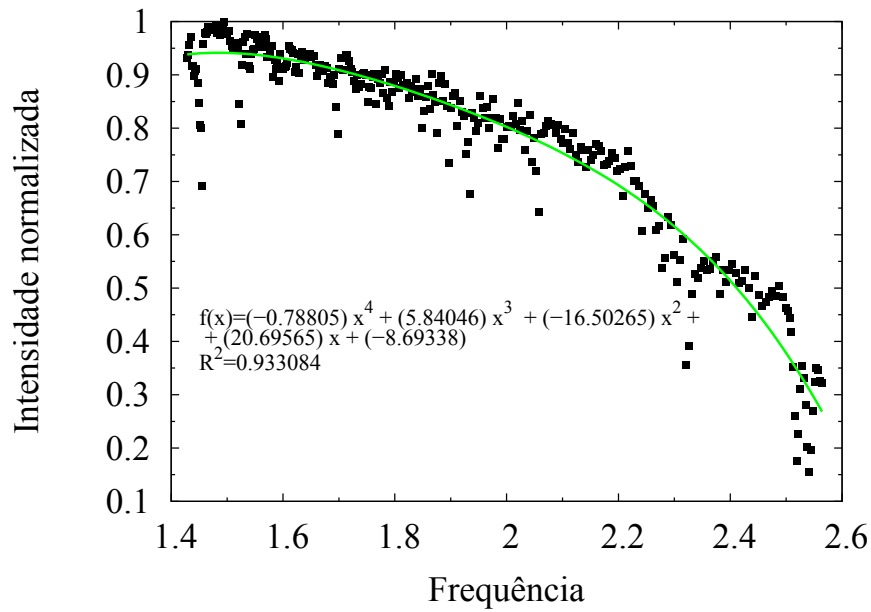
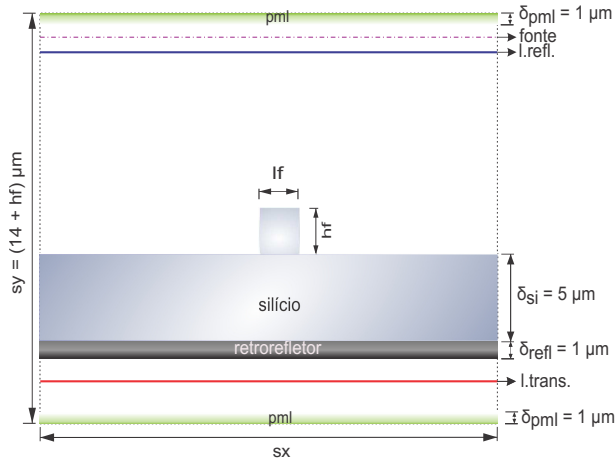


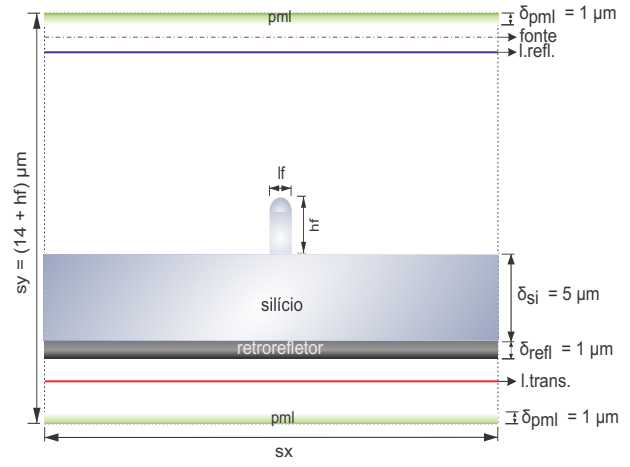
Figura 5.6 Curva polinomial ajustada aos dados experimentais do AM1.5G.

para dois passos sucessivos de otimização na Fig. 6.10(a-c). Esse processo é então realizado sucessivamente até alcançar o limite de área estipulado para o enxerto.

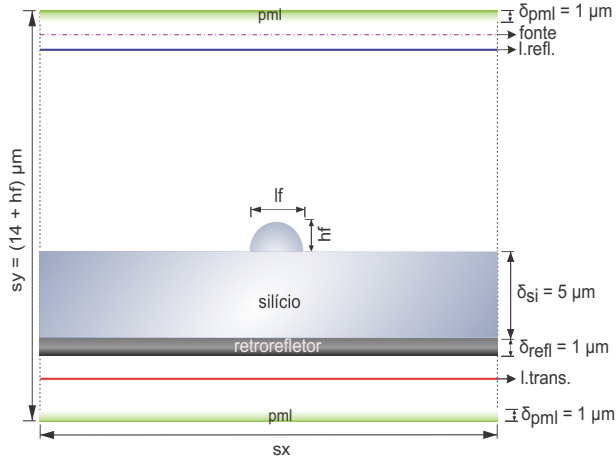
Foram implementados dois modos de otimização automática, um modo livre onde cada bloco é posicionado de acordo somente com o ponto de máximo na região ao redor do material dielétrico, e um segundo modo com a restrição de atingir o valor máximo de fotocorrente em uma determinada camada e então começar o crescimento inserindo blocos na camada seguinte.



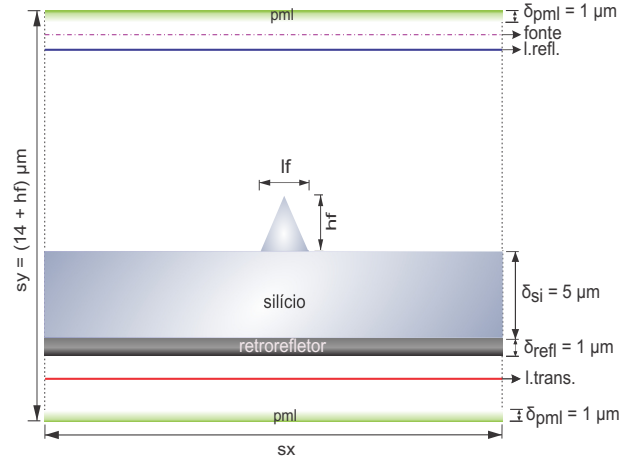
(a) Enxerto retangular.



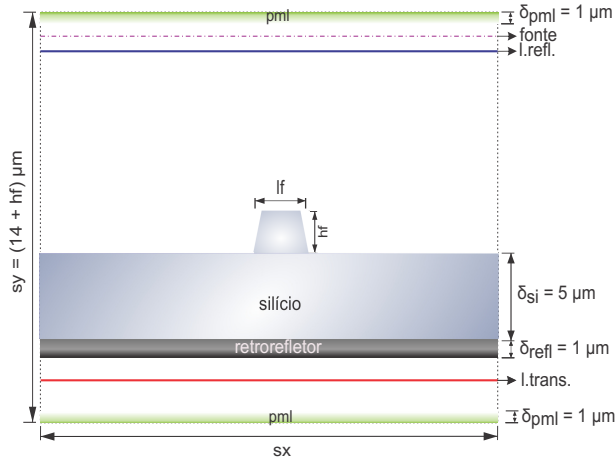
(b) Enxerto com extremidade circular.



(c) Enxerto elipsoidal.



(d) Enxerto triangular.



(e) Enxerto trapezoidal.

Figura 5.7 Diferente geometrias de enxertos testadas aplicando diferentes valores para os parâmetros hf e lf enquanto a área da seção transversal do enxerto foi mantida constante em $0.01 \mu\text{m}^2$ ou $0.1 \mu\text{m}^2$

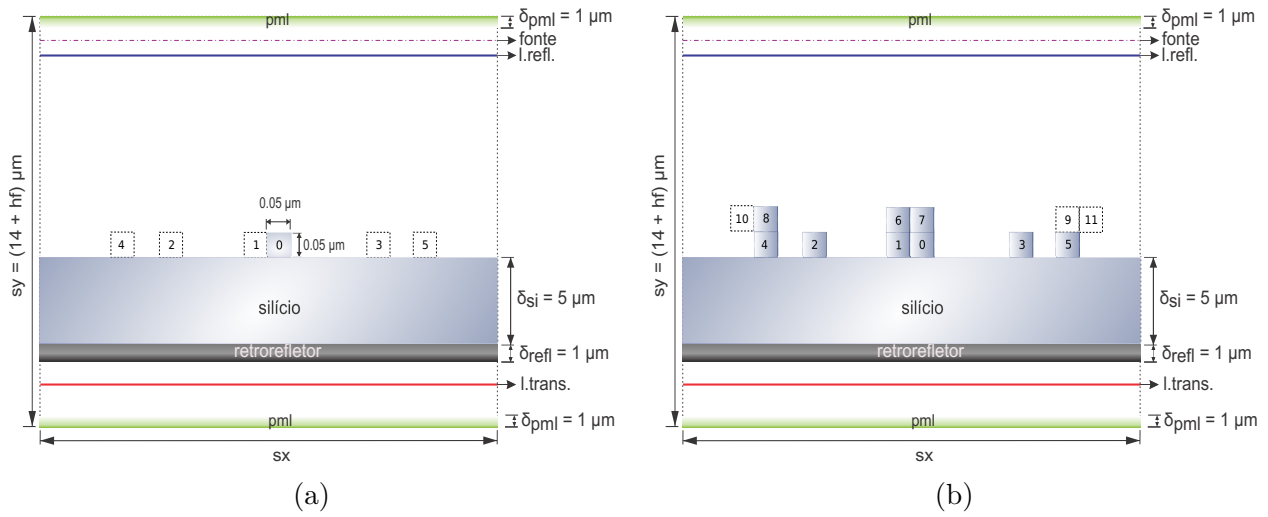


Figura 5.8 Ilustração da otimização automática usando blocos elementares de dimensões 50 nm x 50 nm, (a) mostra o começo da otimização para a primeira camada até o número ótimo de blocos nessa camada (ex.: 5 blocos) ; (b) otimização da segunda camada seguindo o mesmo procedimento.

6 CÓDIGO COMPUTACIONAL E PROCEDIMENTO DE SIMULAÇÃO

Após a descrição do modelo matemático e do modelo numérico que serão implementados nesse trabalho, essa seção visa mostrar como essas informações são integradas no código computacional de forma a realizar uma simulação significativa do ponto de vista da engenharia e da física do problema abordado. Inicialmente, é descrito o código computacional utilizado, o MEEP, assim como as ferramentas de pós-processamento utilizadas. Em seguida, é discutida a validação desse código para o problema de interesse, e, finalmente a descrição do processo de simulação incluindo a metodologia aplicada para calcular a performance das diferentes geometrias testadas e a descrição do algoritmo de otimização.

6.1 MEEP

Uma implementação gratuita e de código aberto do algoritmo de FDTD está presente no MEEP, um acrônimo para *MIT Electromagnetic Equation Propagation*. O pacote de software MEEP, é uma ferramenta completa, desenvolvida pela equipe do Instituto de Tecnologia de Massachusetts (MIT) e lançada inicialmente em 2006. Atualmente se mantém em desenvolvimento ativo. O FDTD no MEEP utiliza o método das diferenças centradas com precisão de segunda ordem. Entre suas capacidades, estão: diversas condições de contorno tais como camadas absorventes perfeitamente encaixadas (PML), condutores perfeitos e contornos periódicos de Bloch; a exploração de simetrias do domínio computacional para reduzir o trabalho computacional; paralelismo com memória distribuída; coordenadas cilíndricas e cartesianas (1D, 2D, 3D); flexibilidade na especificação dos meios materiais contando com permissividade elétrica ϵ e permeabilidade magnética μ arbitrárias e anisotrópicas, juntamente com funções de dispersão $\epsilon(\omega)$ e $\mu(\omega)$ e materiais magnéticos e dielétricos não-lineares, condutividades elétricas e magnéticas σ ; arquivos de saída flexíveis e computações de fluxo. Também inclui capacidades, pouco comuns mas que tornam o software muito poderoso em termos de precisão e flexibilidade. São elas análise de modos resonantes, média subpixel precisa, resolvido no domínio de frequências que explora o domínio do tempo e scriptabilidade completa podendo, além da linguagem nativa, Scheme, ser operado por scripts em C++ e Python (MEEP, 2016; OSKOOI et al., 2010).

A flexibilidade, maturidade e precisão além do fato de ser um pacote gratuito e de código aberto, levaram a escolha do MEEP como a ferramenta para as simulações computacionais para essa dissertação. Todas simulações, cujos resultados estão presentes nessa dissertação foram realizadas com MEEP versão 1.3 usando a própria linguagem nativa de programação do software, a linguagem Scheme e a linguagem Python nos algoritmos de pós-processamento.

Nos últimos anos, o uso do FDTD tem se popularizado para determinar a resposta de células solares já havendo inclusive iniciativas de especializar o software MEEP para esse tipo

de problema, como o programa adicional *MEEPPV* (*MEEP Photovoltaics*) uma prova da confiabilidade da técnica em fornecer resultados precisos e de relevância para o progresso na área de fotovoltaicos.

6.2 Verificação e validação do código computacional para estudo de células solares

O MEEP é um código FDTD versátil e poderoso para resolver problemas de eletromagnetismo. Porém, como em qualquer área onde a simulação é aplicada, é necessário comparar os resultados da simulação com dados experimentais a fim de validar o método e a implementação que estão sendo aplicados com a realidade. Esse procedimento já foi feito por vários autores que utilizaram o código MEEP para estudar dispositivos fotovoltaicos como células solares. Dentre esses autores, o trabalho de Lundgren et al. (2013) foi reproduzido para justificar o uso do MEEP no problema abordado nessa dissertação por tratar-se não somente do mesmo software, mas de um problema com similaridade geométrica e onde o silício é material base da célula solar. Ademais, o procedimento computacional é idêntico ao abordado nessa dissertação tratando da incidência perpendicular à superfície e usando o procedimento de *fitting* para tratar a relação de dispersão do silício.

No trabalho de Lundgren foram simuladas nanoflorestas de silício com formato cilíndrico com raio de 25 nm, altura de $2.33 \mu\text{m}$ e espaçamento de 100 nm correspondendo ao trabalho experimental de Garnett e Yang (2010). A geometria desse problema é ilustrada na Fig. 6.1.

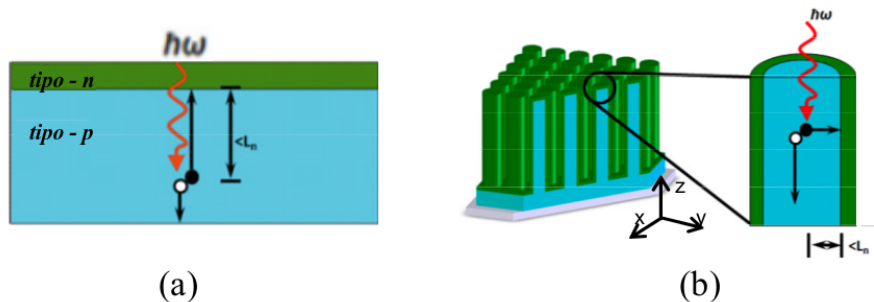


Figura 6.1 Ilustração do dispositivo testado experimental e usado para validação do código: (a) incidência da luz (b) substrato do dispositivo.

A curva de absorção foi calculada pontualmente no trabalho experimental de Lundgren et al. (2013), de forma que os autores compararam suas simulações usando o MEEP com os resultados de simulação TMM (*Transfer Matrix Method*) ou método de transferência de matriz calculados para o mesmo problema obtendo o espectro contínuo de absorção para o material em concordância com o trabalho experimental prévio. O método TMM é o procedimento de simulação mais completo para tratar a propagação de ondas eletromagnéticas em meios estratificados, porém o seu alto custo computacional dificulta a aplicação quando várias simulações são necessárias.

Os resultados obtidos por Lundgren com o MEEP em comparação com a simulação TMM são mostradas na Fig. 6.2. Pode-se observar a forte concordância entre os resultados, validando o MEEP e a forma como foi implementado para calcular a absorção em células solares texturizadas.

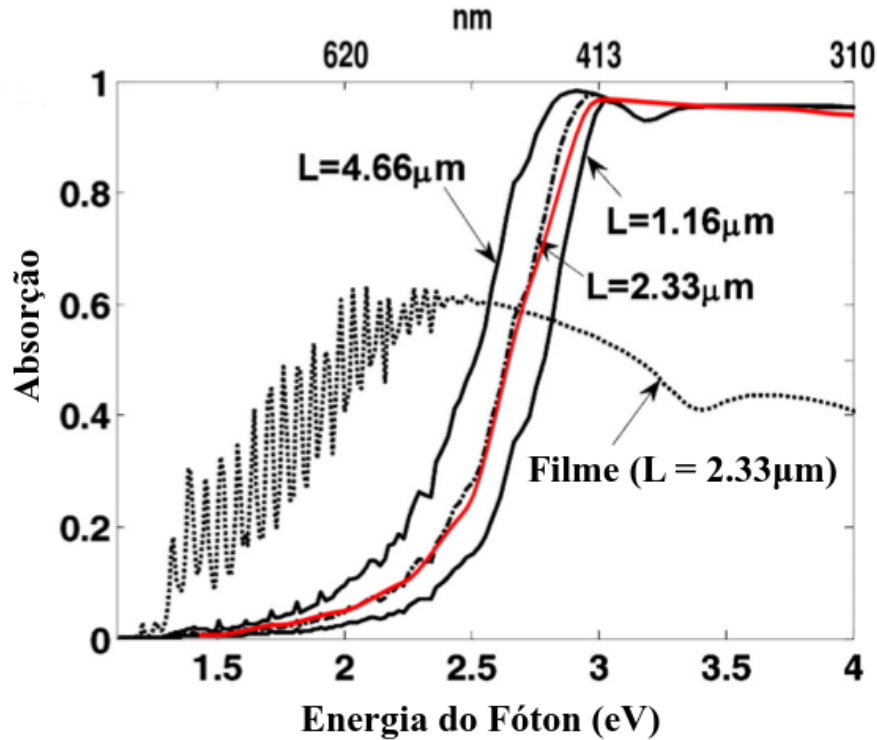


Figura 6.2 Espectro de absorção calculado por FDTD em comparação com o método TMM representando modelo experimental (vermelho). Fonte: LUNDGREN (2013)

O mesmo problema de Lundgren et al. (2013) foi reproduzido usando FDTD conforme implementado no MEEP e se obteve uma aproximação da mesma ordem da obtida por Lundgren conforme mostrado na Figura 6.3. Esse resultado mostra que o programa está sendo operado corretamente e que as implementações realizadas nas simulações para material e geometria não alteram a confiabilidade do resultado.

A fim de reforçar que a simulação é confiável também foi testada a capacidade do programa em reproduzir um dado puramente experimental como a refletividade do silício. A refletividade está intimamente relacionada aos índices de refração e de extinção (parte real e imaginária do índice de refração, respectivamente) e por isso a refletividade só é reproduzida se a implementação do material na simulação condiz com a realidade. Para realizar esse cálculo foi usado o modelo conforme descrito na seção 5.5 e a geometria mostrada na Fig. 5.4. A comparação do valor calculado para refletividade pela simulação e os dados experimentais (GREEN; KEEVERS, 1995) é mostrado na Fig. 6.4.

Na Fig. 6.4 observa-se que até um comprimento de onda de aproximadamente ≈ 800 nm a concordância com o resultado experimental é excepcionalmente boa, porém para valores de comprimento de onda maiores o modelo falha. Esse resultado é esperado pois as curvas

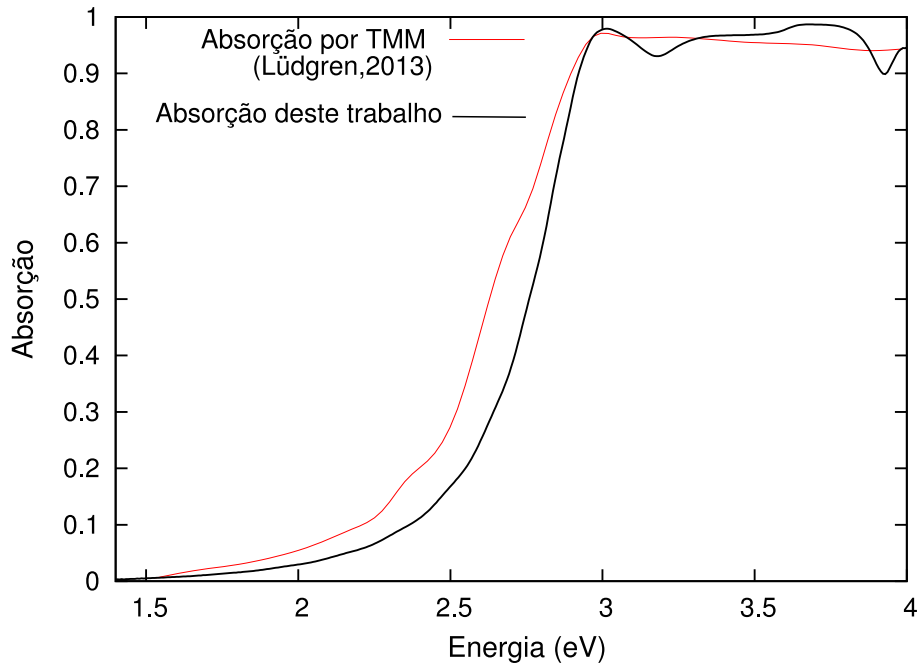


Figura 6.3 Cálculo de verificação por FDTD usando MEEP em comparação com o cálculo da literatura usando TMM (LUNDGREN et al., 2013).

da constante dielétrica foram ajustadas para corresponder a faixa do visível e como é nessa mesma faixa que as simulações desse trabalho se concentram essa discordância não influencia na precisão das simulações realizadas.

6.3 Ferramentas de pós-processamento: VISIT e Python

Para visualizar e extrair informações dos arquivos de saída na extensão *h5* contendo os campos eletromagnéticos, foi utilizado o software livre VISIT 2.12 de 2016. Desenvolvido pelo DOE (Department of Energy) para visualizar e analisar resultados de simulações o VISIT apresenta recursos que permitem personalizar escalas, imagens, animações, etc. Para realizar a otimização geométrica de forma automática a partir da Teoria Construtal, o arquivo dos campos eletromagnéticos foi pós-processado usando a linguagem de programação Python, em particular o pacote *h5py* que permite importação e edição de arquivos hierárquicos. A vantagem de usar o Python consiste na conversão dos dados numéricos do arquivo dos campos em uma matriz facilitando para determinar a posição para o crescimento da estrutura durante a otimização geométrica.

6.4 Procedimento de simulação

É possível dividir em três etapas principais o processo de realizar uma Modelagem Computacional, são eles: pré-processamento, processamento e pós-processamento. A seguir são definidas de forma sucinta estas etapas para esse trabalho.

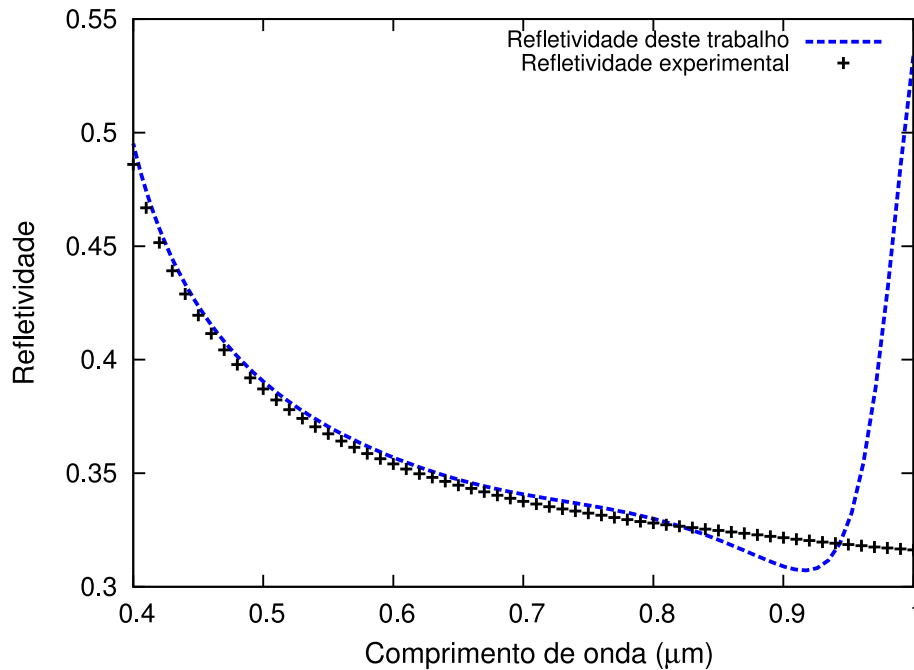


Figura 6.4 Cálculo de validação comparando dados experimentais de refletividade com a curva simulada através de FDTD implementado no MEEP.

O pré-processamento é a primeira fase da modelagem computacional onde o modelo do problema é representado dentro de um domínio computacional. Nessa etapa são definidas a geometria que irá representar a célula solar, especificados os materiais e também os parâmetros de simulação que serão usados pelo programa que resolve as equações de Maxwell discretizadas. Alguns parâmetros importantes são o espectro de frequências da fonte, a resolução da simulação, o passo de tempo e as propriedades dielétricas que determinam os materiais. Todas essas informações são passadas no script de inicialização do MEEP que pode ser escrito na linguagem Scheme ou Python (apêndices A e C).

O processamento é a realização da simulação numérica pelo software de FDTD uma vez que o domínio computacional assim como todos os parâmetros de simulação estão definidos. A fonte é ligada no começo da simulação de forma suave e a onda eletromagnética começa então a se propagar pelo domínio computacional integrando as equações discretizadas de Maxwell em passos de tempo apropriados. Apesar do domínio computacional ser discretizado na forma do retículo de Yee, o MEEP mantém a chamada ilusão de continuidade através de algoritmos de interpolação e cálculo de média de subpixels, dando um aspecto mais real a simulação e reduzindo consideravelmente a propagação de erros numéricos.

Uma vez realizada a simulação são gerados arquivos com os dados especificados no arquivo de inicialização. Os dados dos campos de interesse da simulação como a magnitude dos campos elétricos e magnéticos em determinados momentos especificados são salvos em arquivos hierarquicos com extensão *h5*. Esses arquivos podem ser convertidos em imagens coloridas de acordo com a magnitude dos campos ou abertos pelo software VISIT para extrair informações específicas de regiões do domínio. O próprio MEEP calcula os valores dos fluxos para cálculos de transmissão, reflexão e absorção acumulando as componentes de Fourier das ondas. Para

tanto, basta que as linhas de fluxo sejam especificadas no arquivo de inicialização. Logo, para ter os espectros desejados basta plotar os dados gerados no próprio arquivo de saída do MEEP.

6.5 Cálculo de performance relativa

A performance da célula solar texturizada é medida pelo valor da fotocorrente gerada total da célula calculadas, conforme explicado na seção 4.4, a partir do espectro de absorção de cada célula solar calculado pelo MEEP. O efeito da texturização na performance da célula solar é verificado a partir da razão entre a fotocorrente gerada total da célula solar com textura (J_{phi}) e sem textura (J_{ph0}), mantendo o mesmo volume de dielétrico seguindo a figura de mérito mostrada na Eq. 2.10. O aumento de performance é indicado nesse trabalho pela variável ξ seguindo a Eq. 6.1:

$$\xi = \frac{(J_{phi}) - J_{ph0}}{J_{ph0}} \times 100\%, \quad (6.1)$$

O valor de J_{ph0} varia conforme o volume de dielétrico na placa com textura. Como a seção transversal é sempre a mesma em todas as simulações o volume de dielétrico fica definido por um acréscimo da altura na placa de silício. Seja a área da seção transversal do enxerto que forma a textura dada por $A_{enxerto}$ então o acréscimo de altura, $\delta_{Si-extra}$ dado a placa de silício para representar a mesma área é dado por:

$$\delta_{Si-extra} = \frac{A_{enxerto}}{sx}, \quad (6.2)$$

onde sx é o período ou espaçamento entre os enxertos da célula.

Para melhor compreensão, é ilustrada na Fig. 6.5 a célula equivalente sem textura e o acréscimo de altura para comparar com uma célula solar enxertada. Foram calculados para diferentes valores de δ_{Si} a fotocorrente total gerada, produzindo o gráfico da Fig. 6.6 de onde são extraídos os valores de J_{ph0} equivalente para cada célula texturizada permitindo o cálculo de performance ξ adimensional em relação ao volume do dielétrico.

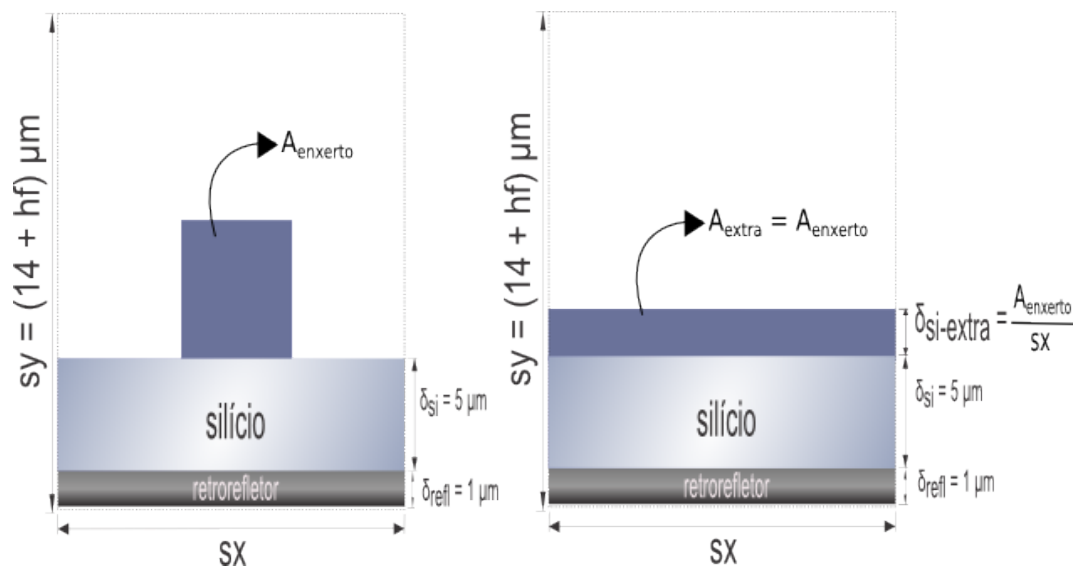


Figura 6.5 Ilustração da conversão de uma placa enxertada para uma placa plana com mesmo volume de material dielétrico.

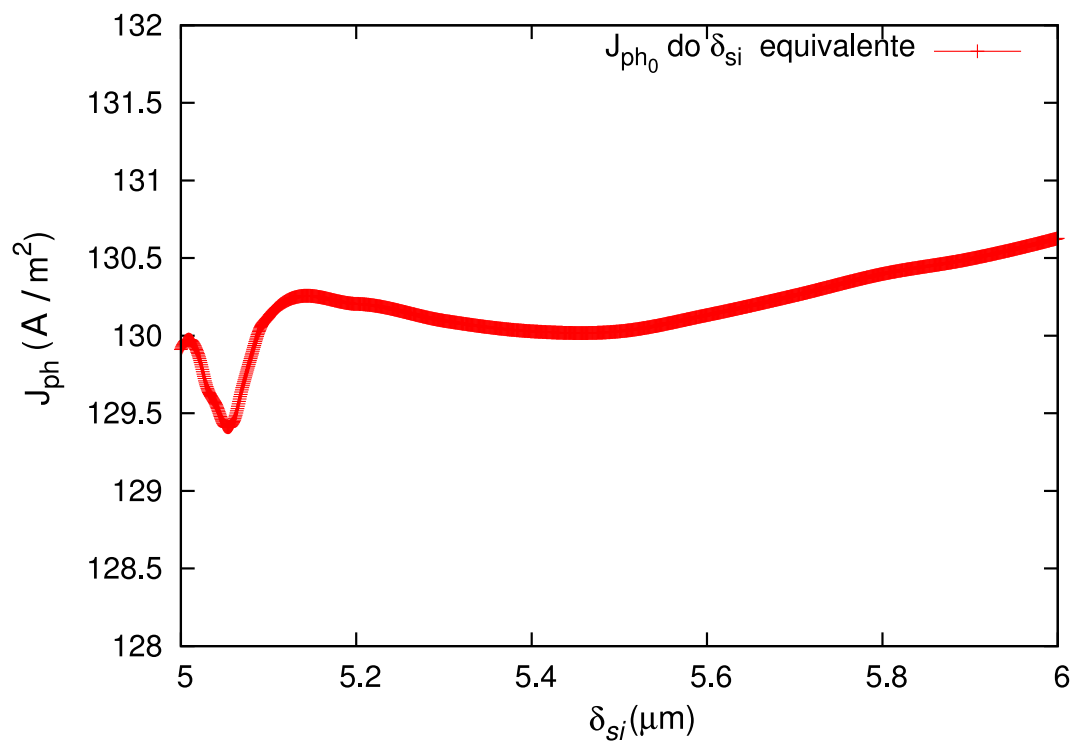


Figura 6.6 Gráfico da relação de δ_{Si} com J_{ph} para uma célula solar sem textura.

6.6 Algoritmo de otimização geométrica com restrição de forma

Conforme descrito na seção 5.5, foram implementadas cinco geometrias de enxerto para formar a textura das células solares simuladas. Para cada uma dessas geometrias é ilustrado na Fig. 5.7 o domínio computacional. Em um primeiro momento, foi otimizada a geometria do enxerto mantendo constante a área em $0.01 \mu\text{m}^2$ ou $0.1 \mu\text{m}^2$, enquanto a largura dos enxertos, lf , era modificada. Como a alteração da largura com área constante implica numa modificação da altura dos enxertos, hf , as duas variáveis estão acopladas. A simulação apresenta, portanto, dois graus de liberdade, a área do enxerto e sua largura (ou altura). O diagrama para essa otimização é apresentado na Fig. 6.7.

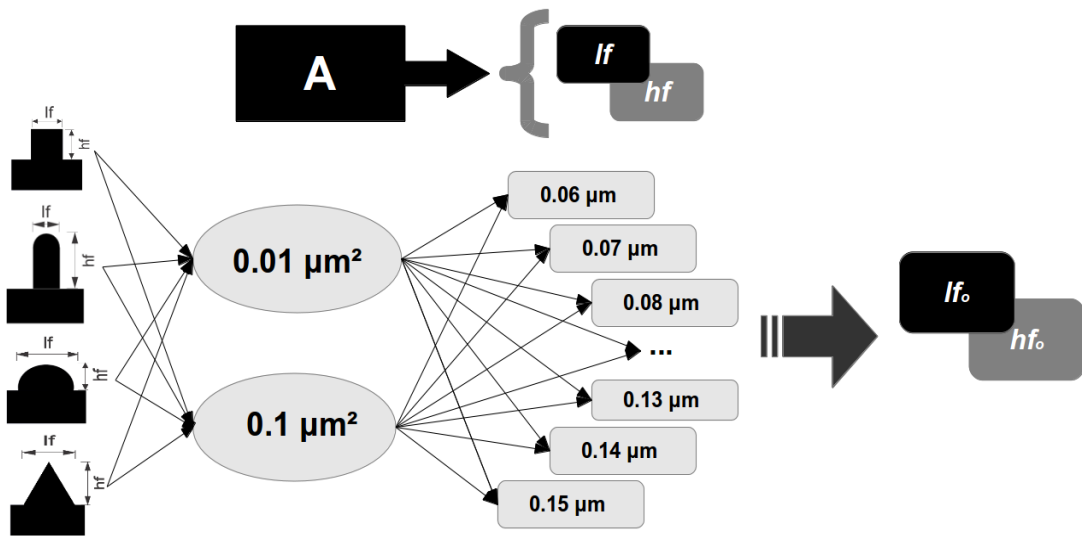


Figura 6.7 Diagrama de otimização geométrica com restrição de forma para os graus de liberdade A e $lf(hf)$.

Uma vez determinada a geometria ótima dos enxertos, variou-se o espaçamento entre os enxertos, a variável sx , para cada um dos enxertos ótimos encontrados na etapa anterior. Isto é, empregou-se um sistema de avaliação geométrica com memória. Esse foi o último grau de liberdade trabalhado na otimização e trabalhado de forma independente dos anteriores. Variou-se o valor de sx na faixa de $0.1 \mu\text{m}$ a $1 \mu\text{m}$ com passo de $0.1 \mu\text{m}$, conforme é mostrado no gráfico da Fig. 6.8

Finalmente, a geometria do trapézio foi otimizada *a posteriori* nesse trabalho devido a semelhança com a forma triangular. O ângulo de declive ótimo (α) do enxerto triangular foi transposto para a forma trapezoidal, presumindo não haver variação relevante entre o ângulo ótimo do triângulo e do trapézio. Dessa maneira, elimina-se um grau de liberdade da otimização do trapézio e é possível determinar a geometria somente com base na sua área (A) e largura ou altura (lf ou hf). Assim como nos outros enxertos, uma vez definido o formato ótimo para o enxerto trapezoidal, foram realizadas as simulações para determinar o sx ótimo no problema. A árvore de simulação para otimização dessa geometria é apresentada na Fig. 6.9.

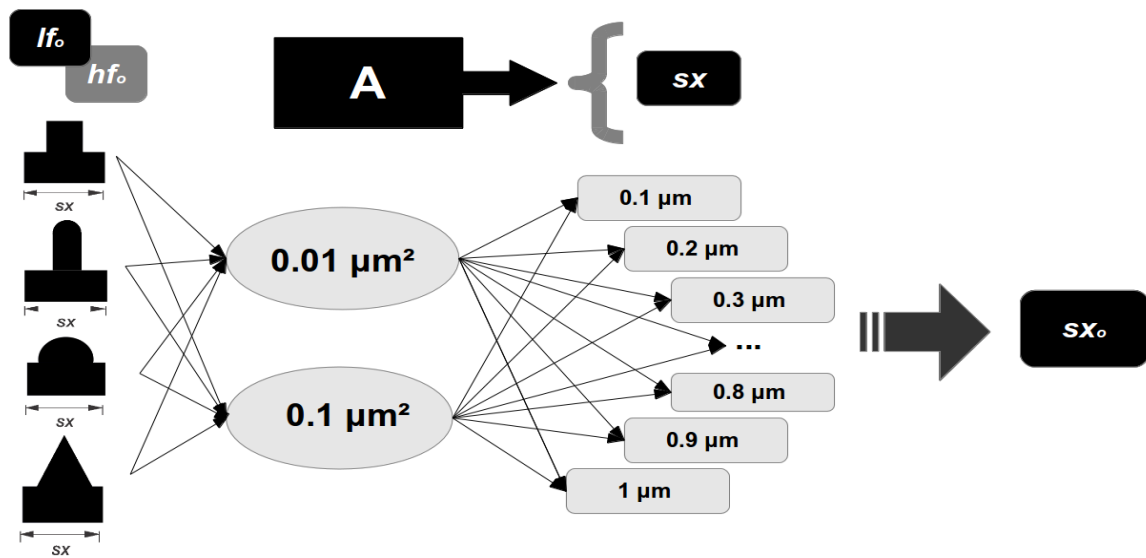


Figura 6.8 Diagrama de otimização geométrica com restrição de forma para o grau de liberdade sx para cada enxerto otimizado.).

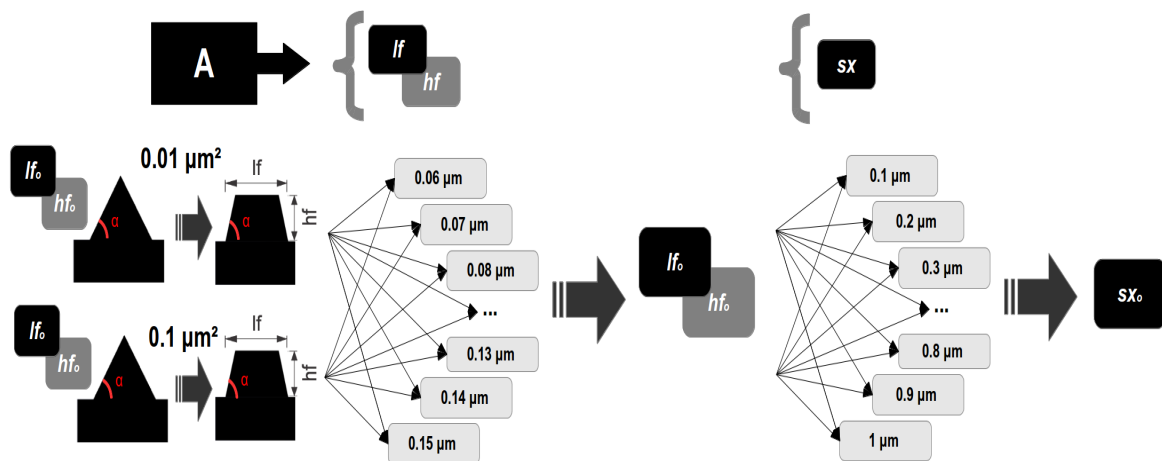


Figura 6.9 Diagrama de otimização geométrica com restrição de forma para o trapézio.).

6.7 Algoritmo de otimização geométrica automática

Na otimização geométrica automática, a função de controle Φ usada para otimização geométrica foi a energia total do campo eletromagnético representado por u_{EM} que é uma função de campo e pode ser usada para determinar a direção de crescimento da geometria. Essa quantidade é calculada pela soma da energia contida nos campos elétricos e magnéticos do sistema, conforme calculado pelo método de FDTD e mostrado na equação 6.3. Para garantir que os valores desses campos são representativos, o cálculo da energia é realizado somente quando é alcançado o regime estacionário, ou seja, não ocorrem mais variações significativas no campo de energia do sistema com o tempo.

$$\Phi = u_{EM} = \frac{1}{2} \left(\epsilon_0 [E(\mathbf{R}, t)]^2 + \frac{1}{\mu_0} [B(\mathbf{R}, t)]^2 \right) \quad (6.3)$$

O uso da energia total do campo eletromagnético como função de controle se deve a ξ (ou J_{ph}) não ser uma função de campo, mas um escalar que depende da geometria como um todo. Porém, é esperado que haja uma melhora de performance relativa (aumento de ξ) conforme a geometria é otimizada a partir de Φ , assim definido, pois esta quantidade está diretamente relacionada ao fluxo de energia na região.

A aplicação do algoritmo de otimização geométrica automática é demonstrada na Fig. 6.10 para otimizar uma geometria onde a forma inicial é um retângulo de dimensões $0.05 \mu m$ (lf) $\times$ $0.05 \mu m$ (hf). A cada passo de otimização geométrica, n_{otm} , o campo da função de controle é calculado quando o regime estacionário é alcançado e determina-se a coordenada onde Φ atinge seu valor máximo no substrato com cada textura. Essa posição onde o campo de energia atinge o valor máximo é determinada pelo algoritmo de pós-processamento em Python e então um novo roteiro de simulação é gerado para o próximo passo de otimização onde um novo retângulo, com as mesmas dimensões, é posicionado na posição de máximo anterior.

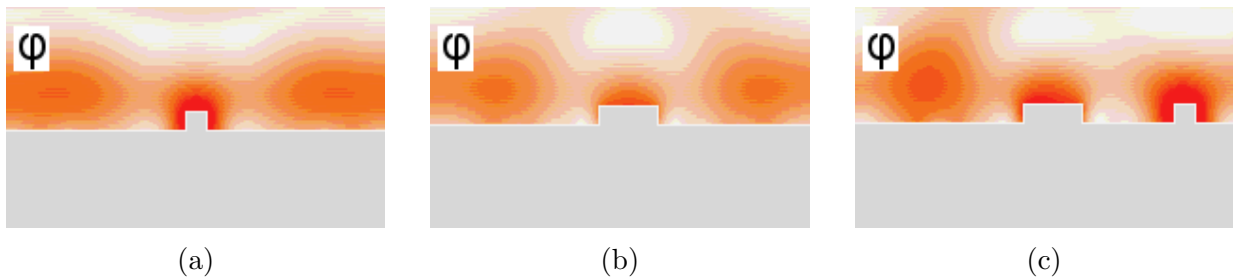


Figura 6.10 Campo da função de controle (Φ) para as texturas. (a), (b) e (c) mostram passos subsequentes da otimização geométrica automática onde a região de maior contraste indica a posição onde o próximo bloco será colocado.

É importante frisar que o algoritmo de pós-processamento não leva em conta pontos de máximo que não sejam adjacentes a espaços já preenchidos por material dielétrico. Dessa maneira a adição de blocos elementares em regiões sem conexão com a placa não acontece ficando de acordo com o esperado experimentalmente. As etapas dos algoritmo de otimização

geométrica automática são descritas no apêndice B e o *script* para o algoritmo de otimização automática livre está presente no apêndice C. As regiões de crescimento possível em uma célula solar genérica são mostradas na Fig. 6.11. Também foi testado o crescimento em camadas para avaliar se um resultado diferente era obtido, nesse caso é encontrado o melhor posicionamento de blocos por camada antes de iniciar o crescimento na camada seguinte.

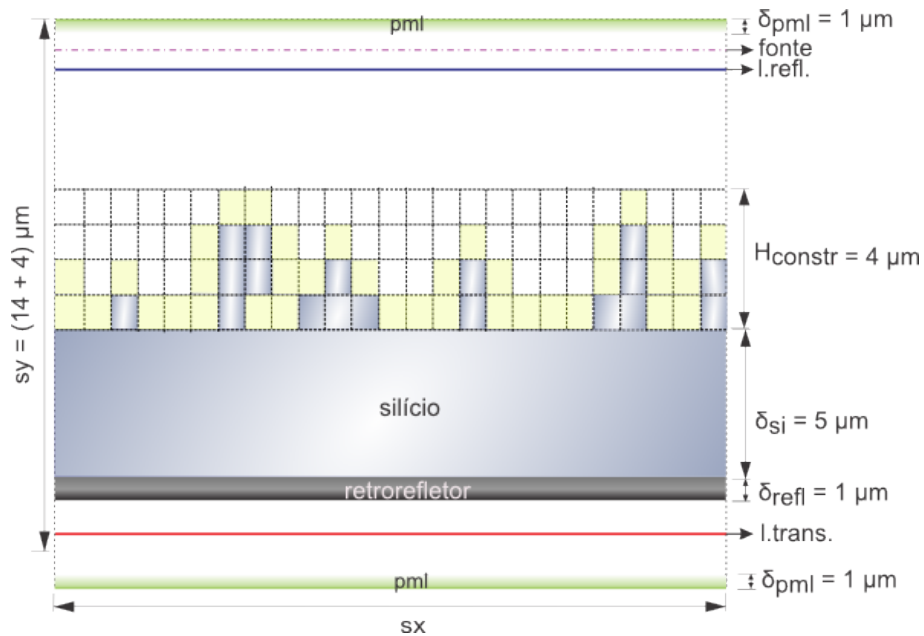


Figura 6.11 Ilustração dos possíveis pontos de crescimento, em amarelo, para uma célula solar hipotética usando o algoritmo construtal.

Após ter sido calculado o ponto de máximo que será posicionado o novo bloco, ainda na mesma simulação é realizado o cálculo de performance. Para isso é gerado um pulso gaussiano com as frequências de interesse para determinar os espectros de absorção e a partir desse espectro a fotocorrente total gerada J_{ph} e o aumento de performance relativa ξ da célula solar. O procedimento de cálculo para encontrar J_{ph} a partir dos dados da simulação já foi explicado na seção 4.4.

O efeito do tamanho do bloco elementar na geometria construída também foi verificado. Aplicou-se três diferentes tamanhos de bloco, que por consequência implicam em três simulações com resoluções diferentes. Foram usados blocos elementares de lado $0.025 \mu m$, $0.050 \mu m$ e $0.1 \mu m$, exigindo uma resolução de $400 \text{ px}/\mu m$, $200 \text{ px}/\mu m$ e $100 \text{ px}/\mu m$, respectivamente.

7 RESULTADOS

Nessa seção os resultados das simulações realizadas são apresentados e discutidos. Primeiramente, os resultados de otimização geométrica com restrição de forma, onde o efeito de cada variável geométrica é analisado nas diferentes geometrias de enxerto testadas. Foram testados enxertos de área total de $0.01 \mu\text{m}^2$ e $0.1 \mu\text{m}^2$. Logo são mostrados os cálculos com diferentes tamanhos de blocos elementares para a otimização automática com crescimento livre e finalmente para a otimização automática com crescimento por camadas. Em seguida, é abordada a eficiência do algoritmo construtal utilizado em determinar geometrias ótimas para a absorção da luz em células solares comparando com geometrias construídas aleatoriamente. Os *scripts* para otimização geométrica com restrição de forma e otimização automática livre estão inclusos nos apêndices A e C.

7.1 Otimização geométrica com restrição

Textura retangular: o domínio computacional, apresentado na Fig. 5.7(a), mostra os parâmetros que foram testados para um enxerto de forma retangular, são eles hf , lf e sx , mantendo a área da seção transversal do enxerto fixa em $0.01 \mu\text{m}^2$ ou $0.1 \mu\text{m}^2$. Os resultados mostrados na Fig. 7.1 indicam que valores pequenos para a largura do enxerto, que correspondem a uma maior altura do enxerto retangular produzem absorções maiores.

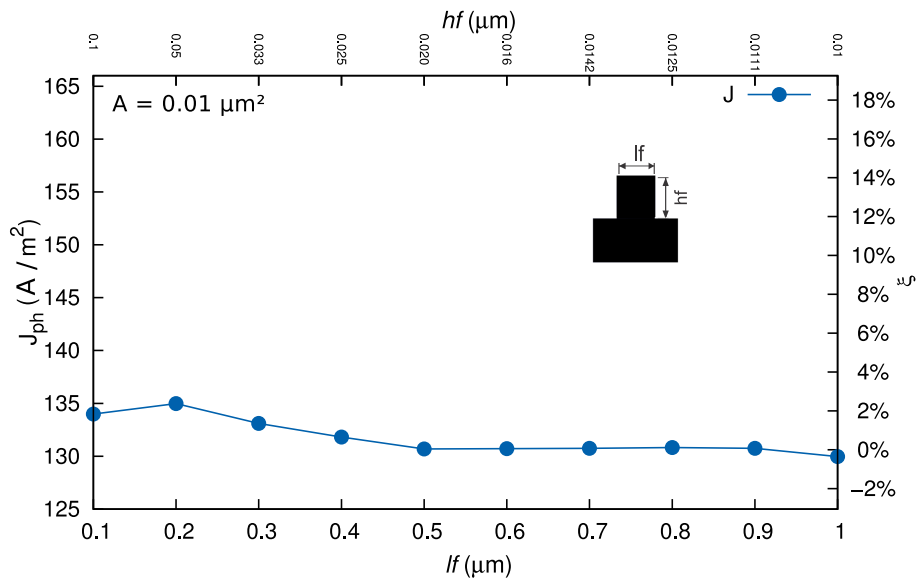


Figura 7.1 Eficiência das células com textura retangular de área $0.01 \mu\text{m}^2$ em função dos parâmetros geométricos hf e lf mantendo sx fixo em $1 \mu\text{m}$.

O melhor resultado para essa textura com $sx = 1 \mu\text{m}$ foi obtido com a combinação $hf = 0.05 \mu\text{m}$, $lf = 0.2 \mu\text{m}$ alcançando um $J = 134.9820 A/m^2$.

Logo, foi observado o efeito do espaçamento entre os enxertos que formam a textura variando o valor de sx , os resultados são mostrados no gráfico da Fig. 7.2. Pode-se observar que o efeito do espaçamento na performance da textura é sutil e o espaçamento de $0.4 \mu\text{m}$ produz o

melhor resultado com um valor de $J = 144.0784 \text{ A/m}^2$ e performance relativa correspondente de $\xi = 11.027\%$.

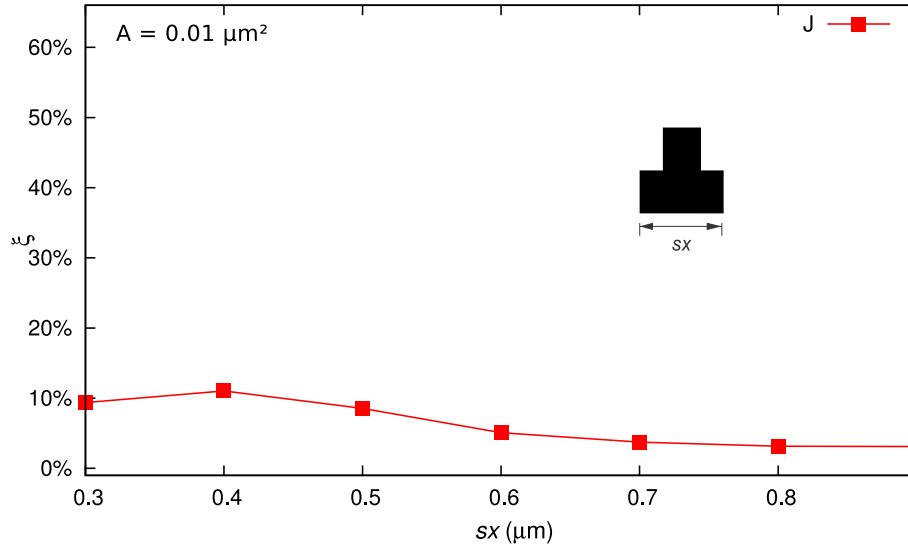


Figura 7.2 Efeito do espaçamento entre enxertos retangulares ($hf = 0.05 \mu\text{m}$, $lf = 0.2 \mu\text{m}$) de área $0.01 \mu\text{m}^2$ na performance relativa da célula solar.

O campo de energia para essa textura em passos de tempo sucessivos ($\Delta_t = 0.1 a/c$) é mostrado na Fig. 7.3 para um $sx = 1 \mu\text{m}$ e para o valor de espaçamento ótimo, $sx = 0.4 \mu\text{m}$ na Fig. 7.4.

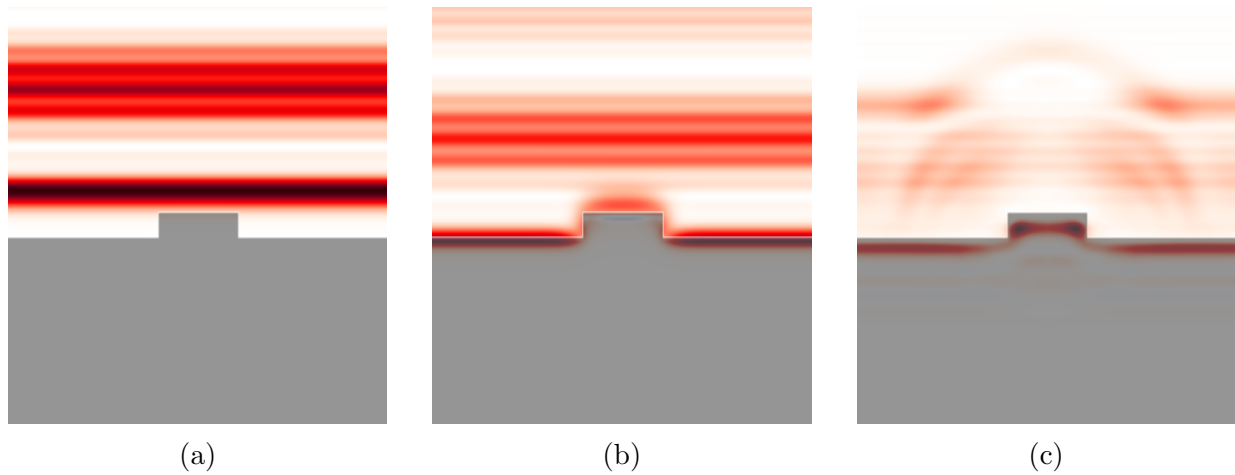


Figura 7.3 Campo da energia total para a textura retangular ($hf = 0.05 \mu\text{m}$, $lf = 0.2 \mu\text{m}$) de área $0.01 \mu\text{m}^2$ e $sx = 1 \mu\text{m}$ em passos de tempo sucessivos ($\Delta_t = 0.1 a/c$).

Esses cálculos foram então repetidos para um enxerto retangular de área $0.1 \mu\text{m}^2$ a fim de avaliar o efeito da área da seção transversal do enxerto (corresponde ao volume de dielétrico) na performance da célula solar. A melhor combinação das variáveis lf e hf foi $lf = 0.7 \mu\text{m}$ e $hf = 0.1428 \mu\text{m}$ enquanto o sx ótimo foi $1 \mu\text{m}$, conforme pode ser visto nos gráficos das Figs. 7.5 e 7.6. Os campos para a geometria ótima são mostrados na Fig. 7.7. A melhor performance

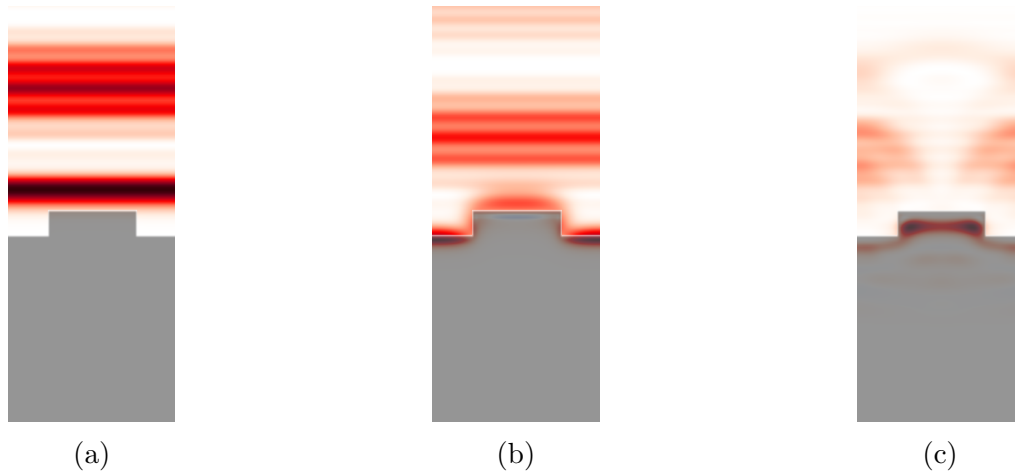


Figura 7.4 Campo da energia total para a textura retangular ($hf = 0.05 \mu\text{m}$, $lf = 0.2 \mu\text{m}$) de área $0.01 \mu\text{m}^2$ e $sx = 0.4 \mu\text{m}$ em passos de tempo sucessivos ($\Delta_t = 0.1 a/c$).

alcançada por essa textura foi de 144.0566 A/m^2 e performance relativa correspondente de $\xi = 10.708\%$.

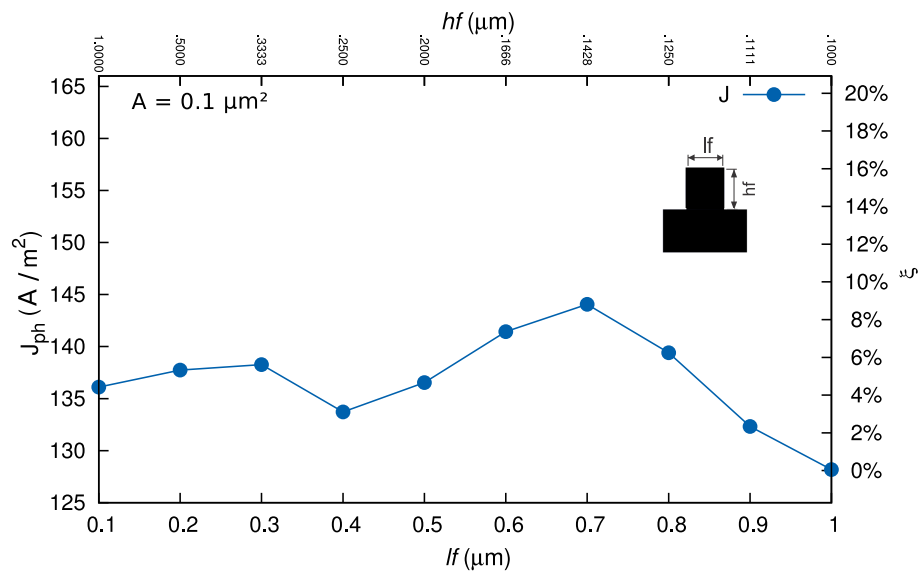


Figura 7.5 Eficiência das células com textura retangular de área $0.1 \mu\text{m}^2$ em função dos parâmetros geométricos hf e lf mantendo sx fixo em $1 \mu\text{m}$.

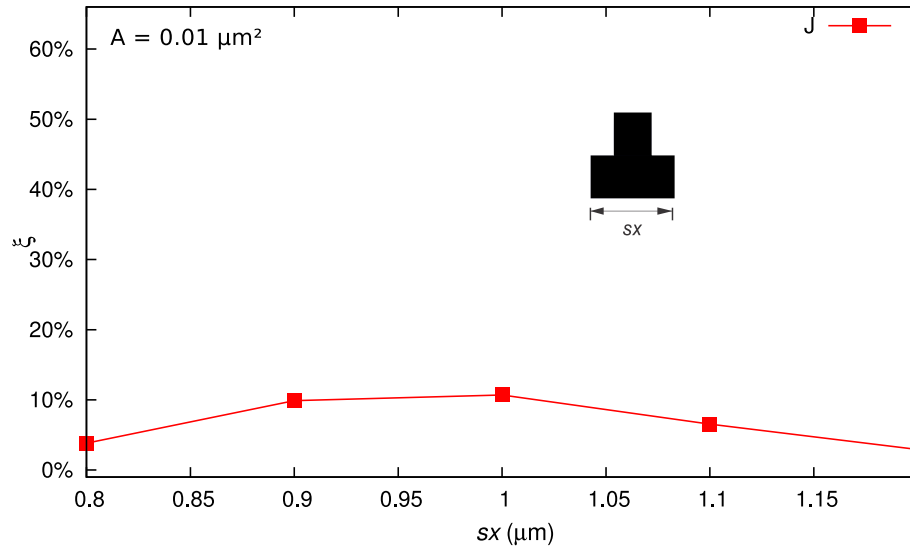


Figura 7.6 Efeito do espaçamento entre enxertos retangulares ($hf = 0.1428 \mu\text{m}$, $lf = 0.7 \mu\text{m}$) de área $0.1 \mu\text{m}^2$ na performance relativa da célula solar.

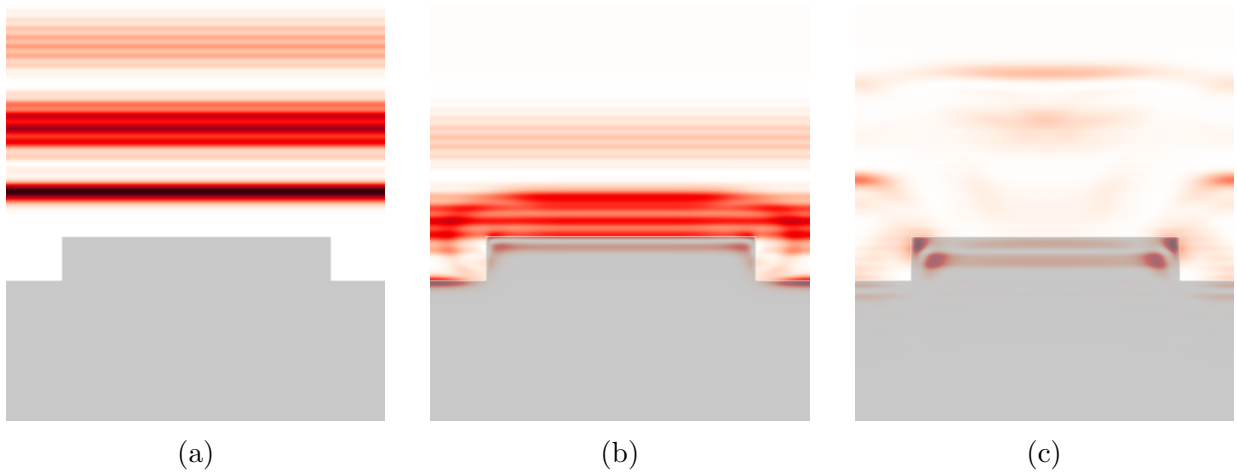


Figura 7.7 Campo da energia total para a textura retangular ($hf = 0.1428 \mu\text{m}$, $lf = 0.7 \mu\text{m}$) de área $0.1 \mu\text{m}^2$ e $sx = 1 \mu\text{m}$ em passos de tempo sucessivos ($\Delta_t = 0.1 a/c$).

Textura retangular com extremidade circular: o domínio computacional, apresentado na Fig. 5.7(b), mostra os parâmetros que foram testados para um enxerto retangular com extremidade circular, são eles hf , lf e sx , mantendo a área da seção transversal do enxerto fixa em $0.01 \mu\text{m}^2$ ou $0.1 \mu\text{m}^2$. Os resultados mostrados na Fig. 7.8 mostram que o efeito da largura da enxerto na performance não é grande mas apresenta um valor de máximo para um lf intermediário de $0.1 \mu\text{m}$.

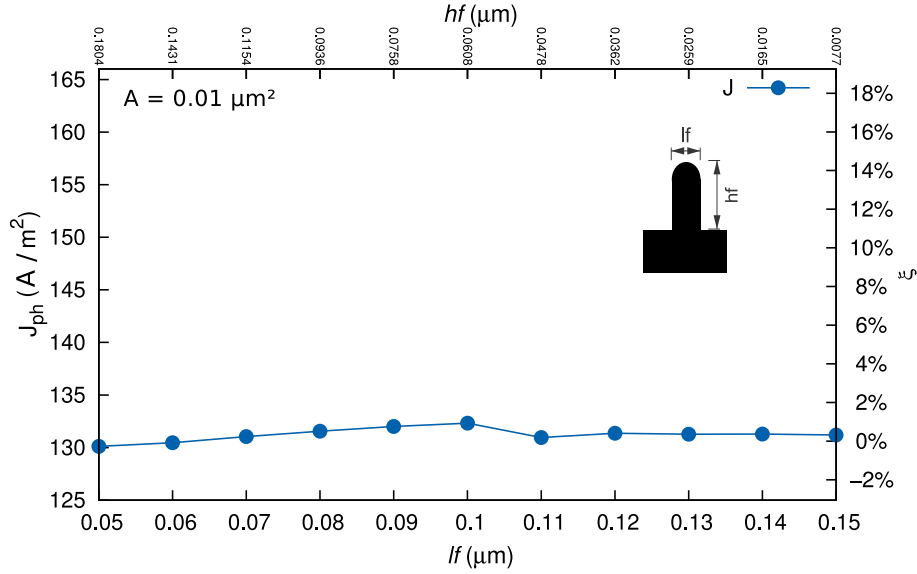


Figura 7.8 Eficiência das células com textura retangular e extremidade circular com área $0.01 \mu\text{m}^2$ em função dos parâmetros geométricos hf e lf mantendo sx fixo em $1 \mu\text{m}$.

O melhor resultado para essa textura com $sx = 1 \mu\text{m}$ foi obtido com a combinação $hf = 0.0608 \mu\text{m}$, $lf = 0.1 \mu\text{m}$ alcançando $J = 132.3187 A/m^2$. Logo, foi verificado o efeito do espaçamento entre os enxertos que formam a textura variando o valor de sx . Os resultados são mostrados no gráfico da Fig. 7.9. Pode-se observar que o valor do espaçamento entre os enxertos na absorção apresenta um valor máximo de $0.3 \mu\text{m}$ provavelmente devido a faixa de comprimentos de onda da luz incidente que para esse espaçamento produz um efeito de difração mais acentuado.

O campo de energia para essa textura em passos de tempo sucessivos ($\Delta_t = 0.1 a/c$) é mostrado na Fig. 7.10 para um $sx = 1 \mu\text{m}$ e para o valor de espaçamento ótimo, $sx = 0.3 \mu\text{m}$ na Fig. 7.11.

Esses cálculos foram então repetidos para a mesma geometria de enxerto com área $0.1 \mu\text{m}^2$ a fim de avaliar o efeito da área da seção transversal do enxerto (corresponde ao volume de dielétrico) na performance da célula solar. O melhor combinação das variáveis lf e hf foi $lf = 0.14 \mu\text{m}$ e $hf = 0.6593 \mu\text{m}$ enquanto o sx ótimo foi $0.4 \mu\text{m}$, conforme pode ser visto nos gráficos 7.12 e 7.13. A melhor performance alcançada por essa textura foi de $212.5589 A/m^2$ e performance relativa correspondente de $\xi = 63.306\%$. O campo de energia para essa textura em passos de tempo sucessivos ($\Delta_t = 0.1 a/c$) é mostrado na Fig. 7.14 para um $sx = 1 \mu\text{m}$ e para o valor de espaçamento ótimo, $sx = 0.4 \mu\text{m}$ na Fig. 7.15.

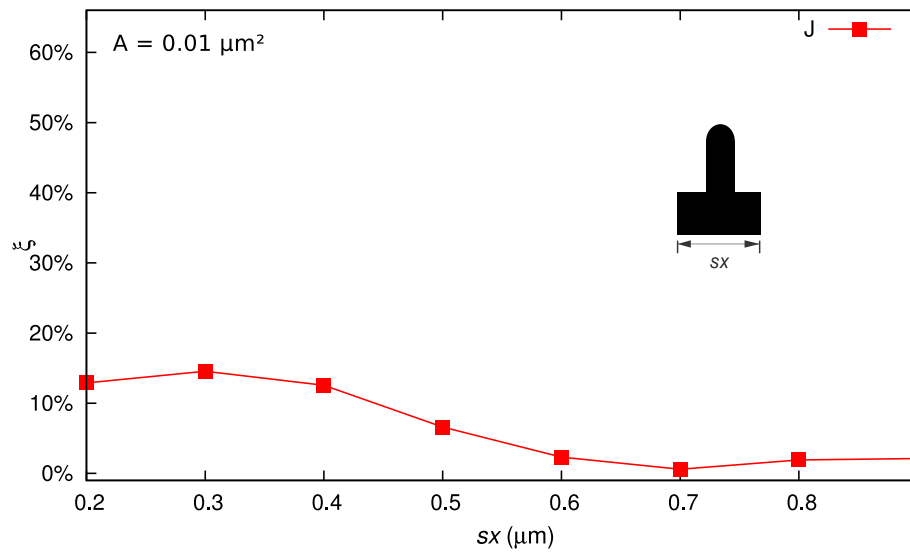


Figura 7.9 Efeito do espaçamento entre enxertos com pontas circulares ($hf = 0.0608 \mu\text{m}$, $lf = 0.1 \mu\text{m}$) com área $0.01 \mu\text{m}^2$ na performance relativa da célula solar.

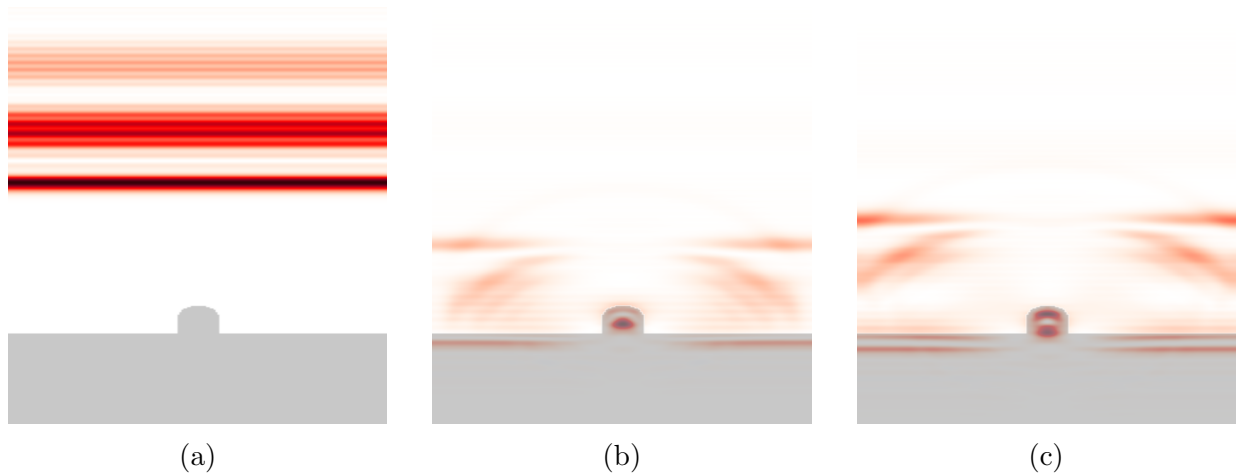


Figura 7.10 Campo da energia total para a textura retangular com extremidade circular ($hf = 0.0608 \mu\text{m}$, $lf = 0.1 \mu\text{m}$) de área $0.01 \mu\text{m}^2$ e $sx = 1 \mu\text{m}$ em passos de tempo sucessivos ($\Delta_t = 0.1 a/c$).

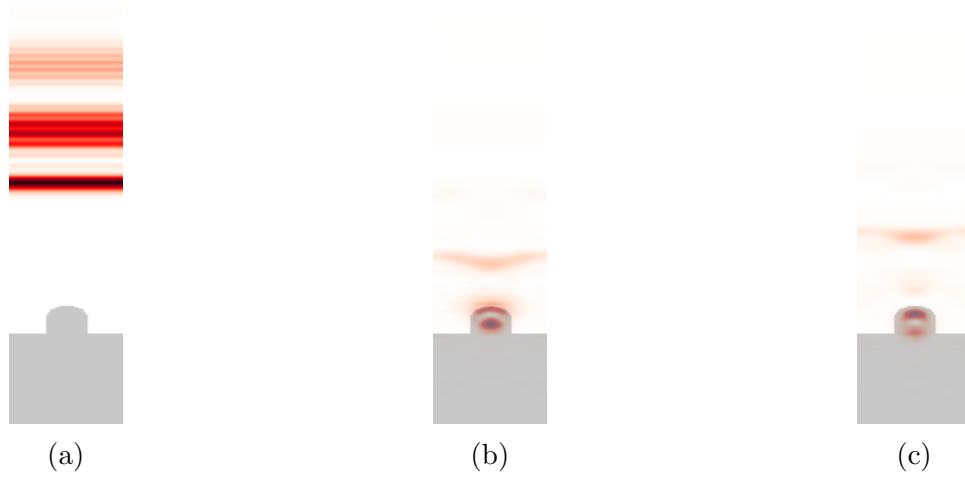


Figura 7.11 Campo da energia total para a textura retangular com extremidade circular ($hf = 0.0608 \mu\text{m}$, $lf = 0.1 \mu\text{m}$) de área $0.01 \mu\text{m}^2$ e $sx = 0.3 \mu\text{m}$ em passos de tempo sucessivos ($\Delta_t = 0.1 a/c$).

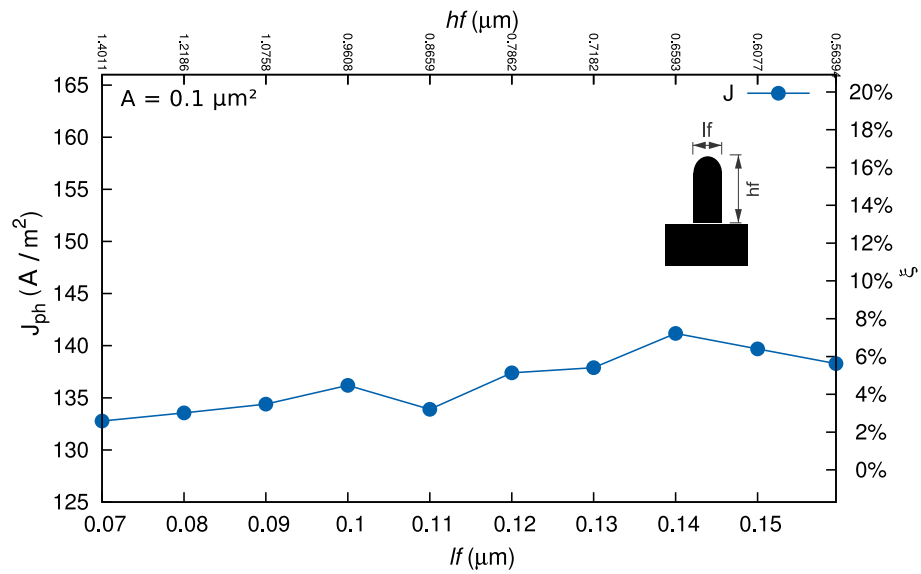


Figura 7.12 Eficiência das células com textura de extremidade circular de área $0.1 \mu\text{m}^2$ em função dos parâmetros geométricos hf e lf mantendo sx fixo em $1 \mu\text{m}$.

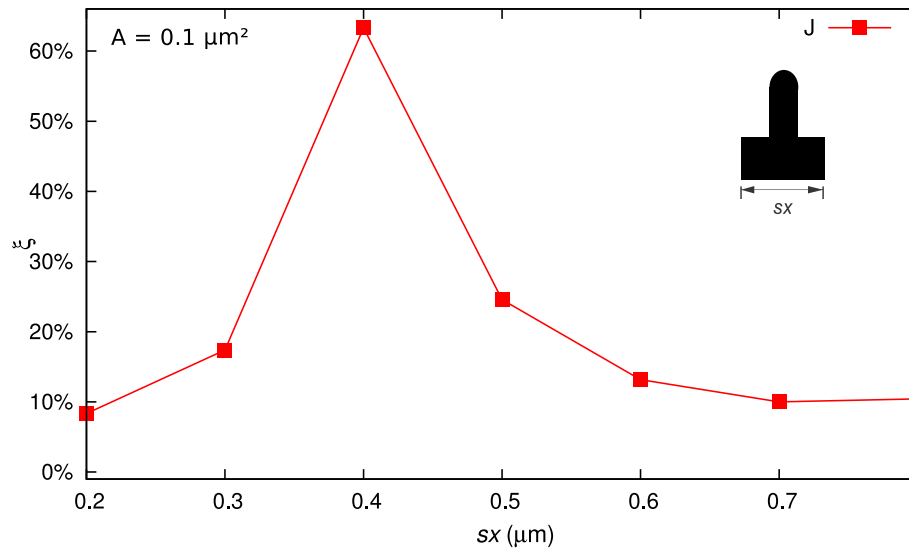


Figura 7.13 Efeito do espaçamento entre enxertos de extremidade circular ($hf = 0.6593 \mu\text{m}$, $lf = 0.14 \mu\text{m}$) de área $0.1 \mu\text{m}^2$ na performance relativa da célula solar.

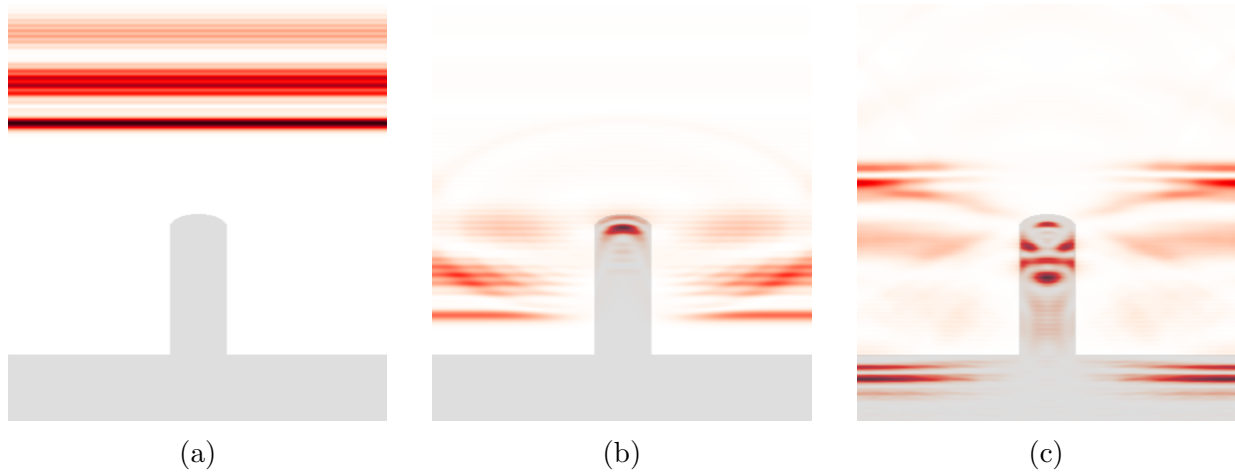


Figura 7.14 Campo da energia total para a textura retangular de extremidade circular ($hf = 0.6593 \mu\text{m}$, $lf = 0.14 \mu\text{m}$) de área $0.1 \mu\text{m}^2$ e $sx = 1 \mu\text{m}$ em passos de tempo sucessivos ($\Delta_t = 0.1 a/c$).

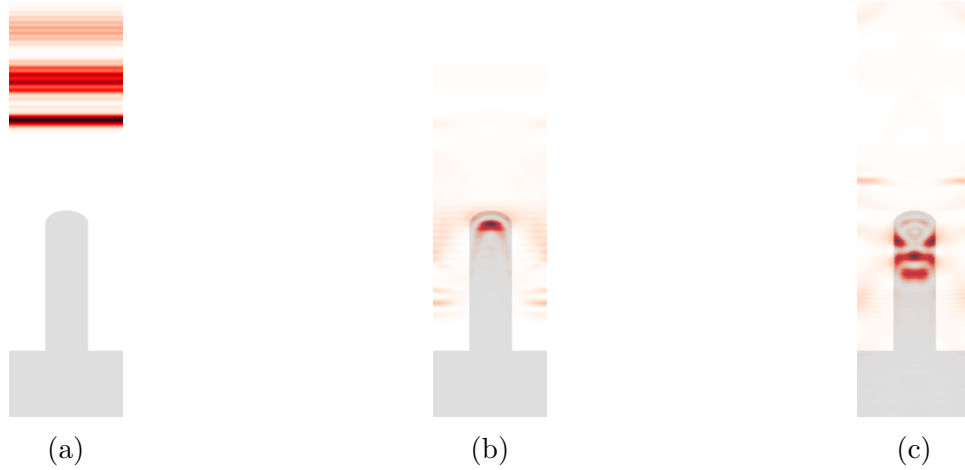


Figura 7.15 Campo da energia total para a textura retangular de extremidade circular ($hf = 0.6593 \mu\text{m}$, $lf = 0.14 \mu\text{m}$) de área $0.1 \mu\text{m}^2$ e $sx = 0.4 \mu\text{m}$ em passos de tempo sucessivos ($\Delta_t = 0.1 a/c$).

Textura elipsoidal: o domínio computacional, apresentado na Fig. 5.7(c), mostra os parâmetros que foram testados para um enxerto de forma elipsoidal. São eles hf , lf e sx , mantendo a área da seção transversal do enxerto fixa em $0.01 \mu\text{m}^2$ ou $0.1 \mu\text{m}^2$. Os resultados mostrados na Fig. 7.16 mostram que para o enxerto elipsoidal ocorre um ponto de máximo para pequenas larguras do enxerto (correspondem às maiores alturas testadas)

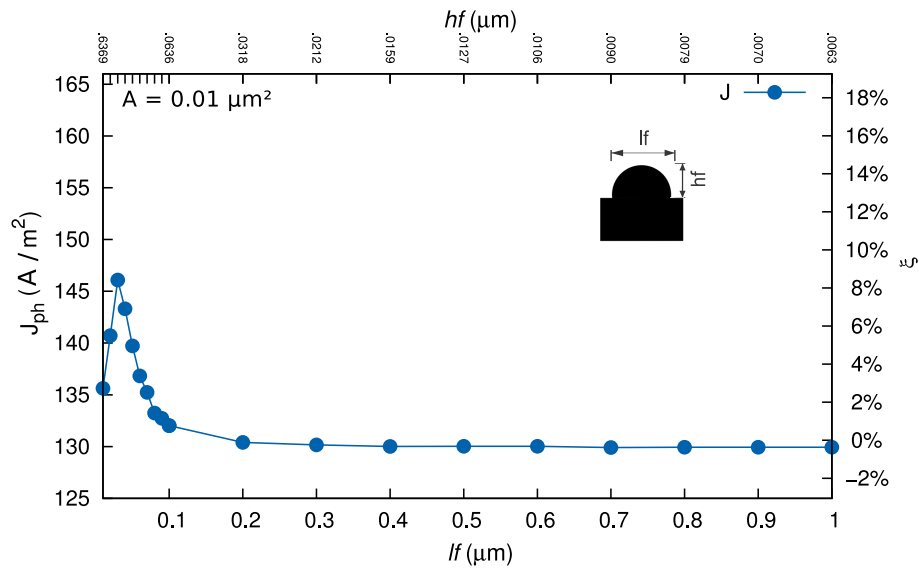


Figura 7.16 Eficiência das células com textura elipsoidal de área de enxerto $0.01 \mu\text{m}^2$ em função dos parâmetros geométricos hf e lf mantendo sx fixo em $1 \mu\text{m}$.

O melhor resultado para essa textura com $sx = 1 \mu\text{m}$ foi obtido com a combinação $hf = 0.2123 \mu\text{m}$, $lf = 0.06 \mu\text{m}$ e $J = 136.8303 A/m^2$. Logo, foi verificado o efeito do espaçamento entre os enxertos que formam a textura variando o valor de sx , os resultados são mostrados no gráfico da Fig. 7.17. Pode-se observar que o efeito do espaçamento dos enxertos na absorção é relevante e um ponto de máximo ocorre em $0.3 \mu\text{m}$ que pode-se atribuir a um efeito de difração mais intenso e construtivo da luz incidente.

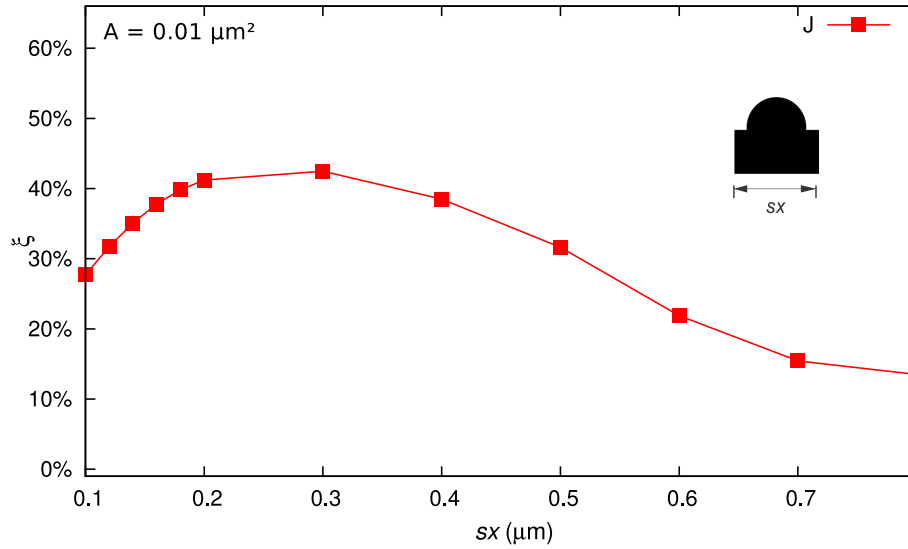


Figura 7.17 Efeito do espaçamento entre enxertos elipsoidais ($hf = 0.2123 \mu\text{m}$, $lf = 0.06$) na performance relativa da célula solar.

O melhor resultado de espaçamento para essa textura foi obtido $sx = 0.3 \mu\text{m}$ alcançando um valor de $J = 184.6642 \text{ A/m}^2$ correspondendo a uma performance relativa de $\xi = 42.465\%$. O campo de energia para essa textura em passos de tempo sucessivos ($\Delta_t = 0.1 a/c$) é mostrado na Fig. 7.18 para um $sx = 1 \mu\text{m}$ e para o valor de espaçamento ótimo, $sx = 0.3 \mu\text{m}$ na Fig. 7.19.

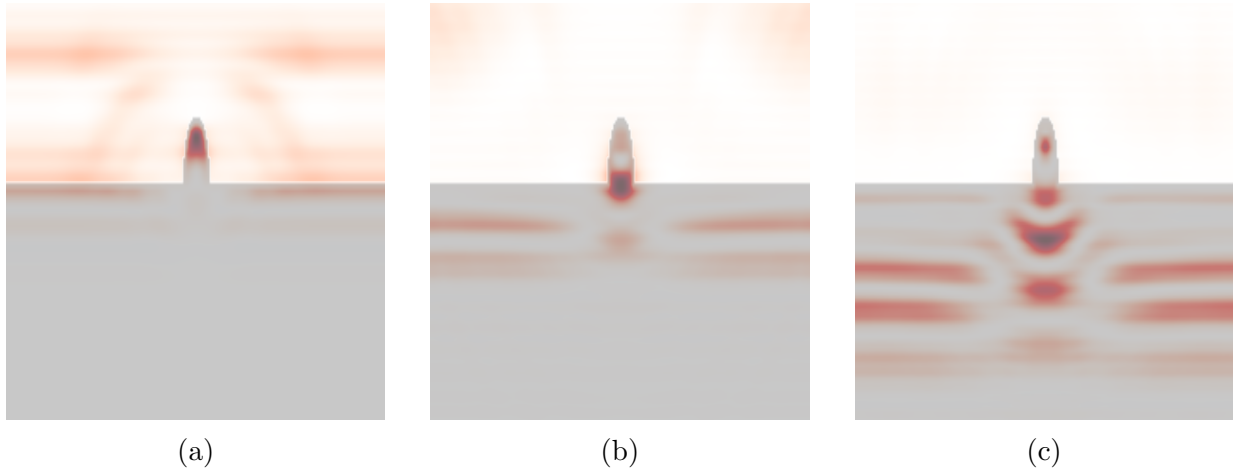


Figura 7.18 Campo da energia total para a textura elipsoidal ($hf = 0.2123 \mu\text{m}$, $lf = 0.06$) de área $0.01 \mu\text{m}^2$ e $sx = 1 \mu\text{m}$ em passos de tempo sucessivos ($\Delta_t = 0.1 a/c$).

Esses cálculos foram então repetidos para a mesma geometria de enxerto com área $0.1 \mu\text{m}^2$ a fim de determinar o efeito da área da seção transversal do enxerto (corresponde ao volume de dielétrico) na performance da célula solar. A melhor combinação das variáveis lf e hf foi $lf = 0.08 \mu\text{m}$ e $hf = 1.5917 \mu\text{m}$ enquanto o sx ótimo permaneceu $0.3 \mu\text{m}$, conforme pode ser visto nos gráficos 7.20 e 7.21. A melhor performance alcançada por essa textura foi de 192.0598 A/m^2 e performance relativa correspondente de $\xi = 47.661\%$. O campo de energia para essa

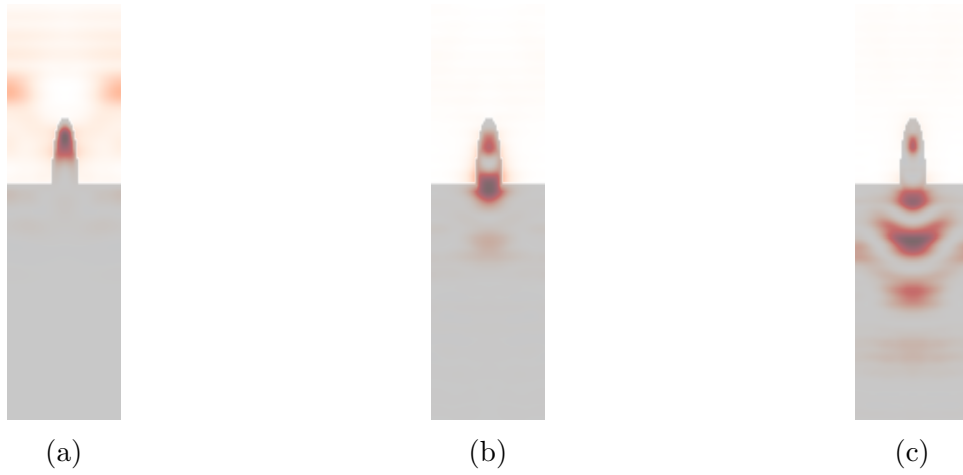


Figura 7.19 Campo da energia total para a textura elipsoidal ($hf = 0.2123 \mu\text{m}$, $lf = 0.06$) de área $0.01 \mu\text{m}^2$ e $sx = 0.3 \mu\text{m}$ em passos de tempo sucessivos ($\Delta_t = 0.1 a/c$).

textura em passos de tempo sucessivos ($\Delta_t = 0.1 a/c$) é mostrado na Fig. 7.22 para um $sx = 1 \mu\text{m}$ e para o valor de espaçamento ótimo, $sx = 0.3 \mu\text{m}$ na Fig. 7.23.

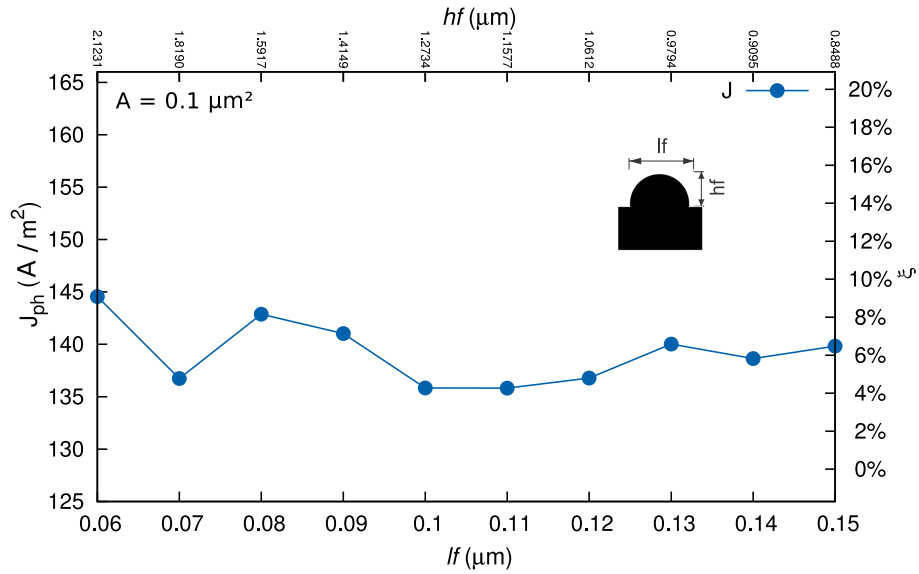


Figura 7.20 Eficiência das células com textura elipsoidal de área $0.1 \mu\text{m}^2$ em função dos parâmetros geométricos hf e lf mantendo sx fixo em $1 \mu\text{m}$.

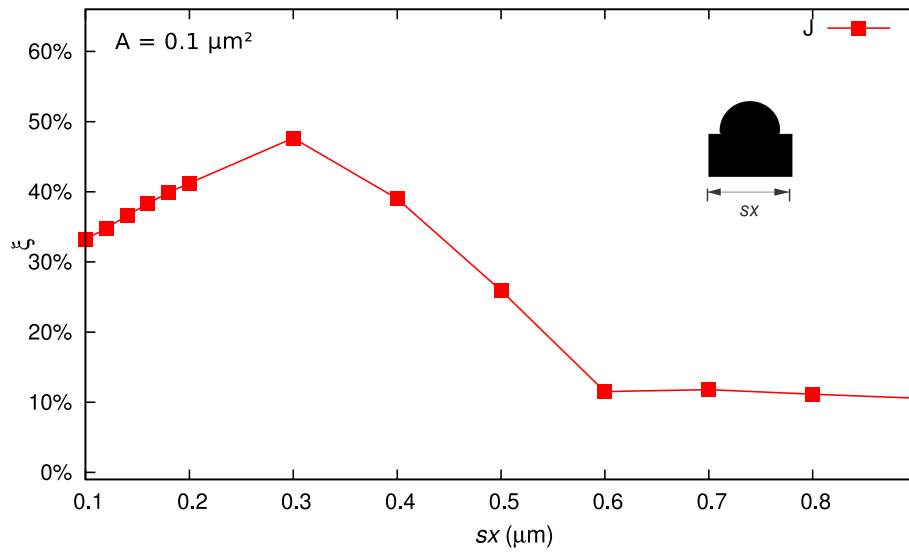


Figura 7.21 Efeito do espaçamento entre enxertos elipsoidais ($hf = 1.5917 \mu m$, $lf = 0.08 \mu m$) de área $0.1 \mu m^2$ na performance relativa da célula solar.

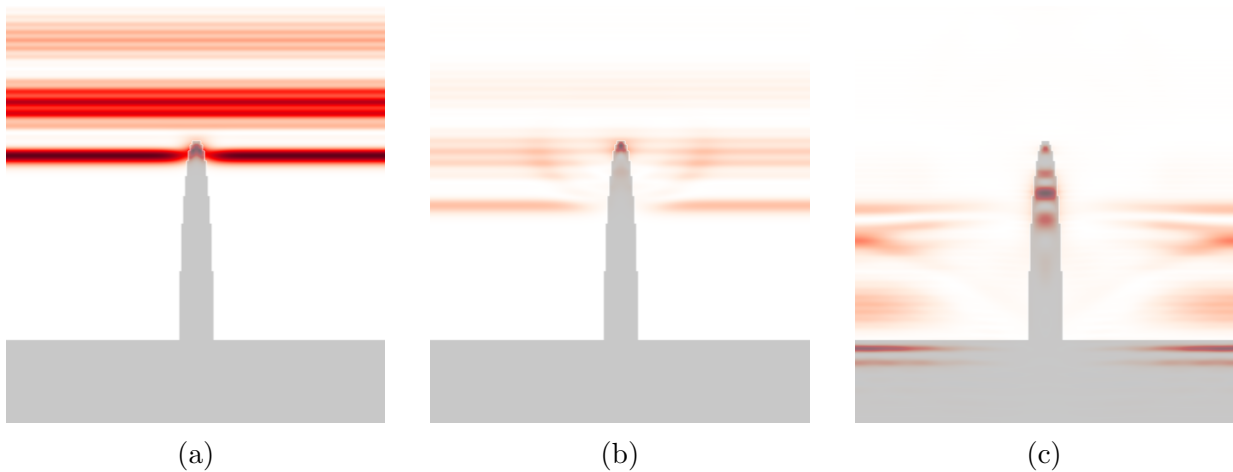


Figura 7.22 Campo da energia total para a textura elipsoidal ($hf = 1.5917 \mu m$, $lf = 0.08 \mu m$) de área $0.1 \mu m^2$ e $sx = 1 \mu m$ em passos de tempo sucessivos ($\Delta_t = 0.1 a/c$).

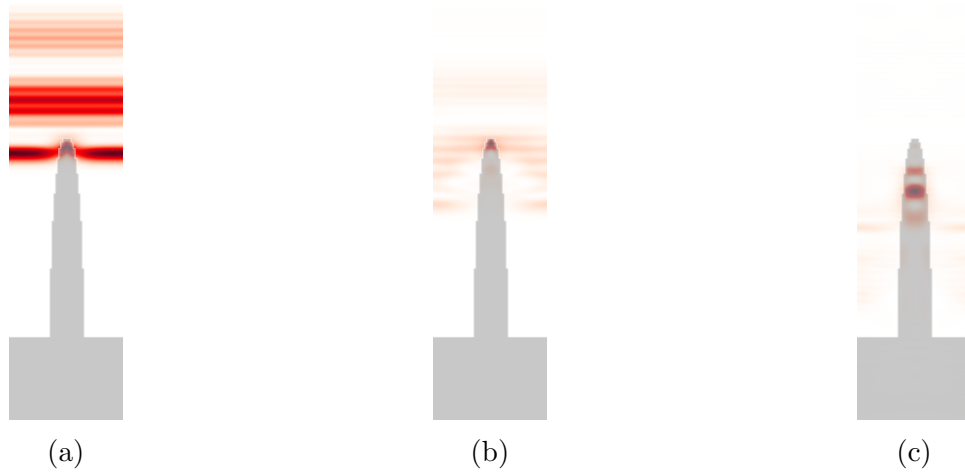


Figura 7.23 Campo da energia total para a textura elipsoidal ($hf = 1.5917 \mu\text{m}$, $lf = 0.08 \mu\text{m}$) de área $0.1 \mu\text{m}^2$ e $sx = 0.3 \mu\text{m}$ em passos de tempo sucessivos ($\Delta_t = 0.1 a/c$).

Textura triangular:

o domínio computacional, apresentado na Fig. 5.7(d), mostra os parâmetros que foram testados para um enxerto de forma triangular. São eles hf , lf e sx , mantendo a área da seção transversal do enxerto fixa em $0.01 \mu\text{m}^2$ ou $0.1 \mu\text{m}^2$. Os resultados mostrados na Fig. 7.24 mostram que a absorção da textura aumenta quando a largura do enxerto diminui correspondendo a um aumento da sua altura.

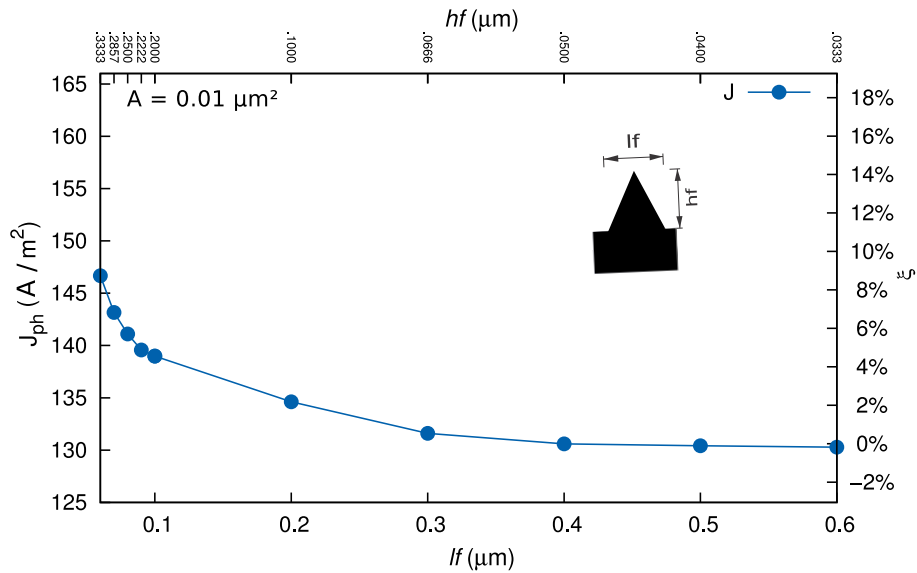


Figura 7.24 Eficiência das células com textura triangular em função dos parâmetros geométricos hf e lf mantendo sx fixo em $1 \mu\text{m}$.

O melhor resultado para essa textura com $sx = 1 \mu\text{m}$ foi obtido com a combinação $hf = 0.33 \mu\text{m}$, $lf = 0.06 \mu\text{m}$ e $J = 146.6719 A/m^2$. Logo, foi verificado o efeito do espaçamento entre os enxertos que formam a textura variando o valor de sx . Os resultados são mostrados no gráfico da Fig. 7.25. Pode-se observar que o efeito do espaçamento na textura apresenta um máximo entre os valores testados para um $sx = 0.3 \mu\text{m}$.

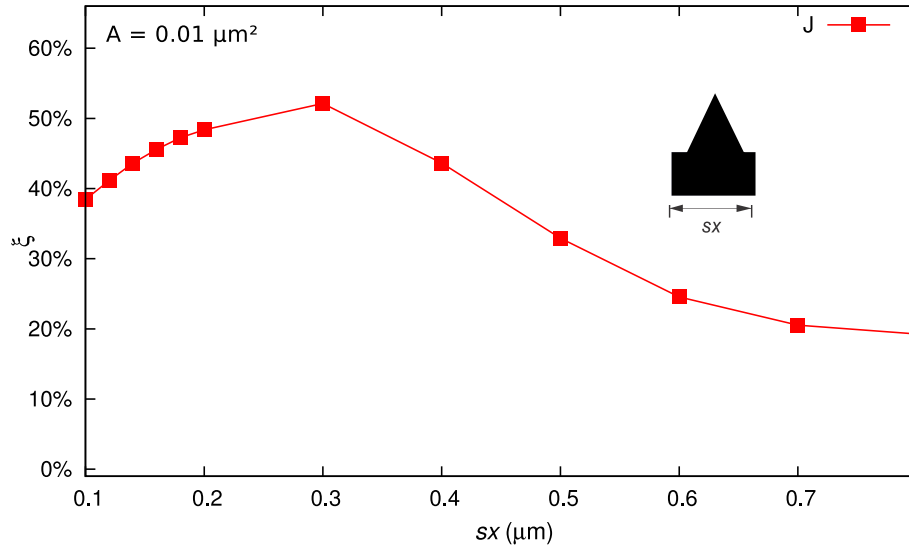


Figura 7.25 Efeito do espaçamento entre enxertos triangulares de área $0.01 \mu\text{m}^2$ ($hf = 0.4 \mu\text{m}$, $lf = 0.05 \mu\text{m}$) na performance relativa da célula solar.

O melhor resultado de espaçamento foi $sx_o = 0.3 \mu\text{m}$ alcançando um valor de $J = 197.1756 \text{ A/m}^2$ com um aumento de performance relativa correspondente de $\xi = 52.117\%$. O campo de energia para essa textura em diferentes passos de tempo é mostrado na Fig. 7.26 para um $sx = 1 \mu\text{m}$ e para o valor de espaçamento ótimo, $sx = 0.3 \mu\text{m}$ na Fig. 7.27.

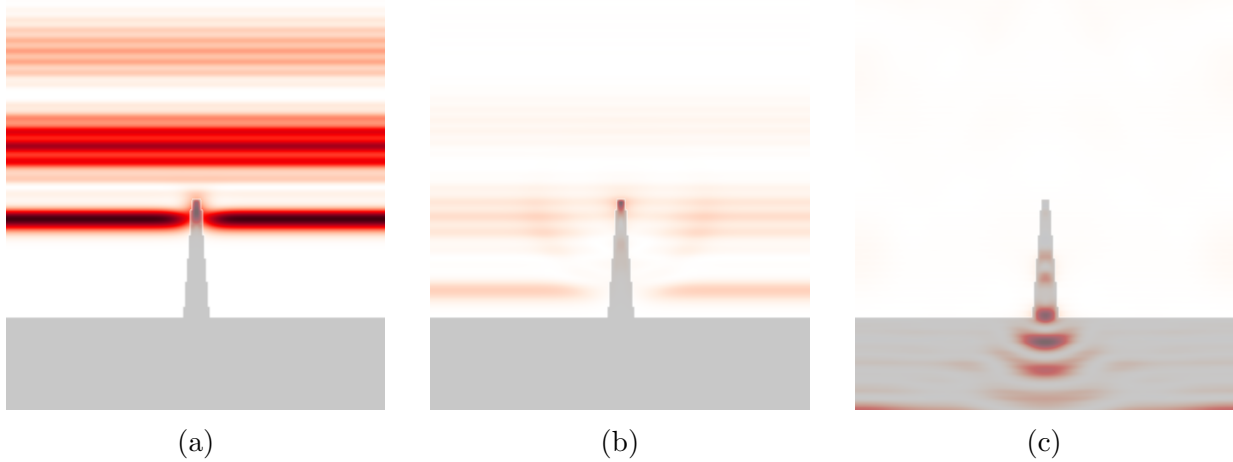


Figura 7.26 Campo da energia total para a textura triangular de área $0.01 \mu\text{m}^2$ e $sx = 1 \mu\text{m}$ em passos de tempo sucessivos ($\Delta_t = 0.1 a/c$).

Esses cálculos foram então repetidos para a mesma geometria de enxerto com área $0.1 \mu\text{m}^2$ a fim de determinar o efeito da área da seção transversal do enxerto na performance da célula solar. A melhor combinação das variáveis lf e hf foi $lf = 0.06 \mu\text{m}$ e $hf = 3.33 \mu\text{m}$ enquanto o sx_o permaneceu $0.3 \mu\text{m}$, conforme pode ser visto nos gráficos 7.28 e 7.29. A melhor performance alcançada por essa textura foi de 196.8926 A/m^2 e performance relativa correspondente de $\xi = 51.376\%$. O campo de energia para essa textura em passos de tempo sucessivos ($\Delta_t = 0.1 a/c$) é mostrado na Fig. 7.30 para um $sx = 1 \mu\text{m}$ e para um $sx_o = 0.3 \mu\text{m}$ na Fig. 7.31.

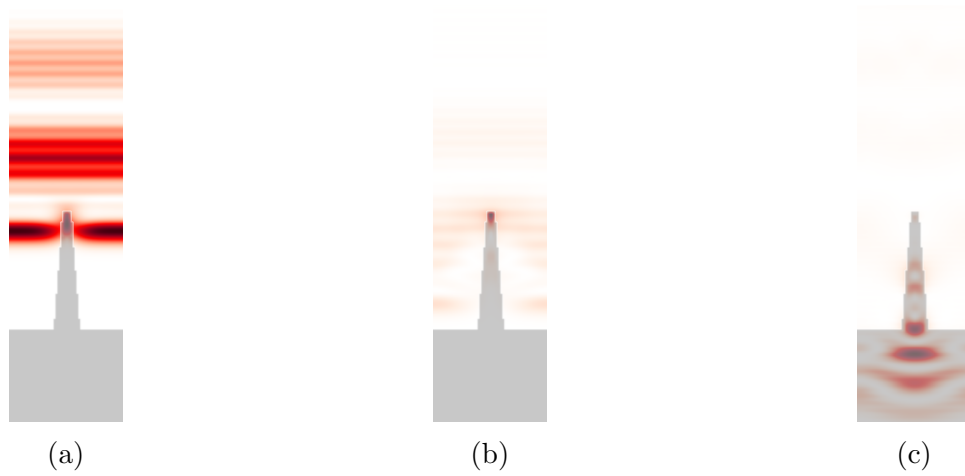


Figura 7.27 Campo da energia total para a textura triangular de área $0.01 \mu\text{m}^2$ e $sx = 0.3 \mu\text{m}$ em passos de tempo sucessivos ($\Delta_t = 0.1 a/c$).

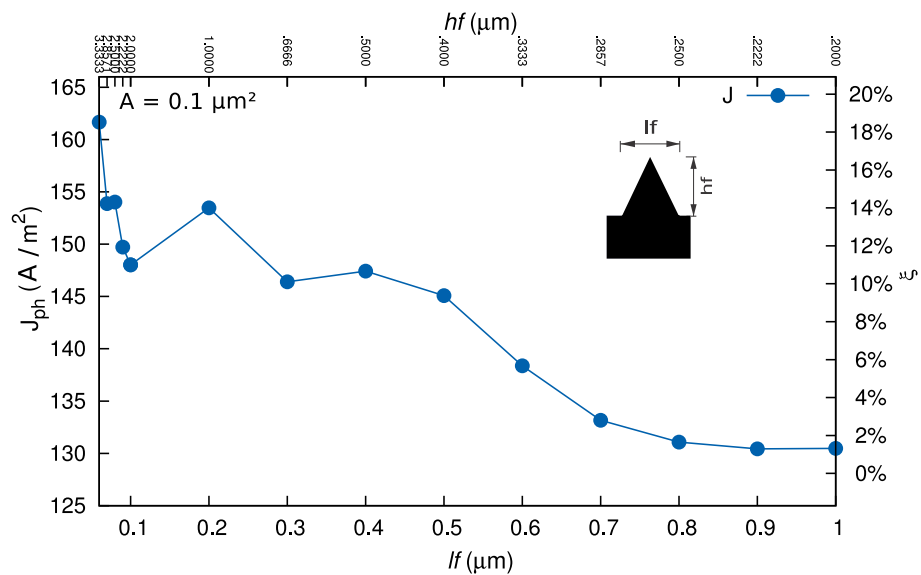


Figura 7.28 Eficiência das células com textura triangular de área $0.1 \mu\text{m}^2$ em função dos parâmetros geométricos hf e lf .

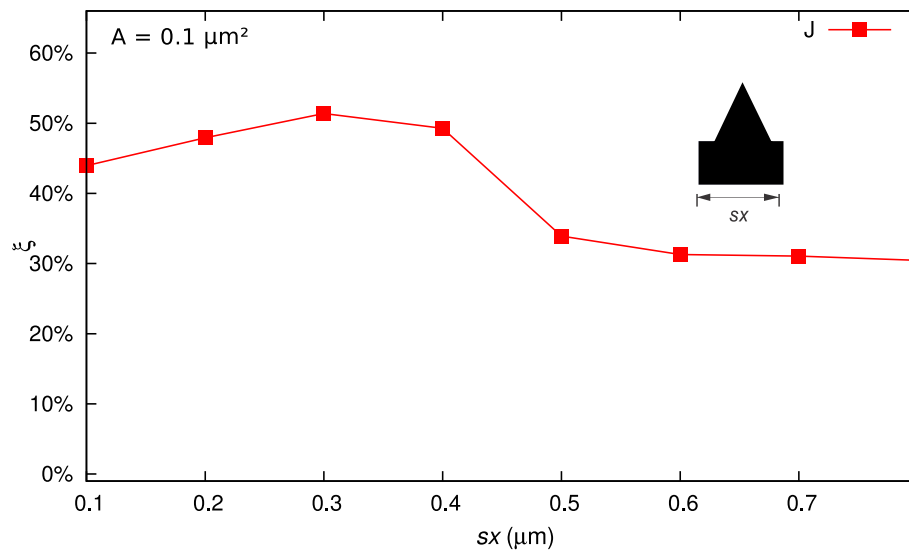


Figura 7.29 Efeito do espaçamento entre enxertos retangulares ($hf = 3.33 \mu\text{m}$, $lf = 0.06 \mu\text{m}$) de área $0.1 \mu\text{m}^2$ na performance relativa da célula solar.

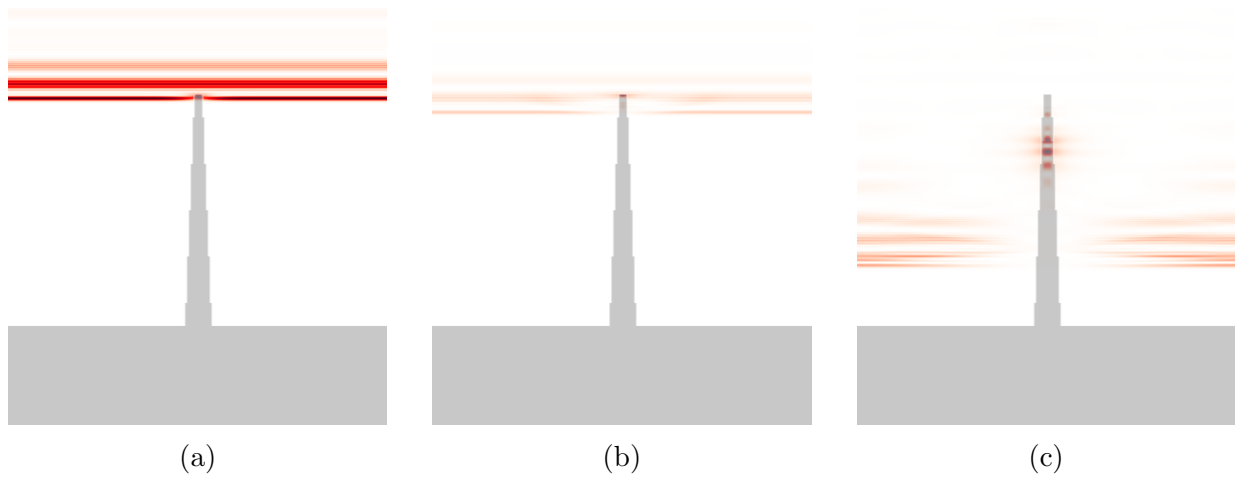


Figura 7.30 Campo da energia total para a textura triangular ($hf = 3.33 \mu\text{m}$, $lf = 0.06 \mu\text{m}$) de área $0.1 \mu\text{m}^2$ e $sx = 1 \mu\text{m}$ em passos de tempo sucessivos ($\Delta_t = 0.1 a/c$).

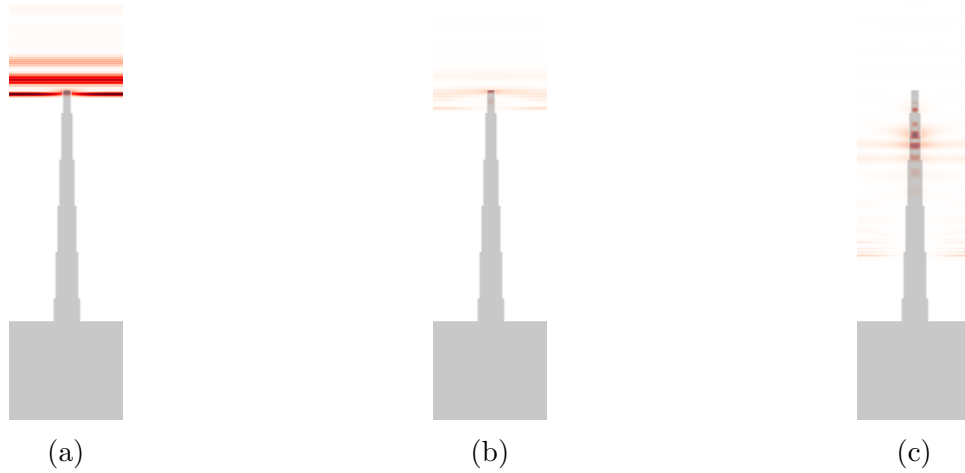


Figura 7.31 Campo da energia total para a textura triangular ($hf = 3.33 \mu\text{m}$, $lf = 0.06 \mu\text{m}$) de área $0.1 \mu\text{m}^2$ e $sx = 0.3 \mu\text{m}$ em passos de tempo sucessivos ($\Delta_t = 0.1 a/c$).

Textura trapezoidal: o domínio computacional, apresentado na Fig. 5.7(e), mostra os parâmetros que foram testados para um enxerto de forma trapezoidal, mantendo a área da seção transversal do enxerto fixa em $0.01 \mu\text{m}^2$ ou $0.1 \mu\text{m}^2$. Os resultados mostrados na Fig. 7.32 mostram que os menores valores da largura do enxerto testados alcançaram as melhores absorções da luz, isso indica que a textura do trapezio tende para assumir a melhor forma triangular.

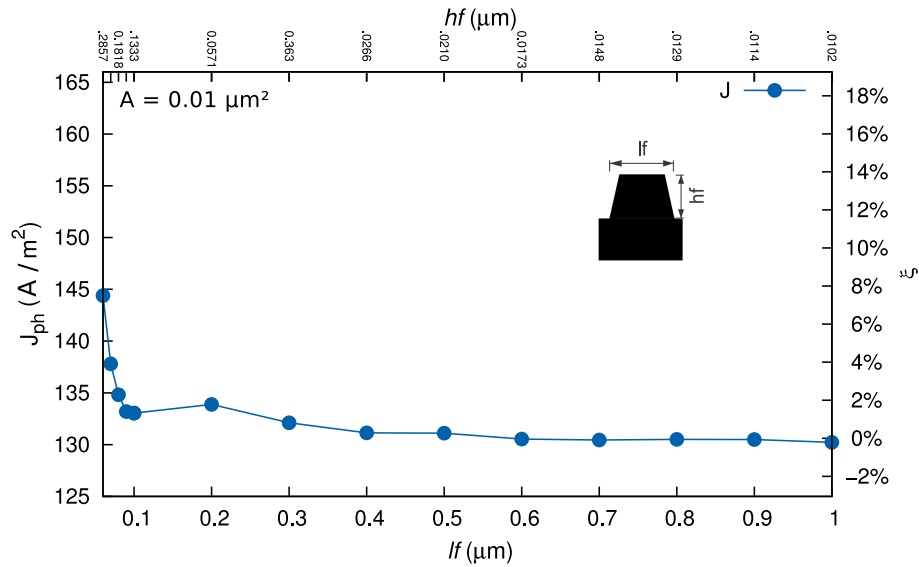


Figura 7.32 Eficiência das células com textura trapezoidal em função dos parâmetros geométricos hf e lf mantendo sx fixo em $1 \mu\text{m}$.

O melhor resultado para essa textura com $sx = 1 \mu\text{m}$ foi obtido com a combinação $hf = 0.2857 \mu\text{m}$, $lf = 0.06 \mu\text{m}$ e $J = 144.3887 A/m^2$. Logo, foi verificado o efeito do espaçamento entre os enxertos que formam a textura variando o valor de sx e os resultados são mostrados no gráfico da Fig. 7.33. Pode-se observar que o mesmo valor de $sx = 0.3 \mu\text{m}$ produz a melhor performance na célula solar.

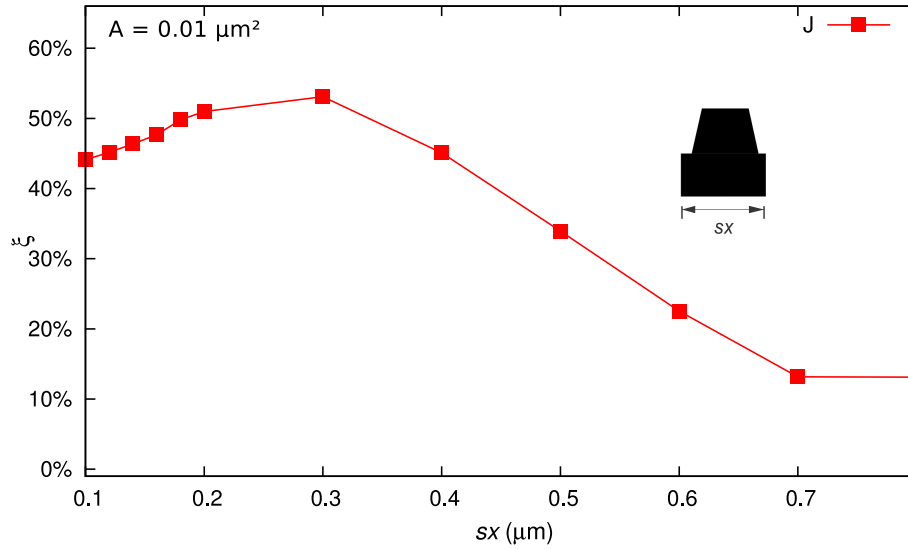


Figura 7.33 Efeito do espaçamento entre enxertos trapezoidais ($hf = 0.2857 \mu\text{m}$, $lf = 0.06 \mu\text{m}$) na performance relativa da célula solar.

O melhor resultado de espaçamento para essa textura foi obtido portanto com um $sx = 0.3 \mu\text{m}$ alcançando um valor de $J = 198.6539 \text{ A/m}^2$ com um aumento de performance relativa correspondente de $\xi = 53.084\%$, um valor um pouco maior que o obtido para textura triangular. O campo de energia para essa textura em passos de tempo sucessivos ($\Delta_t = 0.1 a/c$) é mostrado na Fig. 7.34 para um $sx = 1 \mu\text{m}$ e para o valor de espaçamento ótimo, $sx = 0.3 \mu\text{m}$ na Fig. 7.35.

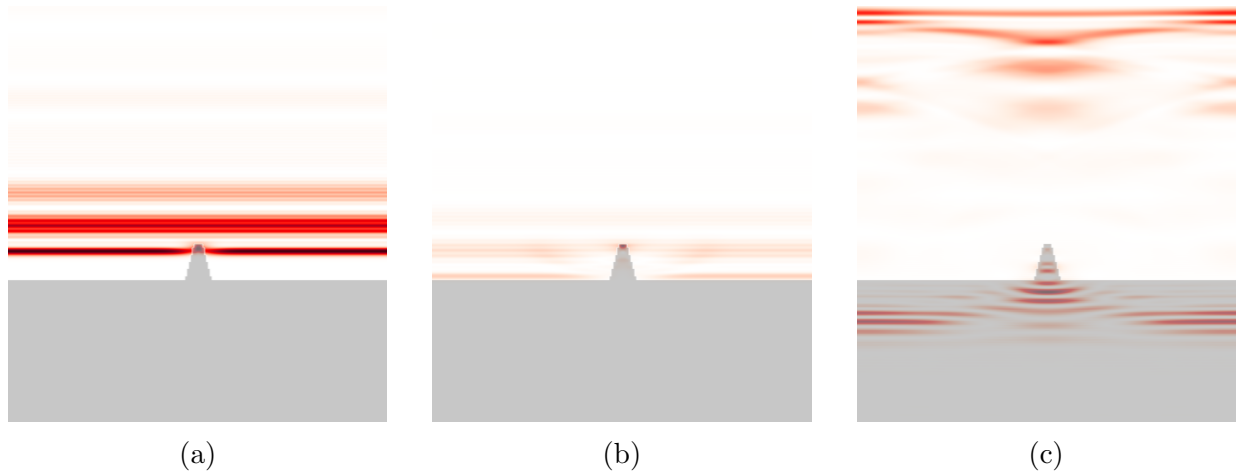


Figura 7.34 Campo da energia total para a textura trapezoidal ($hf = 0.2857 \mu\text{m}$, $lf = 0.06 \mu\text{m}$) de área $0.01 \mu\text{m}^2$ e $sx = 1 \mu\text{m}$ em passos de tempo sucessivos ($\Delta_t = 0.1 a/c$).

Esses cálculos foram então repetidos para a mesma geometria de enxerto com área $0.1 \mu\text{m}^2$ a fim de determinar o efeito da área da seção transversal do enxerto na performance da célula solar. A melhor combinação das variáveis lf e hf foi $lf = 0.06 \mu\text{m}$ e $hf = 2.8571 \mu\text{m}$ enquanto o sx ótimo permaneceu $0.3 \mu\text{m}$, conforme pode ser visto nos gráficos 7.36 e 7.37. A melhor performance alcançada por essa textura foi de 196.6082 A/m^2 e performance relativa

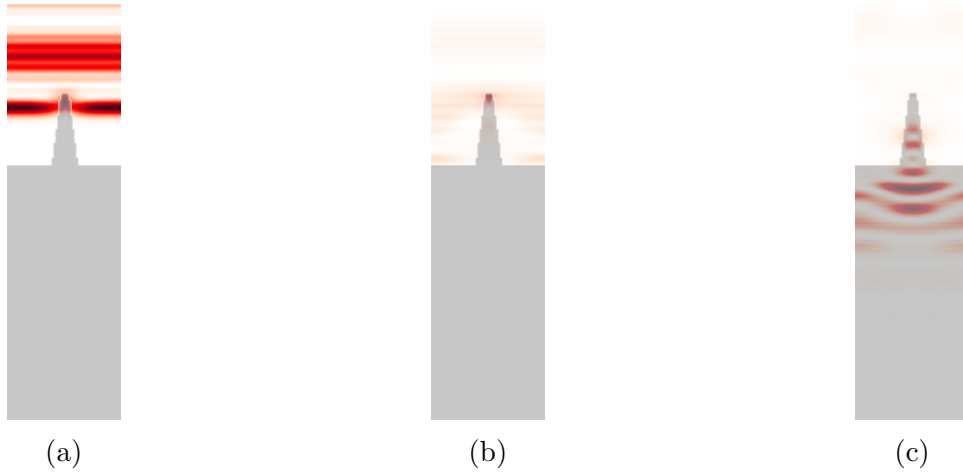


Figura 7.35 Campo da energia total para a textura trapezoidal ($hf = 0.2857 \mu\text{m}$, $lf = 0.06 \mu\text{m}$) de área $0.01 \mu\text{m}^2$ e $sx = 0.3 \mu\text{m}$ em passos de tempo sucessivos ($\Delta_t = 0.1 a/c$).

correspondente de $\xi = 51.158\%$. O campo de energia para essa textura em passos de tempo sucessivos ($\Delta_t = 0.1 a/c$) é mostrado na Fig. 7.38 para um $sx = 1 \mu\text{m}$ e para o valor de espaçamento ótimo, $sx = 0.3 \mu\text{m}$ na Fig. 7.39.

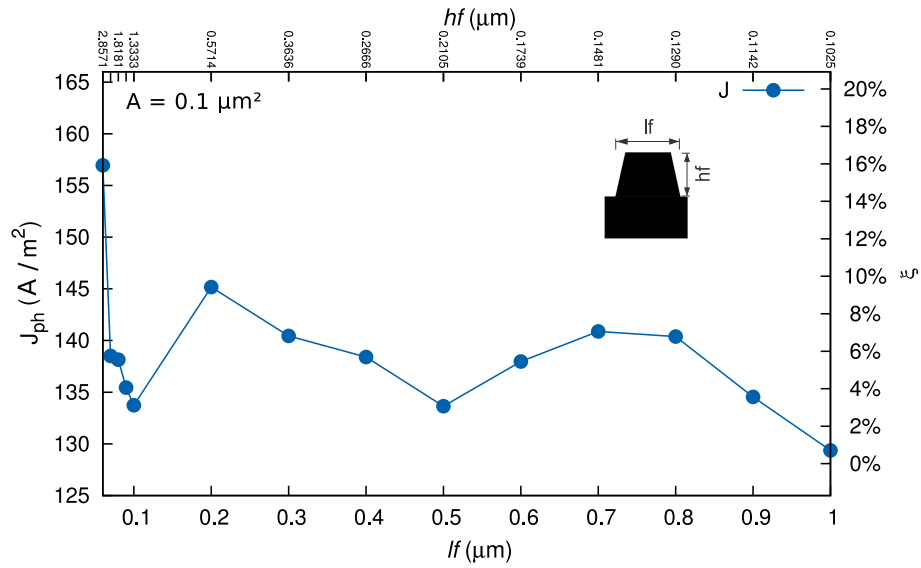


Figura 7.36 Eficiência das células com textura trapezoidal de área $0.1 \mu\text{m}^2$ em função dos parâmetros geométricos hf e lf .

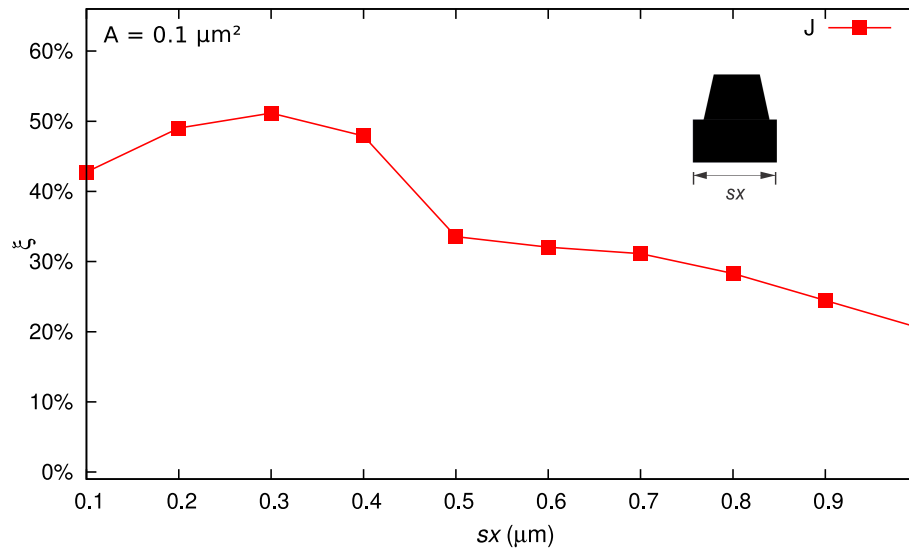


Figura 7.37 Efeito do espaçamento entre enxertos trapezoidais ($hf = 2.8571 \mu\text{m}$, $lf = 0.06 \mu\text{m}$) de área $0.1 \mu\text{m}^2$ na performance relativa da célula solar.

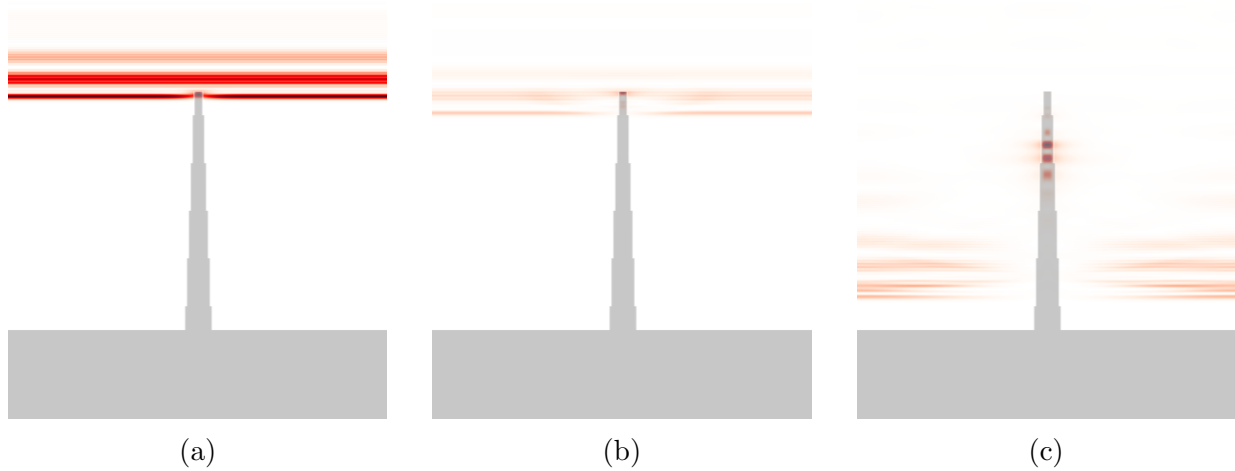


Figura 7.38 Campo da energia total para a textura trapezoidal ($hf = 2.8571 \mu\text{m}$, $lf = 0.06 \mu\text{m}$) de área $0.1 \mu\text{m}^2$ e $sx = 1 \mu\text{m}$ em passos de tempo sucessivos ($\Delta_t = 0.1 a/c$).

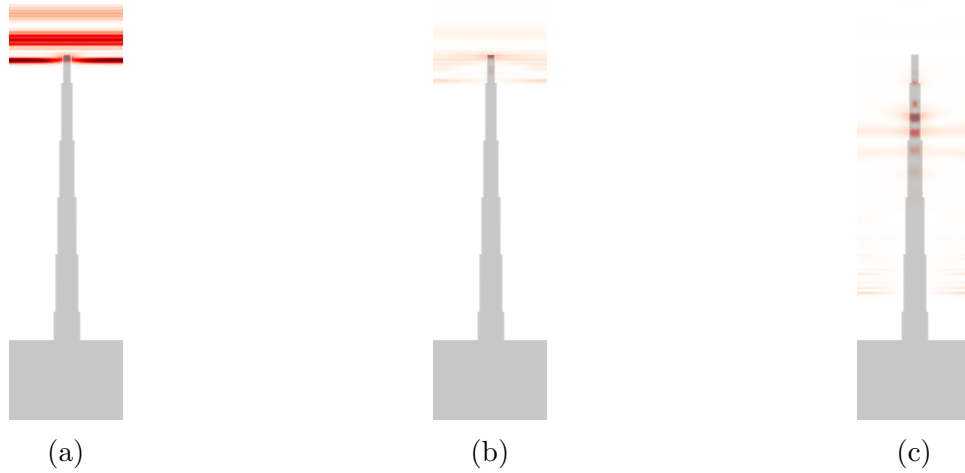


Figura 7.39 Campo da energia total para a textura trapezoidal ($hf = 2.8571 \mu\text{m}$, $lf = 0.06 \mu\text{m}$) de área $0.1 \mu\text{m}^2$ e $sx = 0.3 \mu\text{m}$ em passos de tempo sucessivos ($\Delta_t = 0.1 a/c$).

Nas Tabs. 1 e 2 são sumarizados os resultados para as diferentes geometrias de enxerto testadas com restrição de forma para as duas áreas de enxerto. Os enxertos com áreas transversais maiores alcançaram melhores resultados de absorção de luz. Isso pode ser explicado pelas dimensões dos enxertos de área maior permitirem uma maior distância percorrida pela luz nos enxertos facilitando a absorção. Para as texturas com enxertos de menor área, a melhor textura em relação à absorção foi a textura trapezoidal que possibilitou uma absorção gradual pelo aumento contínuo da seção transversal conforme a luz penetra na textura. Dessa forma a textura não só agiu como um meio de índice de refração intermediário entre o ar e o silício, mas também possibilitou efeitos de confinamento de luz pela reflexão nas laterais dos enxertos.

Tabela 1: Resultados das melhores geometrias de enxertos encontradas através da otimização restrita com uma área de enxerto de $0.01 \mu\text{m}^2$ com sx fixado em $1 \mu\text{m}$.

Geometria do enxerto	hf_o	lf_o	J	ξ
Retangular	$0.050 \mu\text{m}$	$0.200 \mu\text{m}$	134.9820 A/m^2	3.853%
Retangular com ponta circular	$0.061 \mu\text{m}$	$0.100 \mu\text{m}$	132.3187 A/m^2	1.804%
Elipsoidal	$0.212 \mu\text{m}$	$0.060 \mu\text{m}$	136.8303 A/m^2	5.275%
Triangular	$0.333 \mu\text{m}$	$0.060 \mu\text{m}$	146.6719 A/m^2	12.847%
Trapezoidal	$0.286 \mu\text{m}$	$0.060 \mu\text{m}$	144.3887 A/m^2	11.091%

Nas Tabs. 3 e 4 observa-se também que não houve grande variação do espaçamento ótimo entre os enxertos, dado pela diferença $sx_o - lf_o$, que se manteve entre $0.2\text{-}0.3 \mu\text{m}$ mesmo quando a área da seção transversal do enxerto é bem maior. Essa constância no espaçamento indica sua relação com o espectro de luz incidente o que está de acordo com a teoria de difração apresentada nas seções 2.4 e 2.3.3 em relação ao processo de difração.

Tabela 2: Resultados do sx ótimo para as melhores geometrias encontradas através da otimização restrita com uma área de enxerto de $0.01 \mu\text{m}^2$.

Geometria do enxerto	sx_o	sx_o-lf_o	J	ξ
Retangular	$0.400 \mu\text{m}$	$0.200 \mu\text{m}$	144.0784 A/m^2	11.027%
Retangular com ponta circular	$0.300 \mu\text{m}$	$0.20 \mu\text{m}$	148.5073 A/m^2	14.570%
Elipsoidal	$0.300 \mu\text{m}$	$0.240 \mu\text{m}$	184.6642 A/m^2	42.465%
Triangular	$0.300 \mu\text{m}$	$0.240 \mu\text{m}$	197.1756 A/m^2	52.117%
Trapezoidal	$0.300 \mu\text{m}$	$0.240 \mu\text{m}$	198.6539 A/m^2	53.084%

Tabela 3: Resultados das melhores geometrias de enxertos encontradas através da otimização restrita com uma área de enxerto de $0.1 \mu\text{m}^2$ com sx fixado em $1 \mu\text{m}$.

Geometria do enxerto	hf_o	lf_o	J	ξ
Retangular	$0.1428 \mu\text{m}$	$0.7 \mu\text{m}$	144.0566 A/m^2	10.708%
Retangular com ponta circular	$0.6593 \mu\text{m}$	$0.14 \mu\text{m}$	141.1825 A/m^2	10.139%
Elipsoidal	$1.5917 \mu\text{m}$	$0.08 \mu\text{m}$	142.8670 A/m^2	11.453%
Triangular	$3.333 \mu\text{m}$	$0.06 \mu\text{m}$	161.6557 A/m^2	26.110%
Trapezoidal	$2.8571 \mu\text{m}$	$0.06 \mu\text{m}$	156.9481 A/m^2	22.438%

Tabela 4: Resultados do sx ótimo para as melhores geometrias encontradas através da otimização restrita com uma área de enxerto de $0.1 \mu\text{m}^2$.

Geometria do enxerto	sx_o	sx_o-lf_o	J	ξ
Retangular	$1.000 \mu\text{m}$	$0.300 \mu\text{m}$	144.0566 A/m^2	11.708%
Retangular com ponta circular	$0.400 \mu\text{m}$	$0.260 \mu\text{m}$	212.5589 A/m^2	63.306%
Elipsoidal	$0.300 \mu\text{m}$	$0.220 \mu\text{m}$	192.0598 A/m^2	47.661%
Triangular	$0.300 \mu\text{m}$	$0.240 \mu\text{m}$	196.8926 A/m^2	51.376%
Trapezoidal	$0.300 \mu\text{m}$	$0.240 \mu\text{m}$	196.6082 A/m^2	51.158%

Para as texturas com enxertos de área maior, o melhor resultado foi da textura com ponta circular deixando em segundo lugar a textura triangular e trapezoidal. A textura com ponta circular, além de propiciar uma transição suave, supera também pela capacidade do topo da estrutura em desviar a luz para os sulcos da textura onde fica confinada e é absorvida por múltiplas reflexões nas laterais. Notadamente, durante a simulação dessa textura o tempo de simulação até o decaimento dos campos eletromagnéticos é maior do que as anteriores indicando que a luz sofre diversas reflexões devido ao confinamento. Logo, este resultado indica que a eficiência do processo de geração de energia deverá aumentar, uma vez que mais fótons serão absorvidos.

Pode-se sumarizar que as melhores estruturas para absorção da luz são as que melhor aliam um bom espalhamento da luz para o interior da célula por difração, capacidade dos enxertos em redirecionar a luz para os sulcos da textura e formato dos enxertos que propicia uma transição suave da frente de onda para o semicondutor.

7.2 Otimização geométrica automática

Nessa seção são mostrados os resultados para os dois modos de otimização geométrica automática que foram testados para obter geometrias com maior capacidade de absorção de luz. Na última seção são comparados os resultados da otimização automática livre com o de uma geometria com mesma área gerada de forma aleatória e são feitas considerações sobre os processos de otimização testados.

7.2.1 Otimização geométrica automática livre

As geometrias produzidas pela otimização geométrica automática em sucessivos passos de otimização são mostradas nas Figs. 7.40, 7.42 e 7.44 para diferentes tamanhos dos blocos elementares. Também são mostradas, graficamente, a variação da fotocorrente e performance relativa conforme os blocos são adicionados nas Figs. 7.46, 7.48 e 7.50. Em todos os gráficos, é nítida a ausência de uma relação linear entre o número de blocos e a capacidade da textura em absorver a luz. Isto está de acordo com o esperado uma vez que os efeitos de confinamento dependem muito mais da geometria do que da quantidade de material absorvente.

Na Figura 7.40, é mostrada a construção com blocos elementares de lado $0.1 \mu\text{m}$, a construção segue a lógica apresentada na seção 6.7, onde os campos de energia são calculados e dependendo da intensidade do campo ao redor dos blocos é posicionado o novo bloco elementar. O limite de blocos adicionados foi estabelecido para manter uma área total de enxerto de $0.1 \mu\text{m}^2$.

Conforme o gráfico da Fig. 7.46, o J_{ph} máximo alcançado foi de 148.733 A/m^2 com uma performance relativa de 14.389% usando 8 blocos elementares na construção. A partir desse valor houve decréscimo da fotocorrente gerada até chegar ao limite estipulado de área. O comportamento foi evidentemente não-linear e o melhor desempenho verificando com a estrutura da Fig. 7.40 se deve à formação de uma geometria em forma de “L” seguida de outra em forma de “L-invertido” que causam um efeito de confinamento na luz incidente para o passo de otimização $n_{otm}=8$.

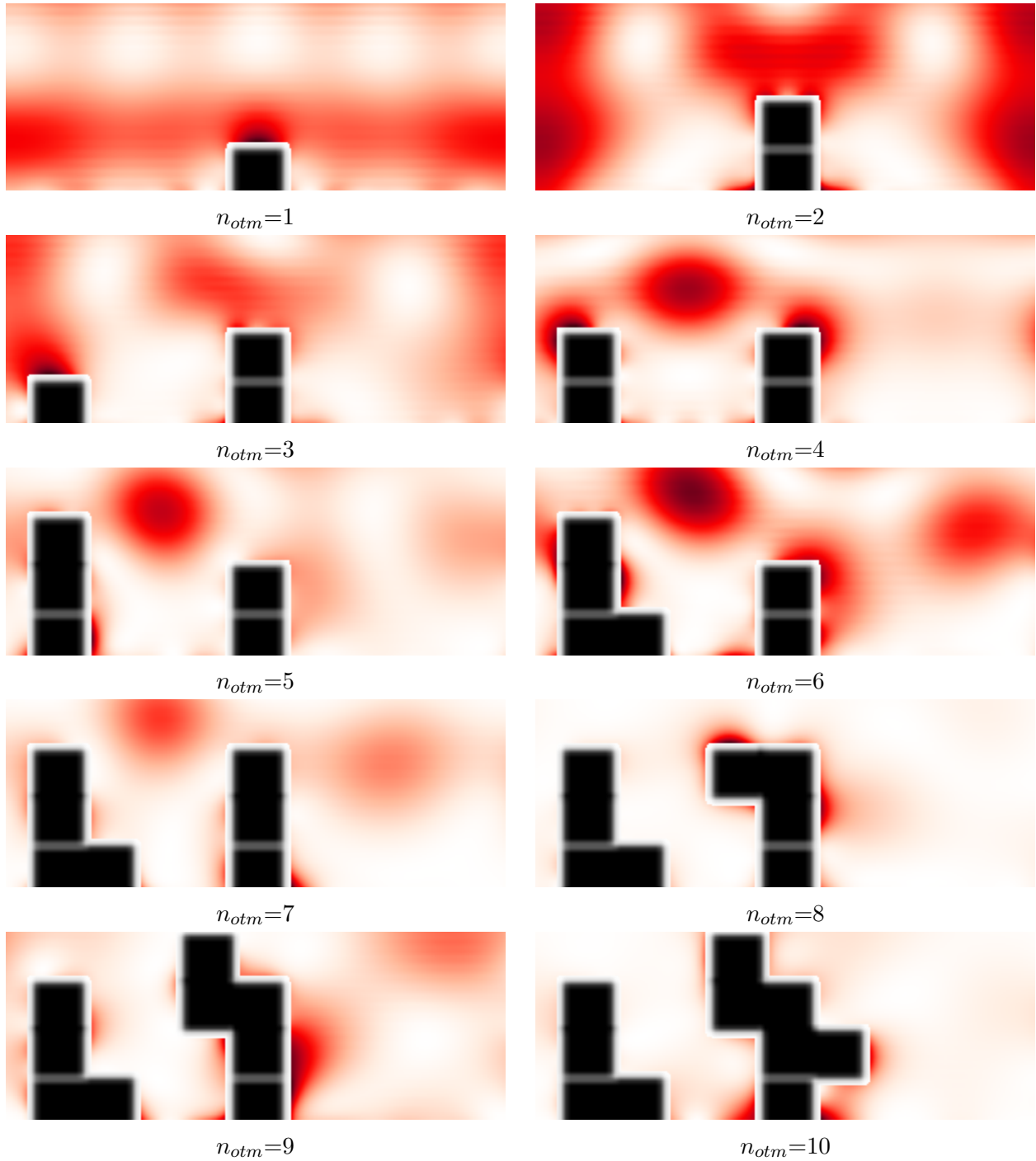


Figura 7.40 Campo de energia para diferentes passos de otimização geométrica automática usando um bloco elementar de $0.1\mu\text{m} \times 0.1\mu\text{m}$.

Na Figura 7.42, é mostrada a construção com blocos elementares de lado $0.05\mu\text{m}$. Neste caso, pela simples observação do processo de crescimento, percebe-se que o algoritmo de construção automática se distancia rapidamente das formas geométricas comuns como as que foram testadas com a otimização geométrica com restrição de forma.

Conforme o gráfico da Fig. 7.48, o J_{ph} máximo alcançado foi de 168.521 A/m^2 com uma performance relativa de 30.226% usando 28 blocos elementares na construção. A partir desse valor houve decréscimo da fotocorrente gerada até chegar ao limite estipulado de área. A

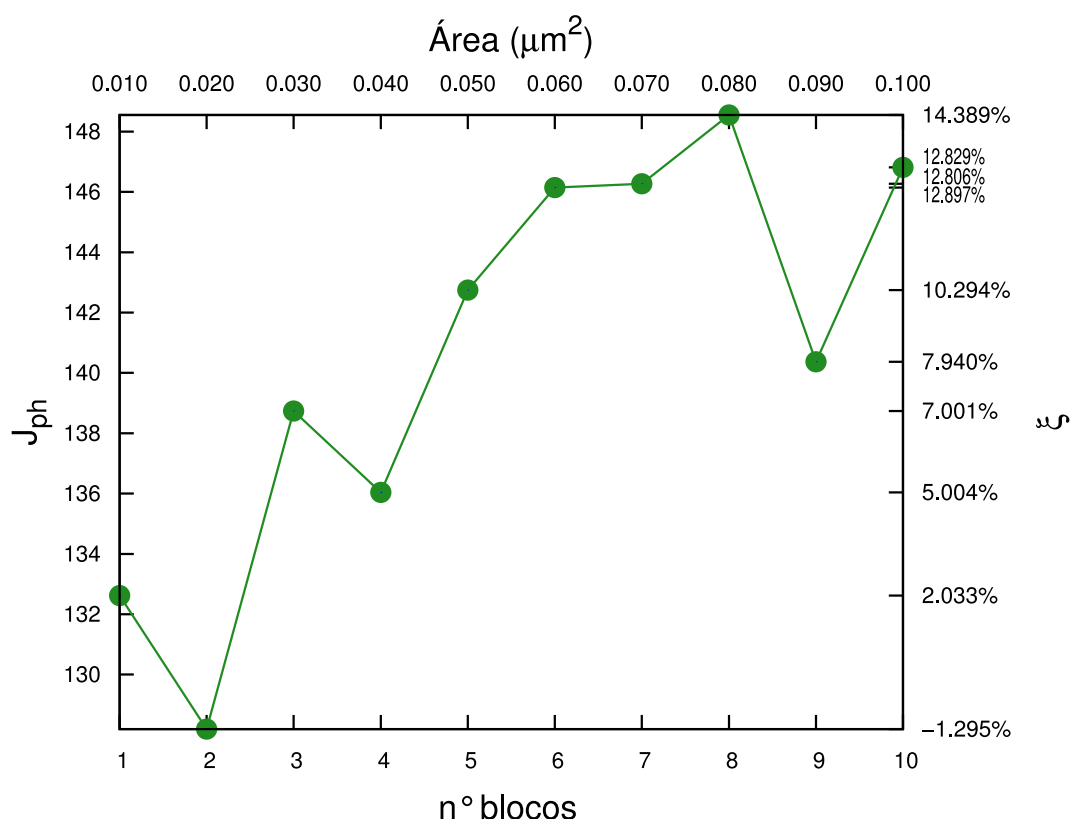


Figura 7.41 Gráfico de J_{ph} e ξ para otimização geométrica automática com bloco elementar de lado $0.1 \mu\text{m}$ em função da área de dielétrico e número de blocos enxertados.

presença desse pico seguido de uma queda abrupta se deve, como pode ser observado na Fig. 7.42, ao algoritmo de construção ter levado, a partir desse ponto, ao posicionamento de blocos de forma que obstrui a chegada de parte da luz na célula.

É visível pelos valores de performance que a redução do tamanho do bloco elementar causou um efeito substancial na performance da otimização quando comparado com o bloco de lado $0.1 \mu\text{m}$. Isso se deve à capacidade de um bloco menor em atender as nuances do campo de energia usado para otimização de forma mais precisa e possibilitando uma atualização mais gradual do campo com a inserção de cada bloco. Além disso, um tamanho menor dos blocos implica em um aumento da área superficial disponível permitindo uma maior absorção da luz, assim como ocorreria ao reduzir o tamanho de partículas em um sistema depositado em um substrato.

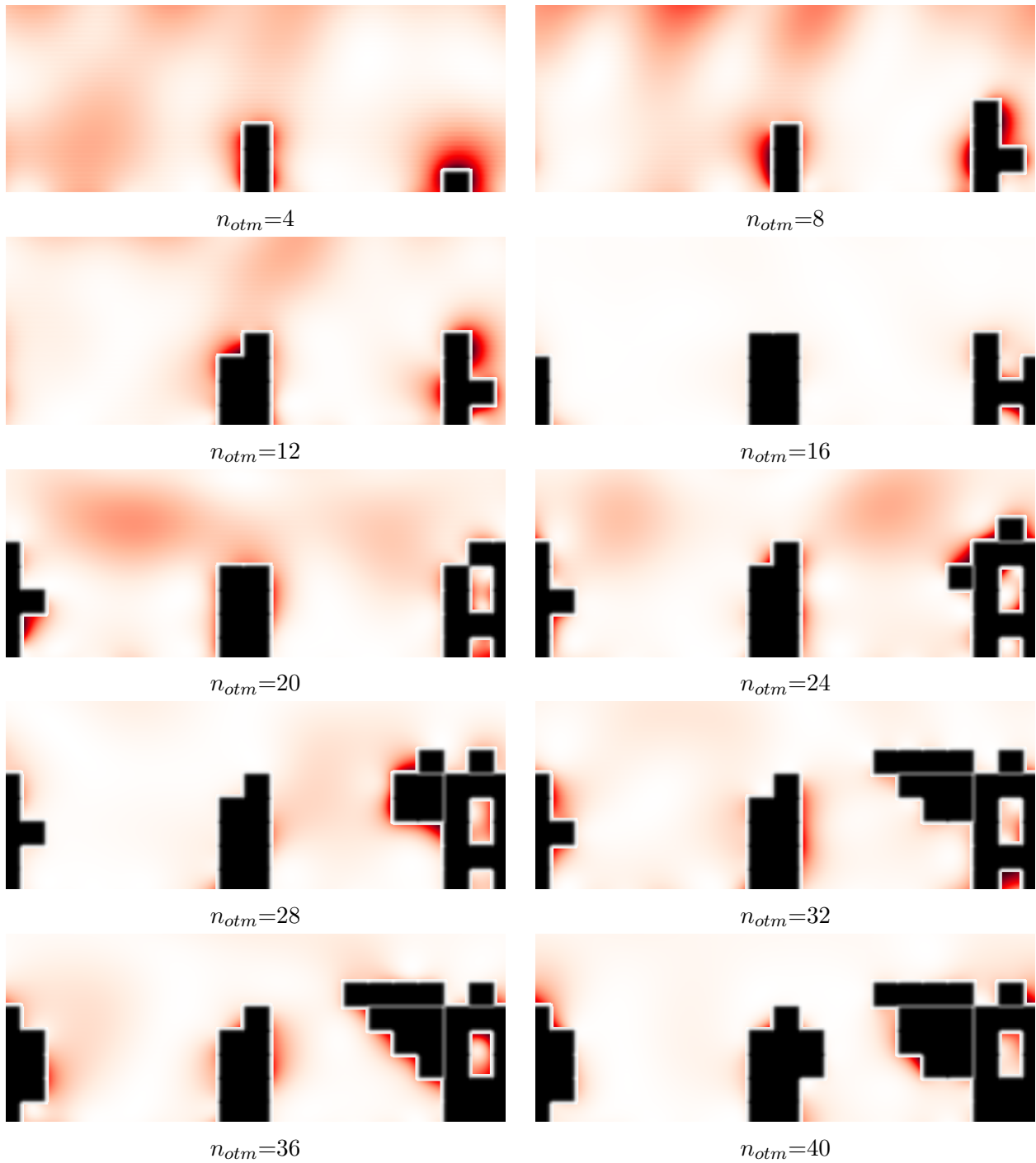


Figura 7.42 Campo de energia para diferentes passos de otimização geométrica automática usando um bloco elementar de $0.05 \mu\text{m} \times 0.05 \mu\text{m}$.

Na Figura 7.44, é mostrada a construção com blocos elementares de lado $0.025 \mu\text{m}$, o processo de crescimento segue o mesmo comportamento do bloco de lado $0.05 \mu\text{m}$. Porém, dessa vez, o algoritmo é mais bem sucedido e não insere blocos que podem obstruir a chegada da luz na célula mantendo um crescimento mais contínuo de eficiência conforme mostrado no gráfico da Fig. 7.48.

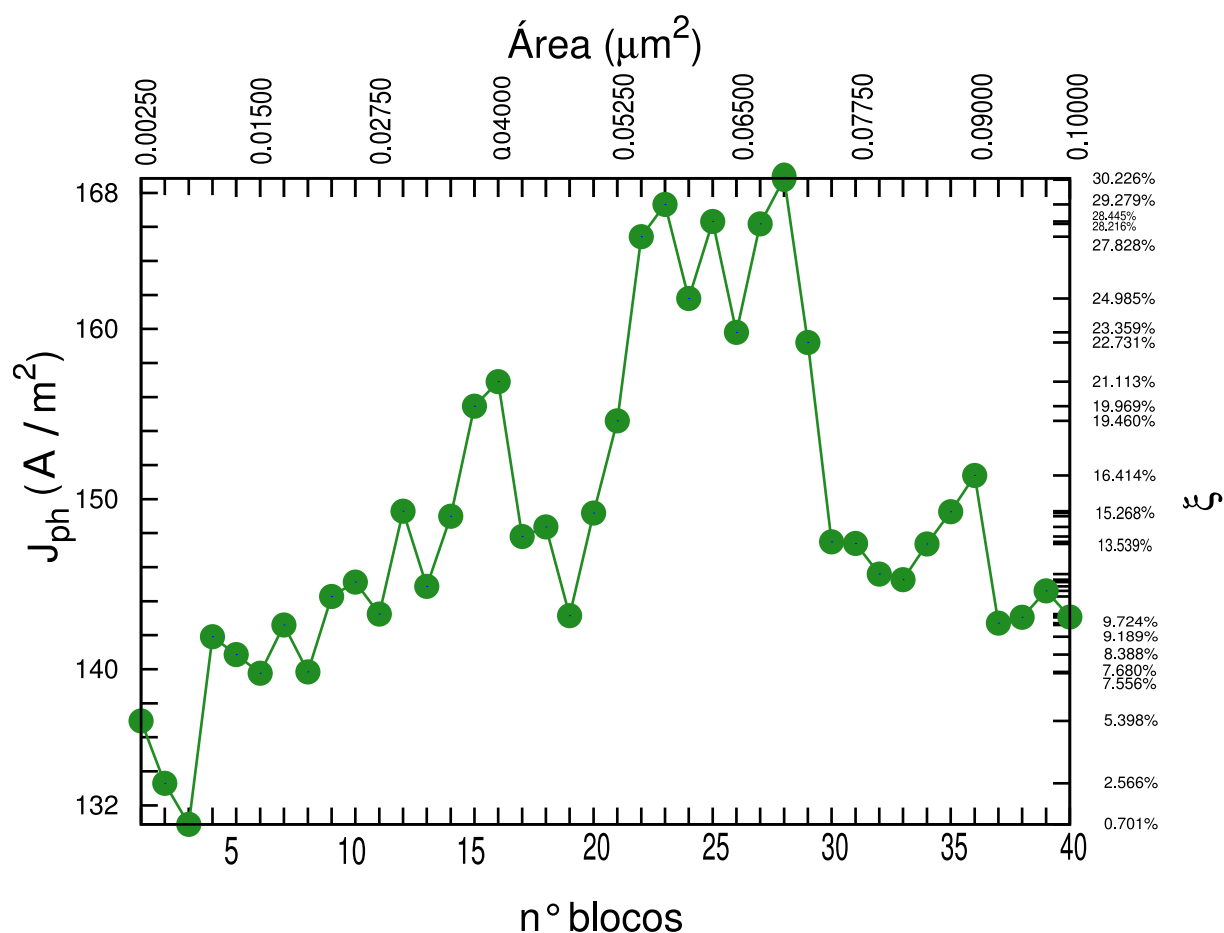


Figura 7.43 Gráfico de J_{ph} e ξ para otimização geométrica automática livre com bloco elementar de lado $0.05\mu m$ em função da área de dielétrico e número de blocos enxertados.

O J_{ph} máximo alcançado para essa otimização foi de $171.390 A/m^2$ com uma performance relativa de 31.929% usando 158 blocos elementares na construção. A partir desse valor houve decréscimo da fotocorrente gerada até chegar até atingir o limite estipulado de área. Dessa vez, conforme mostra o gráfico, a performance tem um crescimento mais monótono até atingir o valor máximo, porém ficam claras as pequenas oscilações de performance conforme cada bloco vai sendo inserido.

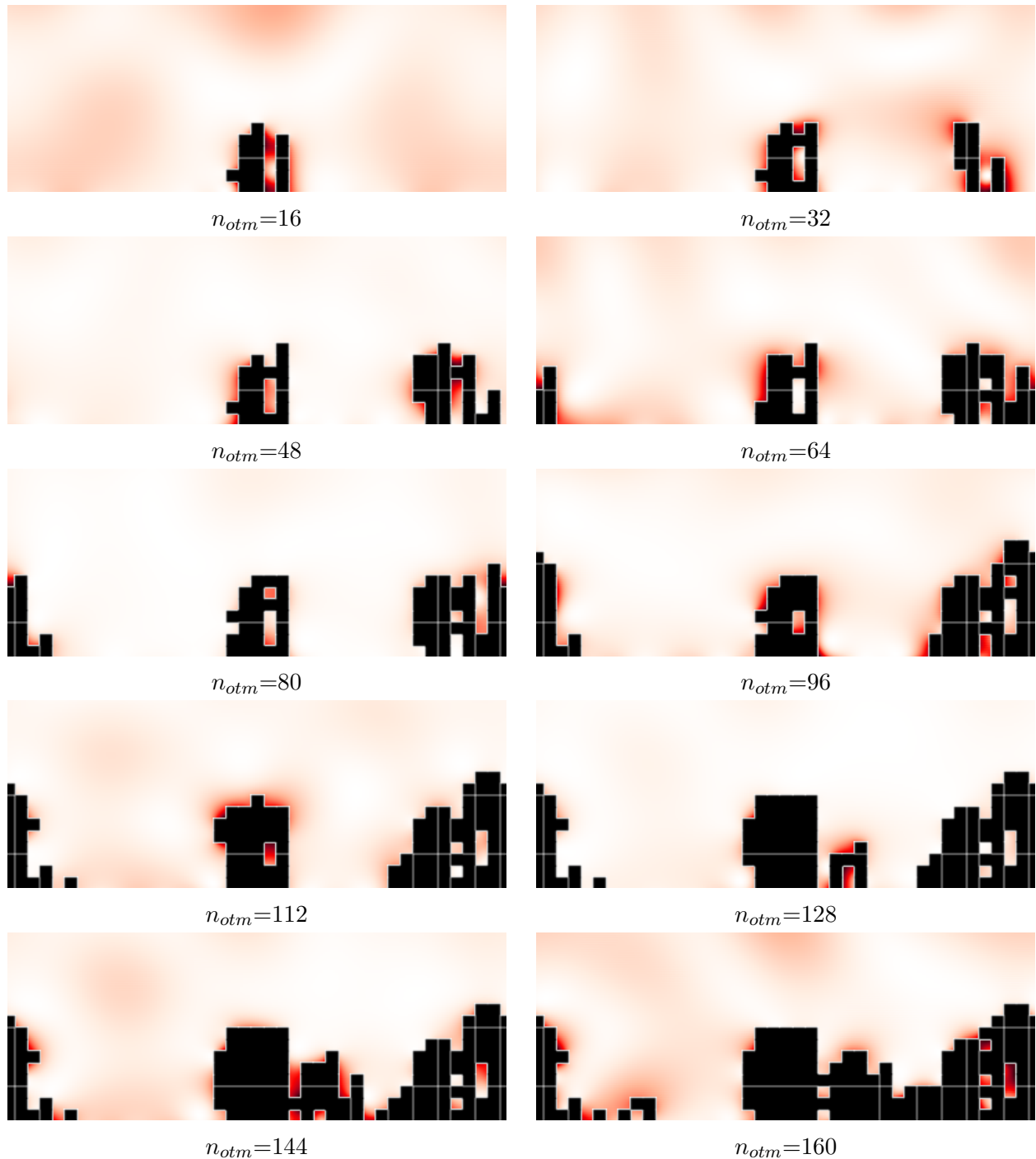


Figura 7.44 Campo de energia para diferentes passos de otimização geométrica automática usando um bloco elementar de $0.025 \mu\text{m} \times 0.025 \mu\text{m}$.

O aumento de performance da otimização com bloco de lado $0.025 \mu\text{m}$ é pequena em relação ao de lado $0.05 \mu\text{m}$. A redução do tamanho de bloco também causa um aumento no custo computacional expressivo tanto pelo aumento da resolução exigido pelo FDTD para captar as variações no campo para estruturas menores, como também pela necessidade de mais blocos (e portanto mais simulações) para cobrir a mesma quantidade de dielétrico. Também se deve destacar que a partir desse ponto é pouco ou nada proveitoso reduzir ainda mais o tamanho do bloco elementar, não apenas pelo custo computacional, mas também pela questão física de que

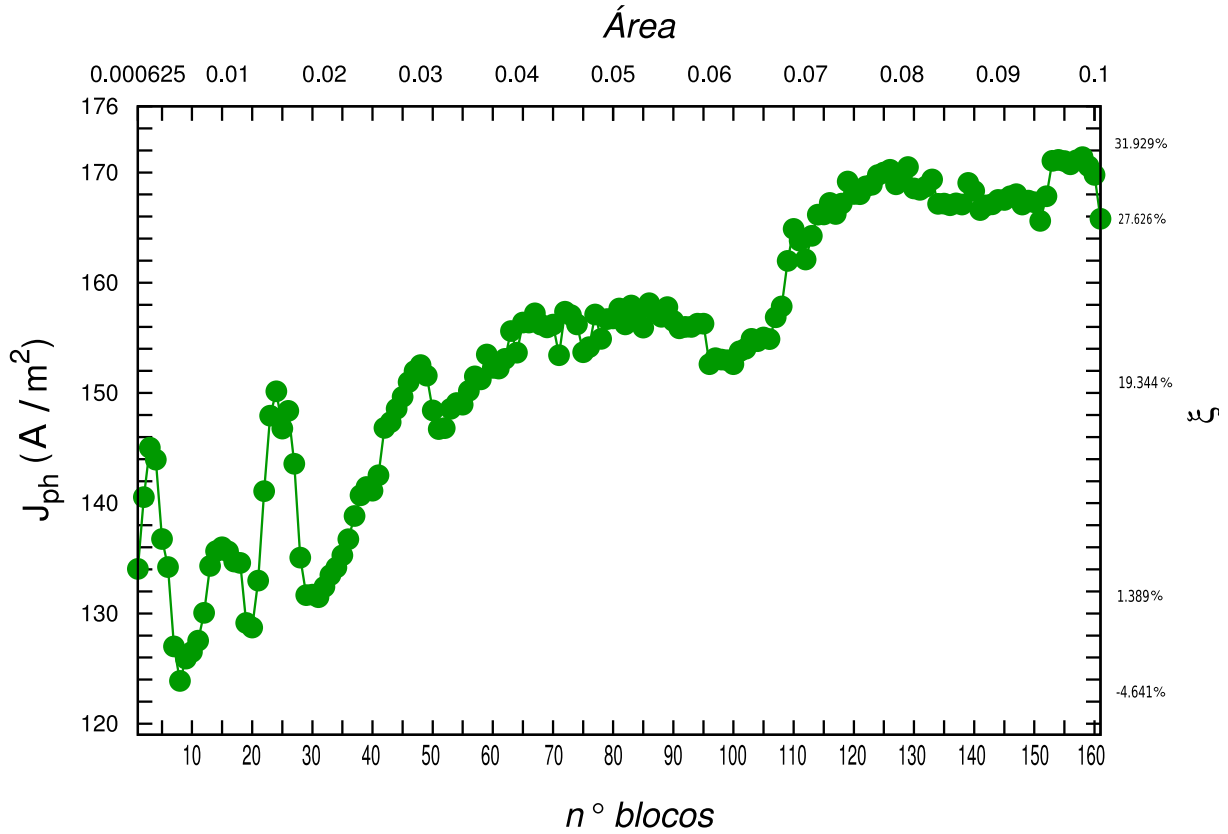


Figura 7.45 Gráfico de J_{ph} e ξ para otimização geométrica automática livre com bloco elementar de lado $0.025 \mu\text{m}$ em função da área de dielétrico e número de blocos enxertados.

os efeitos quânticos começam a se tornar relevantes invalidando o modelo matemático empregado. Nesse caso, um método capaz de modelar os efeitos quânticos seria necessário para corrigir as equações de Maxwell. Portanto, resultados melhores de performance são mais provavelmente obtidos modificando a geometria elementar ou o algoritmo de otimização automática livre em si.

Finalmente, observa-se que não foi possível alcançar performances tão altas como a dos melhores casos de geometrias fixas usando a otimização geométrica automática livre. Porém, no caso das geometrias fixas foi modificado também o período (sx), relacionado ao espaçamento entre os enxertos. Observa-se que conforme os resultados das otimizações com geometrias fixas da Tab. 3, todos realizados com $sx = 1 \mu\text{m}$ e área $0.1 \mu\text{m}^2$, não atingiram a performance relativa obtida através da otimização automática livre o que indica o sucesso da técnica de otimização baseada na evolução da geometria.

O melhor resultado alcançado pela geometria automática, apesar de a geometria se mostrar menos ordenada, está de acordo com a proposição de Bozolla et al. (2012). O trabalho dos referidos autores afirma que não é esperado para uma estrutura ordenada alcançar o limite Lambertiano de confinamento de luz para um espectro de luz largo, em realidade, a ampla faixa de componentes de Fourier para tal espectro sugere que alguma disordem deve estar presente.

Dessa forma, a combinação de estruturas ordenadas juntamente com micro-rugosidade inferior ao tamanho de comprimento de onda se mostra promissor por tirar vantagem tanto da difração quanto do espalhamento Rayleigh em um espectro contínuo.

7.2.2 Otimização geométrica automática por camadas

Um segundo modo de otimização geométrica automática foi testado, na tentativa de melhorar ainda mais a geometria em relação a sua performance em confinar e aumentar a absorção da luz. Foi implementado o mesmo algoritmo de otimização geométrica automática, no entanto, ao invés de permitir o posicionamento livre dos blocos nas regiões de maior concentração de energia, foi restringido o crescimento em uma camada por vez. Dessa forma, é realizada a otimização geométrica automática em uma camada até saturá-la completamente. Neste momento é determinado o ponto da otimização que atinge o valor máximo de fotocorrente gerada para essa camada e então começa o crescimento inserindo blocos na camada seguinte, repetindo o processo. Quando o posicionamento de novos blocos na camada seguinte não causa um acréscimo de performance em relação ao máximo da camada anterior, o processo de otimização é concluído. Nesse caso o critério da área não é levado em consideração.

A otimização automática por camadas foi realizada para um bloco elementar de lado $0.1\ \mu\text{m}$ levando aos resultados mostrados na Fig. 7.46. Nesse caso a partir da terceira camada, a performance se manteve sempre abaixo do máximo da segunda camada levando ao término da otimização nessa camada com a estrutura ótima mostrada na Fig. 7.47(b) com 8 blocos. Foi alcançado um J_{ph} de $154.052\ \text{A/m}^2$ levando a um resultado melhor do que o obtido com mesmo tamanho de bloco na otimização automática livre e com mesmo número de blocos. A restrição por camadas nesse caso ajuda a manter a simetria que foi vista na otimização automática livre com blocos de tamanho menor.

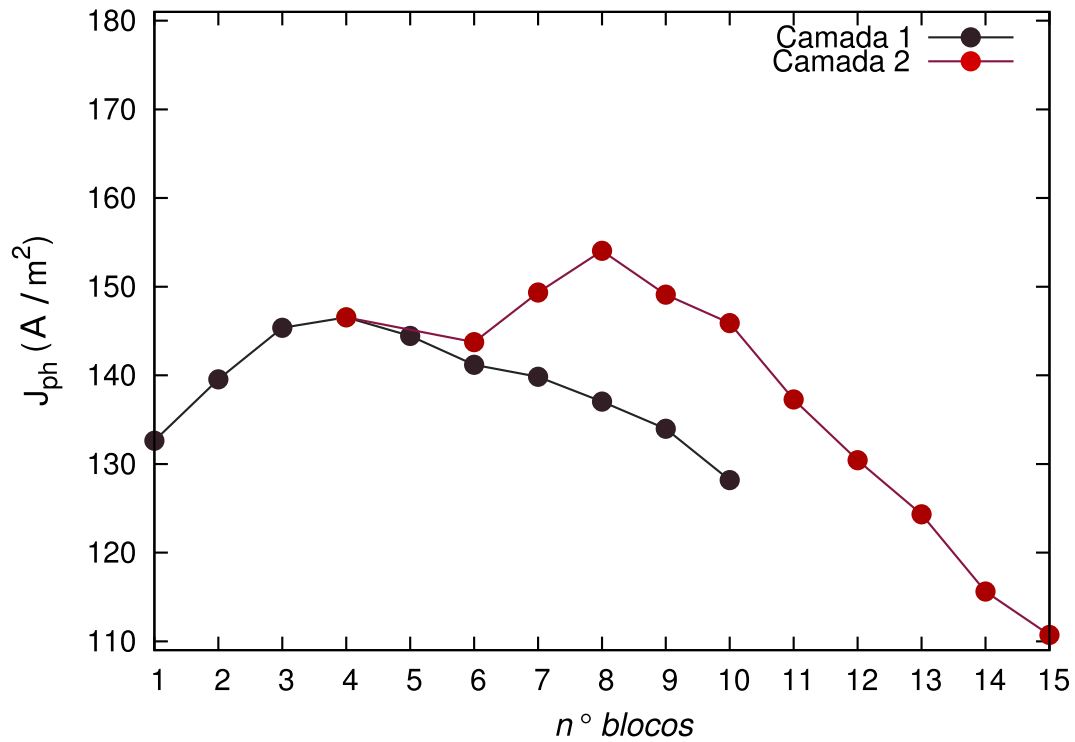


Figura 7.46 Gráfico de J_{ph} para otimização geométrica automática por camadas com bloco elementar de lado $0.1 \mu\text{m}$.



(a) Camada 1.



(b) Camada 2.

Figura 7.47 Campo da energia total para a textura obtida pelo algoritmo construtivo com crescimento por camadas para um bloco elementar de lado $0.1 \mu\text{m}$.

Logo, a otimização por camadas foi realizada para um bloco elementar de lado $0.05 \mu\text{m}$ levando aos resultados mostrados na Fig. 7.48. Nesse caso a partir da segunda camada, a performance se manteve sempre abaixo do máximo da primeira camada levando ao término da

otimização nessa camada com a estrutura ótima mostrada na Fig. 7.49(a) com 5 blocos. Foi alcançado um J_{ph} de 152.779 A/m² levando a um resultado pior do que o obtido com o tamanho de bloco maior. A restrição por camadas nesse caso impede o crescimento dos blocos na direção vertical, o que leva a um posicionamento desfavorável dos outros blocos, mas ainda mantendo a simetria. Porém, ao tentar crescer na segunda camada, o posicionamento desfavorável dos blocos da primeira camada restringe demais o crescimento levando a queda de performance.

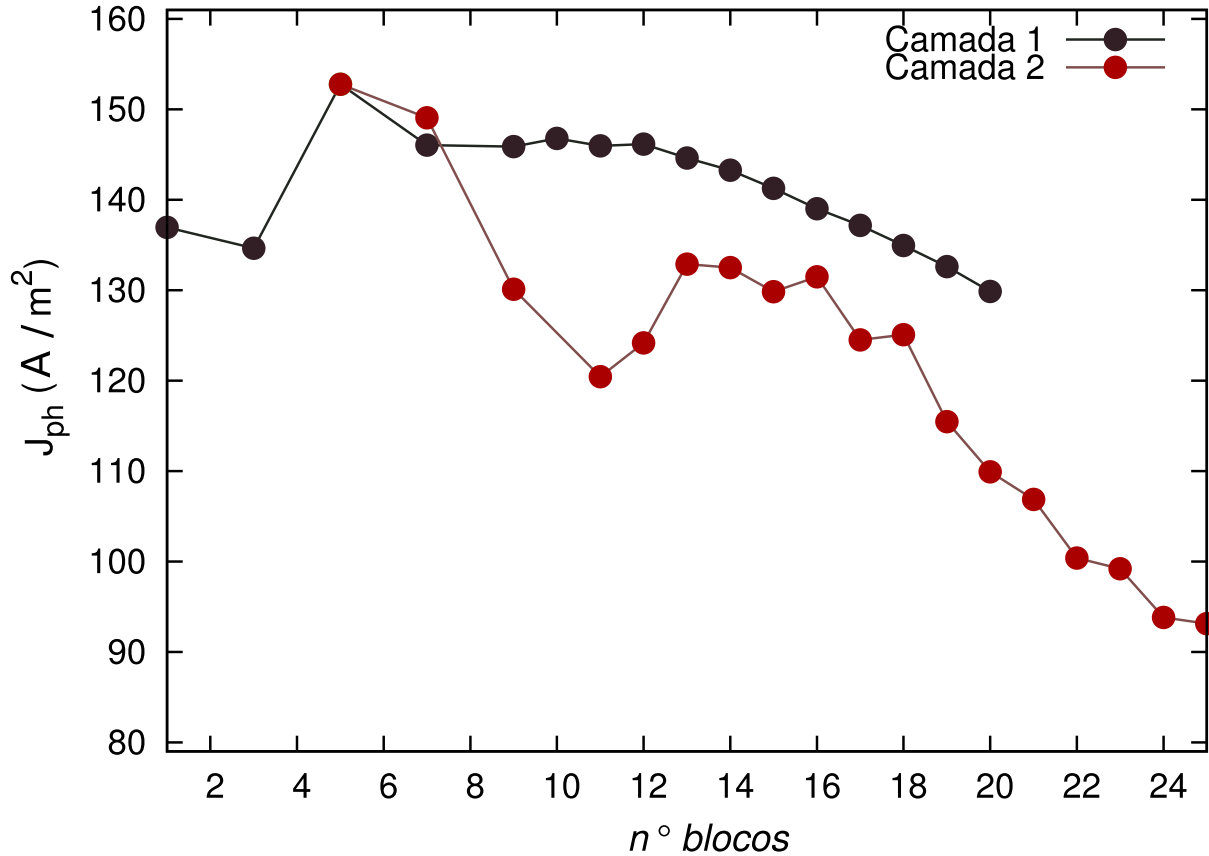
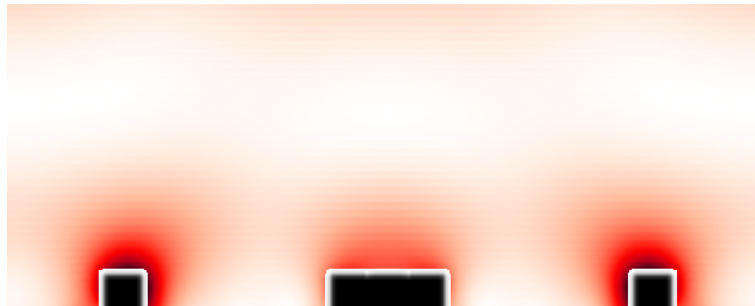


Figura 7.48 Gráfico de J_{ph} para otimização geométrica automática por camadas com bloco elementar de lado 0.05 μ m.



(a) Camada 1.

Figura 7.49 Campo da energia total para a textura obtida pelo algoritmo construtal com crescimento por camadas para um bloco elementar de lado 0.05 μ m.

Finalmente, a otimização por camadas é repetida para um bloco elementar de lado $0.025 \mu\text{m}$ levando aos resultados mostrados no gráfico da Fig. 7.50. Nesse caso a partir da sétima camada, a performance se manteve sempre abaixo do máximo da sexta camada levando ao término da otimização nessa camada com a estrutura ótima mostrada na Fig. 7.50(f) com 78 blocos. Foi alcançado um J_{ph} de 156.129 A/m^2 , um resultado ainda inferior ao alcançado com a otimização automática livre para esse tamanho de bloco. Novamente, a restrição acaba levando a um posicionamento desfavorável nas camadas seguintes e a performance acaba deixando de crescer antecipadamente com a inserção de novos blocos.

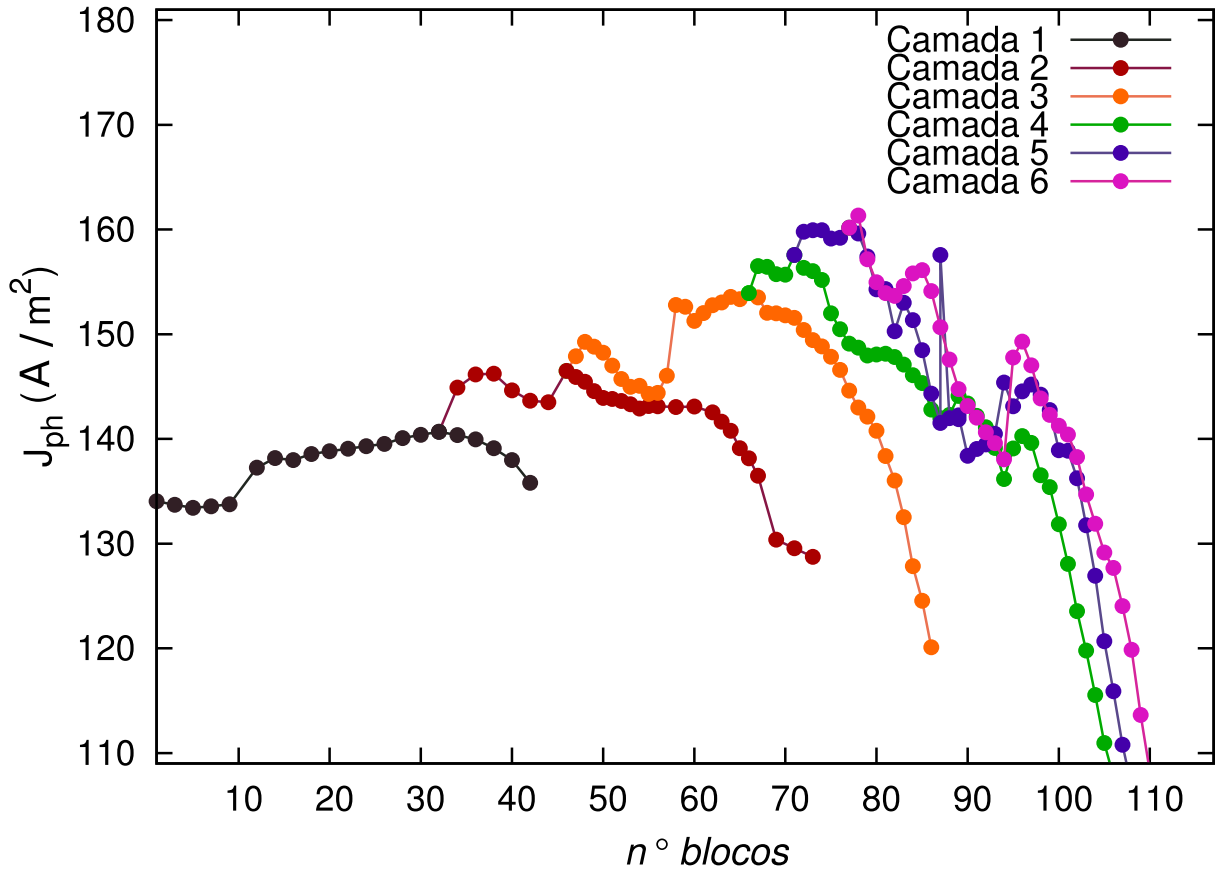
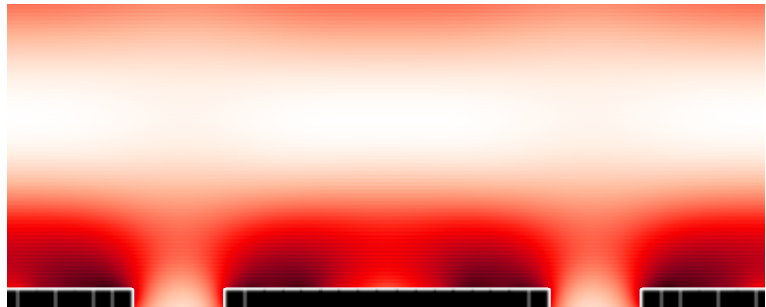
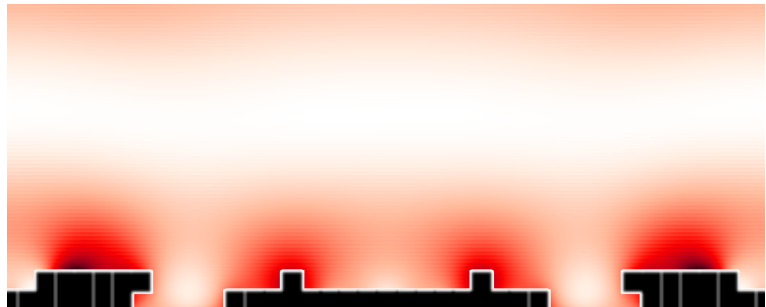


Figura 7.50 Gráfico de J_{ph} para otimização geométrica automática por camadas com bloco elementar de lado $0.05 \mu\text{m}$.

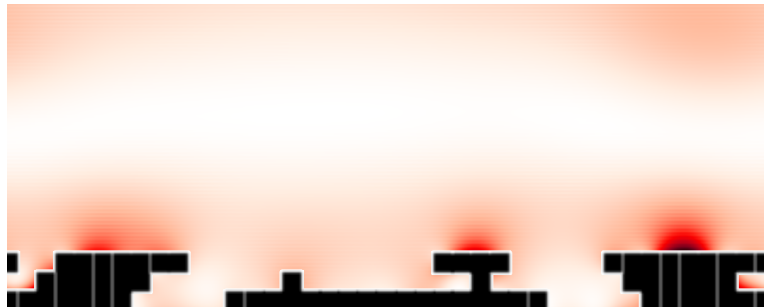
Os resultados obtidos para a otimização geométrica automática com restrição de camada indicam que apesar do resultado significativamente melhor com o tamanho de bloco maior, para os tamanhos de bloco menor o processo de otimização não apresenta a mesma vantagem por surgirem defeitos de posicionamento que impedem a boa distribuição dos blocos de camadas superiores. Portanto, blocos pequenos demonstram maior dificuldade em se organizar em camadas e em estruturas verticais, por esse motivo sua eficiência acaba diminuindo por ocorrerem menos reflexões.



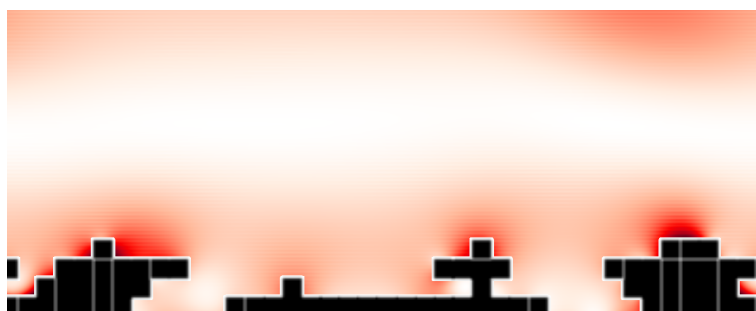
(a) Camada 1.



(b) Camada 2.



(c) Camada 3.



(d) Camada 4.



(e) Camada 5.



(f) Camada 6.

Figura 7.50 Campo da energia total para a textura obtida pelo algoritmo construtal com crescimento por camadas para um bloco elementar de lado $0.05 \mu\text{m}$.

7.2.3 Comparação dos modos de otimização automática e geometrias geradas aleatoriamente

Os melhores resultados para otimização automática livre e restrita por camadas foram sumarizados na Tab. 5. Os resultados mostram como o processo de construção sem restrições se adaptou melhor ao problema do que quando mantida a restrição por camadas. A única exceção ocorre para o maior tamanho de bloco elementar devido a uma maior facilidade dos blocos em se agruparem verticalmente.

Tabela 5: Melhores resultados de otimização automática livre e restrita juntamente com o número de blocos e área correspondente. Todas otimizações ocorreram com um $sx = 1 \mu\text{m}$.

Lado do bloco elementar (μm)	Modo de otimização geométrica					
	Automática livre			Automática restrita por camadas		
	J_{ph} (A/m^2)	Nº blocos	Área (μm^2)	J_{ph} (A/m^2)	Nº blocos	Área (μm^2)
0.1	148.733	8	0.08	154.052	8	0.08
0.05	168.521	28	0.07	152.779	5	0.0125
0.025	171.390	158	0.09875	156.129	78	0.04875

A fim de determinar a capacidade do algoritmo de otimização automática em melhorar a performance conforme sua execução, foram simuladas 20 estruturas posicionando blocos elementares de forma aleatória no espaço disponível mantendo a continuidade entre os blocos. Os números de blocos adicionados coincidiu com o número de blocos que atingiu a máxima performance na otimização geométrica automática livre para o tamanho de bloco elementar sendo testado. A média da fotocorrente total gerada foi calculada para essas estruturas assim como seu desvio padrão. Os resultados são mostrados na Tab. 6.

Tabela 6: Comparação das médias de J_{ph} obtidas a partir de geração aleatória com o J_{ph} obtido pelo método de otimização geométrica automática livre para os diferentes tamanhos de blocos elementares testados.

Lado do bloco elementar	Número de blocos	J_{ph} médio por geração aleatória	Desvio de J_{ph} por geração aleatória	J_{ph} por otimização automática livre
0.1 μm	8	132.910 A/m^2	3.32 A/m^2	148.733 A/m^2
0.05 μm	28	133.828 A/m^2	2.70 A/m^2	168.521 A/m^2
0.025 μm	158	135.232 A/m^2	4.06 A/m^2	171.390 A/m^2

A partir da comparação feita pela Tab. 6 e da comparação dos resultados de otimização automática com a otimização com geometria fixa, pode-se concluir que o método de otimização geométrica automática livre é eficaz para otimizar a geometria de uma célula solar para prover maior absorção da luz. Logo, a Teoria Construtal se confirma também no problema de confinamento de luz em células solares de forma que a existência de uma função de controle (ϕ) que produz o design de forma determinística é válida para realizar a otimização geométrica do problema.

8 CONCLUSÕES

O problema de otimizar a geometria da textura de uma célula solar para aumentar a absorção de luz foi tratado tendo como base a Teoria Construtal que prevê a criação determinística do design. O modelo numérico aplicado para resolver o problema eletromagnético foi o de diferenças finitas no domínio do tempo (FDTD) conforme implementado no pacote de código-livre MEEP. Dois modos de otimização geométrica foram aplicados nesse trabalho: a otimização geométrica com restrição de forma variando os parâmetros geométricos de enxertos de formas pré-definidas que formam a textura da célula e mantendo constante a quantidade de material no enxerto; e a otimização geométrica automática que cria a textura pela montagem de bloco elementares de tamanho pré-definido posicionados de acordo com a função de controle, no caso, a energia total do campo eletromagnético. A otimização geométrica automática foi aplicada no modo livre em que os blocos eram posicionados de acordo com a função de controle mantendo apenas a continuidade durante o posicionamento, e no modo restrito por camadas em que cada camada era otimizada individualmente.

Para a otimização geométrica com restrição de forma foram procurados valores ótimos das dimensões dos enxertos hf e lf mantendo a área total do enxerto fixa em $0.01 \mu\text{m}^2$ e $0.1 \mu\text{m}^2$, enquanto o espaçamento entre enxertos (sx) foi mantido fixo em $1 \mu\text{m}$. Nesse caso, o melhor resultado foi obtido com a textura com formato triangular com $hf_o = 3.333 \mu\text{m}$ e $lf_o = 0.06 \mu\text{m}$ e área $0.1 \mu\text{m}^2$ alcançando 26.1% de aumento de performance relativa a célula sem textura, isto, a textura absorve 26.1% mais luz que uma célula de superfície lisa. Uma vez encontrados os valores ótimos de hf e lf para cada uma das formas de enxertos testados, foi variado o valor do espaçamento entre os enxertos, sx . Finalmente, a melhor geometria para a otimização geométrica com restrição de forma foi obtida com um enxerto de extremidade circular ($hf_o = 0.6593 \mu\text{m}$ e $lf_o = 0.14 \mu\text{m}$) com área de enxerto $0.1 \mu\text{m}^2$ e espaçamento entre enxertos (período), $sx_o = 0.4 \mu\text{m}$ atingindo um aumento de performance relativa de 63.3%.

Construindo a textura pelo modo automático livre, a partir da função de controle, com um período de $1 \mu\text{m}$ e área de até $0.1 \mu\text{m}^2$ o aumento de performance relativa obtido foi de 31.9% para um bloco elementar de lado $0.025 \mu\text{m}$. Apesar de inferior ao máximo obtido com geometrias fixas, esse valor é maior que o obtido com geometrias fixas com o mesmo sx . Para blocos elementares maiores, o aumento de performance alcançado foi de 30.226% para o bloco elementar de lado $0.05 \mu\text{m}$ e 14.389% para o bloco elementar de lado $0.1 \mu\text{m}$. A otimização automática por camadas não foi capaz de superar a otimização automática livre, exceto para o maior tamanho de bloco elementar de $0.1 \mu\text{m}$. Vale ressaltar que melhoramentos nesses resultados não devem ser alcançados ao continuar reduzindo o tamanho de bloco elementar na otimização automática, ao menos usando o modelo matemático aqui aplicado, uma vez que efeitos quânticos se tornariam muito expressivos e as equações de Maxwell teriam de ser adaptadas ao novo problema para não levar a resultados imprecisos.

Para avaliar a eficiência do método de otimização automática, foram produzidas vinte (20)

texturas aleatoriamente com o mesmo número de blocos elementares que obtiveram os melhores resultados na otimização automática livre para cada tamanho de bloco. Logo, foram calculados as médias e o desvio para cada grupo e comparado com os valores obtidos pela otimização automática livre. Os resultados demonstram que o método de otimização automática é significativamente superior em performance que a simples montagem aleatória de uma textura com o mesmo número de blocos.

Pode-se sumarizar que as melhores estruturas para absorção da luz são as que melhor aliam um bom espalhamento da luz para o interior da célula por difração, capacidade dos enxertos em redirecionar a luz para os sulcos da textura e formato dos enxertos que propicia uma transição suave da frente de onda para o semicondutor. A vantagem das estruturas construídas automaticamente em relação às geometrias restritas se deve a melhor capacidade em se adaptar aos espectros contínuos de radiação pela presença de desordem. A desordem permite difratar diversos comprimentos de onda e ainda explora o espalhamento Rayleigh em um espectro contínuo.

Finalmente, os resultados demonstraram sucesso dos métodos de otimização geométrica da textura em aumentar a absorção de luz em células solares. Conferindo a literatura, esse trabalho é provavelmente a primeira aplicação do método Design Construtal para produzir uma textura de forma determinística capaz de aumentar a absorção de luz em uma célula solar.

REFERÊNCIAS

- AL., B. et. Multiscale transparent electrode architecture for efficient light management and carrier collection in solar cells. **Nano letters**, [S.l.], v.12, n.3, p.1344–1348, 2012.
- ALTINOLUK, S. H.; CIFTPINAR, H. E.; DEMIRCIOGLU, O.; ES, F.; BAYTEMIR, G.; AKAR, O.; AYDEMIR, A.; SARAC, A.; AKIN, T.; TURAN, R. Light Trapping by Micro and Nano-hole Texturing of Single-crystalline Silicon Solar Cells. **Energy Procedia**, [S.l.], v.92, p.291 – 296, 2016. Proceedings of the 6th International Conference on Crystalline Silicon Photovoltaics (SiliconPV 2016).
- ARENT, D. J.; WISE, A.; GELMAN, R. The status and prospects of renewable energy for combating global warming. **Energy Economics**, [S.l.], v.33, n.4, p.584–593, 2011.
- ATWATER, H. A.; POLMAN, A. Plasmonics for improved photovoltaic devices. **Nature materials**, [S.l.], v.9, n.3, p.205, 2010.
- B., B. **Examples of photonic microstructures**. (Acessado em 07/10/2017), <https://www.ise.fraunhofer.de/en/business-areas/solar-thermal-technology/material-research-and-optics/microstructured-surfaces/beispiele-photonischer-mikrostrukturen.html>.
- BARUGKIN, C.; ALLEN, T.; CHONG, T. K.; WHITE, T. P.; WEBER, K. J.; CATCHPOLE, K. R. Light trapping efficiency comparison of Si solar cell textures using spectral photoluminescence. **Optics Express**, [S.l.], v.23, n.7, p.A391–A400, 2015.
- BATES, J.; HILL, N. The Role of Physics in Renewable Energy RD&D. **A report produced for the Institute of Physics by Future Energy Solutions**, [S.l.], 2005.
- BATTAGLIA, C.; HSU, C.-M.; SODERSTROM, K.; ESCARRÉ, J.; HAUG, F.-J.; CHARRIÈRE, M.; BOCCARD, M.; DESPEISSE, M.; ALEXANDER, D. T.; CANTONI, M. et al. Light trapping in solar cells: can periodic beat random? **ACS nano**, [S.l.], v.6, n.3, p.2790–2797, 2012.
- BEJAN, A. Constructal-theory network of conducting paths for cooling a heat generating volume. **International Journal of Heat and Mass Transfer**, [S.l.], v.40, n.4, p.799–816, 1997.
- BEJAN, A. **Shape and structure, from engineering to nature**. [S.l.]: Cambridge university press, 2000.
- BEJAN, A. Dendritic constructal heat exchanger with small-scale crossflows and larger-scales counterflows. **International Journal of Heat and Mass Transfer**, [S.l.], v.45, n.23, p.4607–4620, 2002.

- BEJAN, A. Designed porous media: maximal heat transfer density at decreasing length scales. **International Journal of Heat and Mass Transfer**, [S.l.], v.47, n.14, p.3073–3083, 2004.
- BEJAN, A.; BADESCU, V.; DE VOS, A. Constructal theory of economics. **Applied Energy**, [S.l.], v.67, n.1, p.37–60, 2000.
- BEJAN, A.; ERRERA, M. R. Deterministic tree networks for fluid flow: geometry for minimal flow resistance between a volume and one point. **Fractals**, [S.l.], v.5, n.04, p.685–695, 1997.
- BEJAN, A.; LORENTE, S. The constructal law and the thermodynamics of flow systems with configuration. **International journal of heat and mass transfer**, [S.l.], v.47, n.14, p.3203–3214, 2004.
- BEJAN, A.; LORENTE, S. Design with constructal theory. , [S.l.], 2008.
- BEJAN, A.; LORENTE, S. The constructal law of design and evolution in nature. **Philosophical Transactions of the Royal Society of London B: Biological Sciences**, [S.l.], v.365, n.1545, p.1335–1347, 2010.
- BEJAN, A.; MERKX, G. W. **Constructal theory of social dynamics**. [S.l.]: Springer, 2007.
- BERGMANN, R. Crystalline Si thin-film solar cells: a review. **Applied physics A**, [S.l.], v.69, n.2, p.187–194, 1999.
- BHAKTA, A.; BANDYOPADHYAY, S. Constructal optimization of top contact metallization of a photovoltaic solar cell. **International Journal of Thermodynamics**, [S.l.], v.8, n.4, p.175–181, 2005.
- BOHREN, C. F.; HUFFMAN, D. R. **Absorption and scattering of light by small particles**. [S.l.]: John Wiley & Sons, 2008.
- BOSSERT, R.; TOOL, C.; VAN ROOSMALEN, J.; WENTINK, C.; DE VAAN, M. Thin-film solar cells. **Technology Evaluation and Perspectives**, Novem, [S.l.], 2000.
- BOYLE, S. Making a renewable energy future a reality: case studies in successful renewable energy development. **Renewable energy**, [S.l.], v.5, n.5-8, p.1322–1333, 1994.
- BOZZOLA, A.; LISCIDINI, M.; ANDREANI, L. C. Photonic light-trapping versus Lambertian limits in thin film silicon solar cells with 1D and 2D periodic patterns. **Optics express**, [S.l.], v.20, n.102, p.A224–A244, 2012.
- CATCHPOLE, K.; POLMAN, A. Design principles for particle plasmon enhanced solar cells. **Applied Physics Letters**, [S.l.], v.93, n.19, p.191113, 2008.
- CHEN, L. Progress in study on constructal theory and its applications. **Science China Technological Sciences**, [S.l.], v.55, n.3, p.802–820, 2012.

- CHEN, L.; WEI, S.; SUN, F. Constructal entransy dissipation rate minimization of a disc. **International Journal of Heat and Mass Transfer**, [S.l.], v.54, n.1, p.210–216, 2011.
- CHEN, L.; ZHOU, S.; SUN, F. Constructal minimization of emitter grid resistance of solar cell with variable cross-section collectors. **Indian Journal of Pure and Applied Physics**, [S.l.], v.48, n.8, p.586–592, 2010.
- CHEN, S.; ORDONEZ, J. C.; VARGAS, J. V.; GARDOLINSKI, J. E.; GOMES, M. A. Transient operation and shape optimization of a single PEM fuel cell. **Journal of Power Sources**, [S.l.], v.162, n.1, p.356–368, 2006.
- CHEW, W. C.; MICHIELSEN, E.; SONG, J.; JIN, J.-M. **Fast and efficient algorithms in computational electromagnetics**. [S.l.]: Artech House, Inc., 2001.
- CHIU, K.-C.; CHANG, S.-L.; HUANG, C.-Y.; GUAN, H.-W. Fabricating microstructures using a modified optical-disc process. , [S.l.], 2011.
- CHU, S.-T.; CHAUDHURI, S. K. A finite-difference time-domain method for the design and analysis of guided-wave optical structures. **Lightwave Technology, Journal of**, [S.l.], v.7, n.12, p.2033–2038, 1989.
- CHU, Y. Review and comparison of different solar energy technologies. **Global Energy Network Institute (GENI), San Diego, CA**, [S.l.], 2011.
- COLLINO, F.; MONK, P. B. Optimizing the perfectly matched layer. **Computer methods in applied mechanics and engineering**, [S.l.], v.164, n.1-2, p.157–171, 1998.
- CUONY, P.; ALEXANDER, D. T.; PEREZ-WURFL, I.; DESPEISSE, M.; BUGNON, G.; BOCCARD, M.; SODERSTROM, T.; HESSLER-WYSER, A.; HEBERT, C.; BALLIF, C. Silicon Filaments in Silicon Oxide for Next-Generation Photovoltaics. **Advanced Materials**, [S.l.], v.24, n.9, p.1182–1186, 2012.
- DEHGHANPOUR, H.; PARVIN, P.; ABDOLAH, S. Performance enhancement of solar panel by surface texturing using ArF excimer laser. **Optik - International Journal for Light and Electron Optics**, [S.l.], v.126, n.24, p.5496 – 5498, 2015.
- EISENHAUER, D.; JÄGER, K.; KÖPPEL, G.; RECH, B.; BECKER, C. Optical Properties of Smooth Anti-reflective Three-dimensional Textures for Silicon Thin-film Solar Cells. **Energy Procedia**, [S.l.], v.102, p.27–35, 2016.
- EMODI, N. V.; EBELE, N. E. Policies Enhancing Renewable Energy Development and Implications for Nigeria. **Sustainable Energy**, [S.l.], v.4, n.1, p.7–16, 2016.
- FAÿ, S.; STEINHAUSER, J.; NICOLAY, S.; BALLIF, C. Polycrystalline ZnO: b grown by lpcvd as tco for thin film silicon solar cells. **Thin Solid Films**, [S.l.], v.518, n.11, p.2961–2966, 2010.

- FERRY, V. E.; VERSCHUUREN, M. A.; LI, H. B.; VERHAGEN, E.; WALTERS, R. J.; SCHROPP, R. E.; ATWATER, H. A.; POLMAN, A. Light trapping in ultrathin plasmonic solar cells. **Optics express**, [S.l.], v.18, n.102, p.A237–A245, 2010.
- FUJIBAYASHI, T.; MATSUI, T.; KONDO, M. Improvement in quantum efficiency of thin film Si solar cells due to the suppression of optical reflectance at transparent conducting oxide/Si interface by TiO₂/ZnO antireflection coating. **Applied physics letters**, [S.l.], v.88, n.18, p.3508, 2006.
- GHARGHI, M.; FATHI, E.; KANTE, B.; SIVOTHTHAMAN, S.; ZHANG, X. Heterojunction silicon microwire solar cells. **Nano letters**, [S.l.], v.12, n.12, p.6278–6282, 2012.
- GRÄTZEL, M. Solar energy conversion by dye-sensitized photovoltaic cells. **Inorganic chemistry**, [S.l.], v.44, n.20, p.6841–6851, 2005.
- GREEN, M. A.; EMERY, K.; HISHIKAWA, Y.; WARTA, W.; DUNLOP, E. D. Solar cell efficiency tables (Version 45). **Progress in photovoltaics: research and applications**, [S.l.], v.23, n.1, p.1–9, 2015.
- GREEN, M. A.; KEEVERS, M. J. Optical properties of intrinsic silicon at 300 K. **Progress in Photovoltaics: Research and Applications**, [S.l.], v.3, n.3, p.189–192, 1995.
- GREULICH, J.; VOLK, A.-K.; WÖHRLE, N.; HAEDRICH, I.; WIESE, M.; HERMLE, M.; REIN, S. Optical Simulation and Analysis of Iso-textured Silicon Solar Cells and Modules Including Light Trapping. **Energy Procedia**, [S.l.], v.77, p.69 – 74, 2015. 5th International Conference on Silicon Photovoltaics, SiliconPV 2015.
- HAGNESS, S.; TAFLOVE, A. Computational electrodynamics: the finite-difference time-domain method. **Norwood, MA: Artech House**, [S.l.], 2000.
- HALL, R. Silicon photovoltaic cells. **Solid-State Electronics**, [S.l.], v.24, n.7, p.595–616, 1981.
- HAN, S.-Y.; PAUL, B. K.; CHANG, C.-h. Nanostructured ZnO as biomimetic anti-reflective coatings on textured silicon using a continuous solution process. **Journal of Materials Chemistry**, [S.l.], v.22, n.43, p.22906–22912, 2012.
- HONGSINGTHONG, A.; KRAJANGSANG, T.; YUNAZ, I. A.; MIYAJIMA, S.; KONAGAI, M. ZnO films with very high haze value for use as front transparent conductive oxide films in thin-film silicon solar cells. **Applied physics express**, [S.l.], v.3, n.5, p.051102, 2010.
- HU, F.; SUN, Y.; ZHA, J.; CHEN, K.; ZOU, S.; FANG, L.; SU, X. Pre-texturing multicrystalline silicon wafer via a two-step alkali etching method to achieve efficient nanostructured solar cells. **Solar Energy Materials and Solar Cells**, [S.l.], v.159, p.121 – 127, 2017.

- HUANG, W.; CHU, S.; GOSS, A.; CHAUDHURI, S. A scalar finite-difference time-domain approach to guided-wave optics. **IEEE Photonics technology letters**, [S.l.], v.3, n.6, p.524–526, 1991.
- ISABELLA, O.; DOBROVOLSKIY, S.; KROON, G.; ZEMAN, M. Design and application of dielectric distributed Bragg back reflector in thin-film silicon solar cells. **Journal of Non-Crystalline Solids**, [S.l.], v.358, n.17, p.2295–2298, 2012.
- JIN, J.-M. **The finite element method in electromagnetics**. [S.l.]: John Wiley & Sons, 2014.
- JOANNOPOULOS, J. D.; JOHNSON, S. G.; WINN, J. N.; MEADE, R. D. **Photonic crystals: molding the flow of light**. [S.l.]: Princeton university press, 2011.
- JOUCAVIEL, M.; GOSSELIN, L.; BELLO-OCHEDE, T. Maximum heat transfer density with rotating cylinders aligned in cross-flow. **International Communications in Heat and Mass Transfer**, [S.l.], v.35, n.5, p.557–564, 2008.
- KACIMOV, A. Optimal design of fibers subject to steady heat conduction. **Heat and mass transfer**, [S.l.], v.43, n.4, p.319–324, 2007.
- KHAN, M. I. **A Study on the optimization of dye-sensitized solar cells**. [S.l.]: University of South Florida, 2013.
- KIM, S.; KASASHIMA, S.; SICHANUGRIST, P.; KOBAYASHI, T.; NAKADA, T.; KONGAI, M. Development of thin-film solar cells using solar spectrum splitting technique. **Solar Energy Materials and Solar Cells**, [S.l.], v.119, p.214–218, 2013.
- KIM, S.; LORENTE, S.; BEJAN, A. Vascularized materials with heating from one side and coolant forced from the other side. **International journal of heat and mass transfer**, [S.l.], v.50, n.17, p.3498–3506, 2007.
- KINTECHLAB, F. **Fitting of dielectric function**. (Accessed on 01/11/2017), <http://fdtd.kintechlab.com/en/fitting>.
- KITTEL, C. **Introduction to solid state physics**. [S.l.]: Wiley, 2005.
- KRC, J.; SMOLE, F.; TOPIC, M. Advanced optical design of tandem micromorph silicon solar cells. **Journal of non-crystalline solids**, [S.l.], v.352, n.9, p.1892–1895, 2006.
- KRC, J.; ZEMAN, M.; CAMPA, A.; SMOLE, F. et al. Novel approaches of light management in thin-film silicon solar cells. In: MRS PROCEEDINGS, 2006. **Anais...** [S.l.: s.n.], 2006. v.910, p.0910–A25.
- KREWITT, W.; NIENHAUS, K.; KLESSMANN, C.; CAPONE, C.; STRICKER, E.; GRAUS, W.; HOOGWIJK, M.; SUPERSBERGER, N.; WINTERFELD, U. v.; SAMADI, S. Role and potential of renewable energy and energy efficiency for global energy supply. , [S.l.], 2012.

- KUDDUSI, L.; DENTON, J. C. Analytical solution for heat conduction problem in composite slab and its implementation in constructal solution for cooling of electronics. **Energy Conversion and Management**, [S.l.], v.48, n.4, p.1089–1105, 2007.
- LEDEZMA, G.; BEJAN, A.; ERRERA, M. Constructal tree networks for heat transfer. **Journal of Applied Physics**, [S.l.], v.82, n.1, p.89–100, 1997.
- LEVI, A. The Lorentz oscillator model. **Essential Classical Mechanics for Device Physics**, [S.l.], 2016.
- LIN, X.; HUA, X.; HUANG, Z.; SHEN, W. Realization of high performance silicon nanowire based solar cells with large size. **Nanotechnology**, [S.l.], v.24, n.23, p.235402, 2013.
- LUNDGREN, C.; LOPEZ, R.; REDWING, J.; MELDE, K. FDTD modeling of solar energy absorption in silicon branched nanowires. **Optics express**, [S.l.], v.21, n.103, p.A392–A400, 2013.
- LUO, L.; TONDEUR, D.; LE GALL, H.; CORBEL, S. Constructal approach and multi-scale components. **Applied Thermal Engineering**, [S.l.], v.27, n.10, p.1708–1714, 2007.
- MA, X.-B.; ZHANG, W.-J.; ZHANG, W.; MA, Q.; FAN, Z.-Q.; MA, D.-H.; JIANG, Z.-Y.; ZHANG, Y.-L. Application of SiO_x:h/bi-sinx:h/siox:h stacked coatings embedded by silicon nanocrystals on crystalline silicon solar cells with nanowire texturing. **Thin Solid Films**, [S.l.], p.–, 2017.
- MAXWELL, J. C. VIII. A dynamical theory of the electromagnetic field. **Philosophical transactions of the Royal Society of London**, [S.l.], v.155, p.459–512, 1865.
- MEEP. **Meep - AbInitio**. (Accessed on 01/11/2017), <http://ab-initio.mit.edu/wiki/index.php/Meep>.
- MEIER, M.; PAETZOLD, U. W.; GHOSH, M.; ERVEN, R. van. Periodic nano-textures enhance efficiency in multi-junction silicon thin-film solar cells. **physica status solidi (a)**, [S.l.], v.212, n.1, p.30–35, 2015.
- MEILLAUD, F.; SHAH, A.; DROZ, C.; VALLAT-SAUVAIN, E.; MIAZZA, C. Efficiency limits for single-junction and tandem solar cells. **Solar energy materials and solar cells**, [S.l.], v.90, n.18, p.2952–2959, 2006.
- MIGUEL, A. F. Constructal design of solar energy-based systems for buildings. **Energy and Buildings**, [S.l.], v.40, n.6, p.1020–1030, 2008.
- MOELLER, D. P. **Mathematical and computational modeling and simulation**. [S.l.]: Springer, 2003.

- MOHARAM, M.; GAYLORD, T. Rigorous coupled-wave analysis of planar-grating diffraction. **JOSA**, [S.l.], v.71, n.7, p.811–818, 1981.
- MORAWIEC, S.; MENDES, M. J.; FILONOVICH, S. A.; MATEUS, T.; MIRABELLA, S.; ÁGUAS, H.; FERREIRA, I.; SIMONE, F.; FORTUNATO, E.; MARTINS, R. et al. Broad-band photocurrent enhancement in a-Si: h solar cells with plasmonic back reflectors. **Optics express**, [S.l.], v.22, n.104, p.A1059–A1070, 2014.
- MOREGA, A. M.; BEJAN, A. A constructal approach to the optimal design of photovoltaic cells. **International journal of green energy**, [S.l.], v.2, n.3, p.233–242, 2005.
- MÜLLER, J.; RECH, B.; SPRINGER, J.; VANECEK, M. TCO and light trapping in silicon thin film solar cells. **Solar energy**, [S.l.], v.77, n.6, p.917–930, 2004.
- MUZYCHKA, Y. Constructal design of forced convection cooled microchannel heat sinks and heat exchangers. **International Journal of Heat and Mass Transfer**, [S.l.], v.48, n.15, p.3119–3127, 2005.
- MYERS, B.; BERNARDI, M.; GROSSMAN, J. C. Three-dimensional photovoltaics. **Applied Physics Letters**, [S.l.], v.96, n.7, p.071902, 2010.
- OSKOOI, A. F.; ROUNDY, D.; IBANESCU, M.; BERMEL, P.; JOANNOPOULOS, J. D.; JOHNSON, S. G. MEEP: a flexible free-software package for electromagnetic simulations by the fdtd method. **Computer Physics Communications**, [S.l.], v.181, n.3, p.687–702, 2010.
- PARK, J.; RAO, J.; KIM, T.; VARLAMOV, S. Highest efficiency plasmonic polycrystalline silicon thin-film solar cells by optimization of plasmonic nanoparticle fabrication. **Plasmonics**, [S.l.], v.8, n.2, p.1209–1219, 2013.
- PEDROTTI, V. A. **Otimização geométrica de arranjos tubulares submetido a escoamento externo utilizando Constructal Design**. 2015. Disserta — Universidade Federal do Rio Grande, Rio Grande.
- PETTERSSON, L. A.; ROMAN, L. S.; INGANAS, O. Modeling photocurrent action spectra of photovoltaic devices based on organic thin films. **Journal of Applied Physics**, [S.l.], v.86, n.1, p.487, 1999.
- PINHO, J. T.; GALDINO, M. A. Manual de engenharia para sistemas fotovoltaicos. **Rio de Janeiro: CEPEL**, [S.l.], 2014.
- QUANXI, J.; ENKE, L. A method for the direct measurement of the solar cell junction ideality factor. **Solar cells**, [S.l.], v.22, n.1, p.15–21, 1987.
- RAMPLEY, C.; LAVER, F.; WOOD, T. **Three-dimensional solar cell having increased efficiency**. US Patent 8,790,947.

- REIS, A. H. Constructal theory: from engineering to physics, and how flow systems develop shape and structure. **Applied mechanics reviews**, [S.l.], v.59, n.5, p.269–282, 2006.
- REIS, A. H.; BEJAN, A. Constructal theory of global circulation and climate. **International Journal of Heat and Mass Transfer**, [S.l.], v.49, n.11, p.1857–1875, 2006.
- SAHAYA, A.; SETHIA, V.; TIWARIB, A. Cost performance of thin film and crystalline photovoltaic cells—a comparative study. **Int. J. Curr. Eng. Technol**, [S.l.], v.3, n.3, p.1139–1142, 2013.
- SAI, H.; KANAMORI, Y.; ARAFUNE, K.; OHSHITA, Y.; YAMAGUCHI, M. Light trapping effect of submicron surface textures in crystalline Si solar cells. **Progress in Photovoltaics: Research and Applications**, [S.l.], v.15, n.5, p.415–423, 2007.
- SAKAKI, H.; TANOUE, T.; YOKOYAMA, K.; SUN, D. C.; SEKIGUCHI, Y.; YUKIMOTO, Y. Design and Performances of a Triple (GaAs, Si, and Ge)-Solar-cell System with Multi-layered Spectrum Splitters. **Japanese Journal of Applied Physics**, [S.l.], v.20, n.S2, p.127, 1981.
- SALEH, B. E.; TEICH, M. C.; SALEH, B. E. **Fundamentals of photonics**. [S.l.]: Wiley New York, 1991. v.22.
- SANTBERGEN, R.; BLANKER, J.; DHATHATHREYAN, A.; TAN, H.; SMETS, A. H.; ZEMAN, M. Towards Lambertian internal light scattering in solar cells using coupled plasmonic and dielectric nanoparticles as back reflector. In: PHOTOVOLTAIC SPECIALISTS CONFERENCE (PVSC), 2013 IEEE 39TH, 2013. **Anais. . .** [S.l.: s.n.], 2013. p.0029–0033.
- SCHUSTER, C. S. Nanostructures for Enhanced Light-Trapping in Thin-Film Silicon Solar Cells. In: **Diffraction Optics for Thin-Film Silicon Solar Cells**. [S.l.]: Springer, 2017. p.11–51.
- SHEN, H.; YUWEN, Y.; WANG, X.; RAMIREZ, J. I.; LI, Y. V.; KE, Y.; KENDRICK, C. E.; PODRAZA, N. J.; JACKSON, T. N.; DICKEY, E. C. et al. Effect of c-Si doping density on heterojunction with intrinsic thin layer (HIT) radial junction solar cells. In: PHOTOVOLTAIC SPECIALISTS CONFERENCE (PVSC), 2013 IEEE 39TH, 2013. **Anais. . .** [S.l.: s.n.], 2013. p.2466–2469.
- SHENG, X.; JOHNSON, S. G.; MICHEL, J.; KIMERLING, L. C. Optimization-based design of surface textures for thin-film Si solar cells. **Optics Express**, [S.l.], v.19, n.104, p.A841–A850, 2011.
- SHOCKLEY, W.; QUEISSER, H. J. Detailed balance limit of efficiency of p-n junction solar cells. **Journal of applied physics**, [S.l.], v.32, n.3, p.510–519, 1961.

- SIMONSEN, I.; LARSEN, Å.; ANDREASSEN, E.; OMMUNDSEN, E.; NORD-VARHAUG, K. Haze of surface random systems: an approximate analytic approach. **Physical Review A**, [S.l.], v.79, n.6, p.063813, 2009.
- SÖDERSTRÖM, K.; BUGNON, G.; BIRON, R.; PAHUD, C.; MEILLAUD, F.; HAUG, F.-J.; BALLIF, C. Thin-film silicon triple-junction solar cell with 12.5% stable efficiency on innovative flat light-scattering substrate. **Journal of Applied Physics**, [S.l.], v.112, n.11, p.114503, 2012.
- SOLNTSEV, S.; ZEMAN, M. Optical modeling of thin-film silicon solar cells with submicron periodic gratings and nonconformal layers. **Energy Procedia**, [S.l.], v.10, p.308–312, 2011.
- SUTTHANA, S.; WONGRATANAPHISAN, D.; GARDCHAREON, A.; PHADUNGDHITIDHADA, S.; RUANKHAM, P.; CHOOPUN, S. Enhancement of ZnO dye-sensitized solar cell performance by modifying photoelectrodes using an acid vapor texturing process. **Surface and Coatings Technology**, [S.l.], v.306, Part A, p.30 – 34, 2016. The 19th International Conference on Surface Modification of Materials by Ion Beams [SMMIB2015].
- TAFLOVE, A.; HAGNESS, S. C. et al. Computational electrodynamics: the finite-difference time-domain method. **Norwood, 2nd Edition, MA: Artech House, 1995**, [S.l.], 1995.
- THÉRIAULT, O. **Analysis of the External Quantum Efficiency of Quantum Dot-enhanced Multijunction Solar Cells**. 2015. Tese — Université d'Ottawa/University of Ottawa.
- VARGAS, J. V.; BEJAN, A. Thermodynamic optimization of internal structure in a fuel cell. **International Journal of Energy Research**, [S.l.], v.28, n.4, p.319–339, 2004.
- VIANNA, J. C. B. **Projeto de Cavidades de Resfriamento através do Desenvolvimento de Algoritmo Evolutivo Baseado na Teoria Construtal**. 2016. Dissert. — Universidade Federal do Rio Grande, Rio Grande.
- VIANNA, J. C. B.; ESTRADA, E. d. S. D.; ISOLDI, L. A.; SANTOS, E. D. dos; SOUZA, J. A. A new Constructal Theory based algorithm applied to thermal problems. **International Journal of Thermal Sciences**, [S.l.], v.126, p.118–124, 2018.
- WANG, H.; DAI, W.; BEJAN, A. Optimal temperature distribution in a 3D triple-layered skin structure embedded with artery and vein vasculature and induced by electromagnetic radiation. **International Journal of Heat and Mass Transfer**, [S.l.], v.50, n.9, p.1843–1854, 2007.
- WANG, K. X.; YU, Z.; LIU, V.; CUI, Y.; FAN, S. Absorption enhancement in ultrathin crystalline silicon solar cells with antireflection and light-trapping nanocone gratings. **Nano letters**, [S.l.], v.12, n.3, p.1616–1619, 2012.

- WEILAND, T. A discretization model for the solution of Maxwell's equations for six-component fields. **Archiv Elektronik und Uebertragungstechnik**, [S.l.], v.31, p.116–120, 1977.
- YABLONOVITCH, E.; CODY, G. D. Intensity enhancement in textured optical sheets for solar cells. **Electron Devices, IEEE Transactions on**, [S.l.], v.29, n.2, p.300–305, 1982.
- YABLONOVITCH, E.; MILLER, O. D.; KURTZ, S. R. The opto-electronic physics that broke the efficiency limit in solar cells. In: PHOTOVOLTAIC SPECIALISTS CONFERENCE (PVSC), 2012 38TH IEEE, 2012. **Anais...** [S.l.: s.n.], 2012. p.001556–001559.
- YAN, B.; SIVEC, L.; YUE, G.; JIANG, C.-S.; YANG, J.; GUHA, S. Effect of dual-function nano-structured silicon oxide thin film on multi-junction solar cells. In: PHOTOVOLTAIC SPECIALISTS CONFERENCE (PVSC), 2011 37TH IEEE, 2011. **Anais...** [S.l.: s.n.], 2011. p.002560–002565.
- YEE, K. S. et al. Numerical solution of initial boundary value problems involving Maxwell's equations in isotropic media. **IEEE Trans. Antennas Propag**, [S.l.], v.14, n.3, p.302–307, 1966.
- YU, Z.; RAMAN, A.; FAN, S. Fundamental limit of nanophotonic light trapping in solar cells. **Proceedings of the National Academy of Sciences**, [S.l.], v.107, n.41, p.17491–17496, 2010.
- YUE, G.; SIVEC, L.; OWENS, J. M.; YAN, B.; YANG, J.; GUHA, S. Optimization of back reflector for high efficiency hydrogenated nanocrystalline silicon solar cells. **Applied physics letters**, [S.l.], v.95, n.26, p.263501, 2009.
- ZEMAN, M.; ISABELLA, O.; SOLNTSEV, S.; JÄGER, K. Modelling of thin-film silicon solar cells. **Solar Energy Materials and Solar Cells**, [S.l.], v.119, p.94–111, 2013.
- ZHOU, H.; CHEN, Q.; LI, G.; LUO, S.; SONG, T.-b.; DUAN, H.-S.; HONG, Z.; YOU, J.; LIU, Y.; YANG, Y. Interface engineering of highly efficient perovskite solar cells. **Science**, [S.l.], v.345, n.6196, p.542–546, 2014.

APÊNDICES

Apêndice A - Código utilizado para otimização geométrica com restrição de forma

```
#!/bin/sh

### Esse código é um exemplo usando a textura com enxerto de ponta circular ###
### outras formas geométricas requerem a modificação apropriada na geometria. ###

### A linguagem BASH é usada para fazer a interface do código com o linux e ###
### realizar os loops, a linguagem SCHEME é interpretada pelo software MEEP e ###
### a linguagem PYTHON é utilizada para pós-processamento dos dados do MEEP. ###

arquivo=circular
### As simulações estão padronizadas com frequências de 1.42 - 2.57 ###
### correspondendo ao comprimento de onda visível em unidades MEEP. ###

##### ARQUIVO .CTL BASE DA SIMULACAO #####
##### Linguagem SCHEME #####
cat > $arquivo.ctl << EOF
; CALCULO DE REFERENCIA
;parametros da celula
(define a 1) ; periodo em microns
(define-param sx 0) ;; DEFINIDO NA LINHA DE COMANDO
(define-param sy 0) ;; DEFINIDO NA LINHA DE COMANDO

;;PREFIXO ARQUIVO, COMANDO PARA CRIAR DIRETORIO COM MESMO NOME
;;PREFIXO ARQUIVO, COMANDO PARA CRIAR DIRETORIO OU SUFIXO COM MESMO NOME
(define-param prefixo "prefixo-arquivo")
(set! filename-prefix prefixo )
(use-output-directory prefixo)

;; RESOLUCAO, PML, RETROREFLETOR
(define-param res_value 0) ;; DEFINIDO NA LINHA DE COMANDO
(define pmlt 1) ; espessura pml
(define backt 1) ; espessura retrorefletor

;;PARAMETROS DA GEOMETRIA

;;FREQUENCIAS DA FONTE

;;TEMPO SIMULACAO

;DADOS PARA CALCULO DE PERFORMANCE
(define-param fcen 2)
(define-param df 1.16)
(define-param nfreq 301)
(define decayf 1e-5)
(define mylambda (/ fcen))
(define bufft (/ mylambda 2)) ; espessura de buffer
(define t (+ pmlt sit backt bufft)) ; espessura base da celula
(define ysrc (- (/ sy 2) pmlt bufft))
(define yrefl (- ysrc (/ bufft 4))) ; coord y da linha de reflexao
(define ytrans (- t (/ sy 2) sit backt (/ bufft 2))) ; coord y da linha de transmissao
(define ysilicon (- (- t (/ sit 2)) (/ sy 2)))

(set! geometry-lattice (make lattice (size sx sy no-size)))

(set! sources (list (make source
```

```

(src (make gaussian-src (frequency fcen) (fwidth df)))
(component Ez) (size sx 0) (center 0 ysrc))))

(define k-point (vector3 0 0 0))

(set! pml-layers (list (make pml (direction Y) (thickness pmlt)))) ; cria pml só na direção y

(set! resolution res_value)
;; running routine

(define trans (add-flux fcen df nfreq
  (make flux-region (center 0 ytrans ) (size sx 0 ))))
(define refl (add-flux fcen df nfreq
  (make flux-region (center 0 yrefl ) (size sx 0 ))))

(print "Defined flux regions.")

; homogeneous run -- para ter os campos de referencia
(define-param ysilicon (- (- t (/ sit 2)) (/ sy 2)) )
(run-until (stop-when-fields-decayed 50 Ez (vector3 ysilicon) decayf))
(display-fluxes trans refl)
(save-flux "refl-flux" refl)

(reset-meep)

;parametros da celula
(define a 1) ; periodicity in microns
(define-param sx 0) ;; DEFINIDO NA LINHA DE COMANDO
(define-param sy 0) ;; DEFINIDO NA LINHA DE COMANDO

;; RESOLUCAO, PML, RETROREFLETOR
(define-param res_value 0) ;; DEFINIDO NA LINHA DE COMANDO
(define pmlt 1) ; espessura pml
(define backt 1) ; espessura retrorefletor

;;PARAMETROS DA FONTE
(define-param fcen 2)
(define-param df 1.16)
(define-param nfreq 301)
(define decayf 1e-5)
(define mylambda (/ fcen))
(define bufft (/ mylambda 2)) ; espessura de buffer
(define t (+ pmlt sit backt bufft )) ; espessura base da celula
(define ysrc (- (/ sy 2) pmlt bufft))

;;PARAMETROS DA GEOMETRIA
;; DEFINIDOS NA LINHA DE COMANDO
(define-param sit 0) ; espessura silicio base
(define-param hf 0) ; altura das aletas
(define-param nf 1) ; numero de aletas
(define-param lf 0) ; largura das aletas
(define sf (- (/ sx nf) lf)) ; espacamento das aletas
(define f 1)

;;FREQUENCIAS DA FONTE
(define-param f0 1.43) ; inicial
(define-param fmax 2.56) ; final
(define-param nfreqsrc 10) ; quantas partes
(define-param dfsrc (/ (- fmax f0) nfreqsrc ))

```

```

;;TEMPO SIMULACAO
;(define tfinal (+ (* 1 (- sy pmlt bufft hf t)) (* (/ 0.1523) hf)))
;(define tfinal 18.15)
(define-param tfinal 300)
(define-param t2 5)
(define-param t3 5)
(define-param t4 5)

;DADOS PARA CALCULO DE PERFORMANCE
(define yrefl (- ysrc (/ bufft 4))) ; coord y da linha de reflexao
(define ytrans (- t (/ sy 2) sit backt (/ bufft 2)) ) ; coord y da linha de transmissao
(define ysilicon (- (- t (/ sit 2)) (/ sy 2)) )

;retrorefletor
(define-param no-back-reflector? false)
(define-param reflector-mat-num 0)
; 0 = refletor perfeito

;textura
(define-param no-texture? false)

( if (= reflector-mat-num 0) (define backreflmat metal) )

;parametros de materiais
(define silicon_m
  (make dielectric (epsilon 1.01)
    (E-susceptibilities
      (make lorentzian-susceptibility
        (frequency 3.64) (gamma (* 2 0) ) (sigma 8))
      (make lorentzian-susceptibility
        (frequency 2.76) (gamma (* 2 0.063) ) (sigma 2.85))
      (make lorentzian-susceptibility
        (frequency 1.73) (gamma (* 2 2.5)) (sigma -0.107))
    )))

;;;CRIAR ENXERTOS
( define ( construct-block x-position layer-number )
  ( append ( list
    (make block ( center x-position (+ (* hf layer-number) (/ hf 2) (- (/ sy 2)) t ) )
      (size lf hf infinity)
      (material silicon_m) )

    (make ellipsoid (center x-position (+ (* hf layer-number) hf (- (/ sy 2)) t ) )
      (size lf lf infinity)
      (material silicon_m) ) ) ) )

;;;POLINOMIO DAS AMPLITUDES
; função que determina a amplitude correspondente a uma da frequencia da luz
; com base na interpolação polinomial do AM1.5G
( define ( amplitude-solar fi)
( let ((a1 -0.788047) (a2 5.84046 ) (a3 -16.5026) (a4 20.6957) (a5 -8.69338) )
  (+ (* a1 (expt fi 4)) (* a2 (expt fi 3)) (* a3 (expt fi 2)) (* a4 (expt fi 1)) a5 ) )
)

;;;LOOP FONTES
( define ( sourceit f0i fmaxi dfi) ; esse codigo cria um loop para inserir varias fontes de frequencias diferentes
  ( append ( list

```

```

        (make source
          (src (make continuous-src (frequency f0i)))
          (amplitude (amplitude-solar f0i)) (component Ez) (size sx 0) (center 0 ysrc) ))

    (if (<= f0i fmaxi)
      ( sourceit (+ f0i dfi) fmaxi dfi) (list ) ) ) )

;; setting run
(set! geometry-lattice (make lattice (size sx sy no-size)))

;; BASE DA CELULA
(set! geometry ( list
  (make block (center (- (/ sx 2) (/ sx 2)) (- (- t (/ sit 2)) (/ sy 2)) )
    (size sx sit infinity)
    (material silicon_m ) )

;; RETROREFLETOR
(if (not no-back-reflector?)
  (set! geometry (append geometry
    (list (make block
      (center 0 (- (- t sit (/ backt 2)) (/ sy 2)) )
      (material backreflmat)
      (size sx backt infinity)))) ) )

;; bloco inicial

(set! geometry ( append geometry ( construct-block 0 0 ) ))

;; running routine
(set! geometry-lattice (make lattice (size sx sy no-size)))

(set! sources (list
  (make source
    (src (make continuous-src (frequency f0)))
    (component Ez) (size sx 0) (center 0 ysrc) )))

(set! sources ( append sources (sourceit (+ f0 dfsrc) fmax dfsrc)) )

(define k-point (vector3 0 0 0))
(set! pml-layers (list (make pml (direction Y) (thickness pmlt)))) ; cria pml só na direção y

(set! resolution res_value)
;; running routine

(run-until tfinal
  (at-beginning output-epsilon)
  (at-time 5 synchronized-magnetic output-poynting output-tot-pwr)
  (at-time t2 synchronized-magnetic output-poynting output-tot-pwr)
  (at-time t3 synchronized-magnetic output-poynting output-tot-pwr)
  (at-time t4 synchronized-magnetic output-poynting output-tot-pwr)
  (at-end synchronized-magnetic output-poynting output-tot-pwr)
)

;;; AQUI FAZ O CALCULO DE PERFORMANCE
(restart-fields)

(display "---- Calculo de Performance ----")
(newline)
(change-sources! (list (make source
  (src (make gaussian-src (frequency fcen) (fwidth df)))

```

```

(component Ez) (size sx 0) (center 0 ysrc))))

(define trans (add-flux fcen df nfreq
  (make flux-region (center 0 ytrans ) (size sx 0 ))))
(define refl (add-flux fcen df nfreq
  (make flux-region (center 0 yrefl ) (size sx 0 ))))

(load-minus-flux "refl-flux" refl)

(run-until (stop-when-fields-decayed 50 Ez (vector3 ysilicon) decayf)
  (at-beginning output-epsilon)
  (before-time 500 (to-appended "ez" (at-every 100 output-tot-pwr))))

(display-fluxes trans refl)
EOF

for lf in $(seq 0.02 0.01 0.09) $(seq 1.01 0.01 0.15) 0.15957; do

sx=1
sit=5

#A=0.01um2
hf=$(echo "scale=4; 0.01/$lf - (3.1416/8)*$lf" | bc -l )
henxerto=$(echo "$hf+$lf/2" | bc -l)

res_value=200

fcen=2
dar=5
sy=$(echo "$dar+1+((1/$fcen)/2)+$hf+1+$sit+1+((1/$fcen)/2)" | bc -l)
#nome para arquivo de saida contendo variaveis
#arquivo_out=referencia
t2=$(echo "5+0.1523*$henxerto*0.5" | bc -l)
t3=$(echo "5+0.1523*$henxerto" | bc -l)
t4=$(echo "5+0.1523*$henxerto*2" | bc -l)

arquivo_out=$arquivo.lf$lf.hf$hf.res_value$res_value.sx$sx.sit$sit

res1=$(date +%s.%N) # tempo inicial da execução
#linha para rodar programa
mpirun -np $(nproc) /home/mestrado/rogeriog/meep/meep-1.3/bin/meep-mpi prefixo="\$arquivo_out\" sit=$sit sx=$sx sy=$sy hf=$hf l

echo "Calculo meep realizado! \n"

grep flux1 $arquivo_out.out > $arquivo_out/flux1.dat
grep flux3 $arquivo_out.out > $arquivo_out/flux2.dat

cd $arquivo_out

paste flux1.dat flux2.dat | awk '{print $2,(-1)*$7/$3, (-1)*$8/$3, (1+$7/$3+$8/$3)}' > flux.dat

#### CALCULO DA PERFORMANCE A PARTIR DO FLUX.DAT ####
#####OBS: verifica se o interp-photonflux está lá #####
##transforma eV em nm
#awk '{ print (6.626*10^-34*299792458)*(1/(1.602176565*10^(-19)))/($1*10^-9), $4}' flux.otm$sufotm.dat > fluxnm2.dat
##transforma frequencia em nm
awk '{ print 1e3/($1), $4}' flux.dat > fluxnm2.dat
##inverte os dados e faz interpolação
tac fluxnm2.dat | /home/mestrado/rogeriog/spline-1.2/spline -f -t 390 700 0.001 > fluxnm.dat

```

```

##remove arquivo velho temporario
rm fluxnm2.dat
##junta os dados do espectro solar com a absorcao da celula
awk '{ if ($1>=390 && $1<=700) print $0 }' /home/mestrado/rogeriog/calculos-meep/interp-photonfluxAM1.5G > photonfluxAM1.5G
paste photonfluxAM1.5G fluxnm.dat > photonfluxnm.dat
## multiplica os fluxo de fótons pela espectro de absorcao da celula, dando a densidade
## de fotons absorvidos
awk '{print $1, $2*$4}' photonfluxnm.dat > absorbedphotons.dat
## soma todos os valores de fótons absorvidos e multiplica pelo intervalo entre os dados,
## equivale a uma integração, multiplica pela carga elementar
#awk '{sum+=$2*0.001} END {print sum}' absorbedphotons.dat | awk '{ print 1.1*1.60218e-19*$1}' > J.otm$sufotm.dat
awk '{sum+=$2*0.001} END {print sum}' absorbedphotons.dat | awk '{ printf "%.17g\n",1.1*1.60218e-19*$1}' > J.elipse.hf$hf.lf$lf
#cat J.dat | awk '{print $1/266.725}' > Phi_J.dat
rm photonfluxnm.dat photonfluxAM1.5G ##esses arquivos são muito grandes.

##### Geração de Imagens #####
##### Linguagem PYTHON #####
###EXLUIR RETROREFLETOR DO EPS
cat > python.sh << EOF
#!/usr/bin/env python
import h5py
import numpy as np

##### EXCLUIR O RETROREFLETOR #####
#### BASIC DEFINITIONS OF FILE ####
eps_file_name = './eps-000000000.h5'
eps_dataset_name = '/eps'

##### LER ARQUIVOS H5 #####
epsfile = h5py.File(eps_file_name, 'r') # 'r' means that hdf5 file is open in read-only mode
epsdataset = epsfile[eps_dataset_name]

epsdataset = map(lambda x: (x), epsdataset);
maxval = [ 2000 ]
##### Para excluir valores infinitos #####
nrow=0
for row in epsdataset:
    nval = 0
    for val in row:
        if (val>maxval):
            maxval = val
            nval += 1
    nrow += 1
#####
nrow=0
for row in epsdataset:
    nval = 0
    for val in row:
        if (val==maxval):
            epsdataset[nrow][nval] = 1.04
            nval += 1
    nrow += 1
print 'Dados infinitos excluidos!'
##### deixar somente o dieletrico
nrow=0
for row in epsdataset:
    nval = 0
    for val in row:

```

```

        if (val==1):
            epsdataset[nrow][nval] = 0
        nval += 1
    nrow += 1
print 'Somente dieletrico!'
## ver o eps
h = h5py.File('eps0.h5', 'w')
dset = h.create_dataset('eps', data=epsdataset)
print 'Dados novos no arquivo eps0.h5!'
epsfile.close()
h.close()
EOF
chmod +x python.sh
echo "Script python sendo executado... "
./python.sh
echo "Completo.\n"
#####
h5topng -S3 eps0.h5 #gerar eps png
h5topng -S3 -Zc dkbluered -a yarg -A eps0.h5 energy-*.h5 #gerar energy pngs

#sair da pasta especifica
cd ..

##### Calcula tempo de execucao #####
res2=$(date +%s.%N) # tempo final da execucao
dt=$(echo "$res2 - $res1" | bc)
dd=$(echo "$dt/86400" | bc)
dt2=$(echo "$dt-86400*$dd" | bc)
dh=$(echo "$dt2/3600" | bc)
dt3=$(echo "$dt2-3600*$dh" | bc)
dm=$(echo "$dt3/60" | bc)
ds=$(echo "$dt3-60*$dm" | bc)

printf "\nTempo de execucao: %d:%02d:%02d:%02.4f\n" $dd $dh $dm $ds
#####

done

```

Apêndice B - Algoritmo de otimização geométrica automática

Baseando-se na discussão apresentada na seção 6.7 e na proposição de um algoritmo evolutivo baseado na Teoria Construtal por Vianna et al. (2018). É apresentado um procedimento padrão para a utilização da Teoria Construtal no problema da otimização geométrica automática de uma célula solar.

1. Definir o domínio de estudo. No caso o domínio computacional de uma célula solar sem textura que serve de substrato para a inserção de novos elementos;
2. Identificar o fenômeno físico que controla a forma de crescimento. No caso das células solares se trata da energia eletromagnética do fluxo de luz;
3. Formular o fenômeno físico a partir do passo 2 em termos de uma função de controle Φ a ser maximizada. Para o problema abordado, Φ é a densidade de energia no campo eletromagnético da luz quando o regime estacionário é estabelecido;
4. Definir qual variável deve ser controlada. Procura-se aumentar a fotocorrente total gerada, J_i , pela célula solar formando uma textura;
5. Definir a forma e a posição do primeiro elemento construtal; foi utilizado um bloco elementar de tamanho fixo centrado na célula solar.
6. Resolver o problema matemático (simulação eletromagnética) e calcular o máximo de Φ na região adjacente ao domínio.
7. Definir a posição do segundo elemento construtal baseado na localização de Φ máximo.
8. Calcular e observar a tendência da variável a ser controlada. Para células solares se procura aumentar a fotocorrente total gerada que indica uma maior absorção da luz.
9. Repetir passos 6 a 8 até que a tendência da variável controlada alcance um máximo ou seja atendido um critério de restrição, como o número de blocos elementares inseridos.

Apêndice C - Código utilizado para otimização geométrica automática livre

```
#!/bin/sh
### Esse código é um exemplo formando a textura com bloco elementar de lado ###
### 0,05um, mudanças pertinentes no dimensionamento e numero de bloco são ###
### necessárias para outros tamanhos de bloco elementar. ###

### A linguagem BASH é usada para fazer a interface do código com o linux e ###
### realizar os loops, a linguagem SCHEME é interpretada pelo software MEEP e ###
### a linguagem PYTHON é utilizada para pós-processamento dos dados do MEEP. ###

arquivo=construtal.1005.livre
### As simulações estão padronizadas com frequencias de 1.42 - 2.57 ###

res1=$(date +%s.%N) # tempo inicial da execução

##### ARQUIVO CTL BASE DA SIMULACAO #####
cat > $arquivo.ctl << EOF
;parametros da celula
(define a 1) ; periodicidade em microns
(define-param sx 0) ;; DEFINIDO NA LINHA DE COMANDO
(define-param sy 0) ;; DEFINIDO NA LINHA DE COMANDO

;;PREFIXO ARQUIVO, COMANDO PARA CRIAR DIRETORIO OU SUFIXO COM MESMO NOME
(define-param prefixo "prefixo-arquivo")
(define-param prefixo2 "prefixo-arquivo2")
(set! filename-prefix prefixo )
;(use-output-directory prefixo)

;; RESOLUCAO, PML, RETROREFLETOR
(define-param res_value 0) ;; DEFINIDO NA LINHA DE COMANDO
(define pmlt 1) ; espessura pml
(define backt 1) ; espessura retrorefletor

;;PARAMETROS DA FONTE
(define-param fcen 2)
(define-param df 1.16)
(define-param nfreq 301)
(define decayf 1e-5)
(define mylambda (/ fcen))
(define bufft (/ mylambda 2)) ; espessura de buffer
(define t (+ pmlt sit backt bufft )) ; espessura base da celula
(define ysrc (- (/ sy 2) pmlt bufft))

;;PARAMETROS DA GEOMETRIA
;; DEFINIDOS NA LINHA DE COMANDO
(define-param sit 0) ; espessura silicio base
(define-param hf 0) ; altura das aletas
(define-param nf 1) ; numero de aletas
(define-param lf 0) ; largura das aletas
(define sf (- (/ sx nf) lf)) ; espacamento das aletas
(define f 1)

;;FREQUENCIAS DA FONTE
(define-param f0 1.43) ; inicial
(define-param fmax 2.56) ; final
(define-param nfreqsrc 10) ; quantas partes
(define-param dfsrc (/ (- fmax f0) nfreqsrc ))

;;TEMPO SIMULACAO
```

```

(define tfinal (+ (* 1 (- sy pmlt bufft hf t)) (* (/ 0.1523) hf)))
(define tfinal 18.15)
(define tfinal 300)

;DADOS PARA CALCULO DE PERFORMANCE
(define yrefl (- ysrc (/ bufft 4))) ; coord y da linha de reflexao
(define ytrans (- t (/ sy 2) sit backt (/ bufft 2)) ) ; coord y da linha de transmissao
(define ysilicon (- (- t (/ sit 2)) (/ sy 2)) )

;retrorefletor
(define-param no-back-reflector? false)
(define-param reflector-mat-num 0)
; 0 = refletor perfeito

;textura
(define-param no-texture? false)

( if (= reflector-mat-num 0) (define backreflmat metal) )

;parametros de materiais
(define silicon_m
  (make dielectric (epsilon 1.01)
    (E-susceptibilities
      (make lorentzian-susceptibility
        (frequency 3.64) (gamma (* 2 0)) (sigma 8))
      (make lorentzian-susceptibility
        (frequency 2.76) (gamma (* 2 0.063)) (sigma 2.85))
      (make lorentzian-susceptibility
        (frequency 1.73) (gamma (* 2 2.5)) (sigma -0.107))
    )))

;;;LOOP BLOCOS
( define ( doit x x-max dx) ; esse codigo cria um loop para inserir varios blocos de aletas
  ( append ( list
    (make block ( center (- (+ (/ (+ sf lf) 2) (* (- x 1) (+ sf lf)) ) (/ sx 2) ) (+ (/ hf 2) (- (/ sy 2)) t ))
      (size lf hf infinity)
      (material silicon_m) ) )
    (if (<= x x-max)
      ( doit (+ x dx) x-max dx) (list ) ) ) )

;;;CRIAR ENXERTOS
( define ( construct-block x-position layer-number )
  ( append ( list
    (make block ( center x-position (+ (* hf layer-number) (/ hf 2) (- (/ sy 2)) t ))
      (size lf hf infinity)
      (material silicon_m) ) ) ) )

;;;POLINOMIO DAS AMPLITUDES
; função que determina a amplitude correspondente a uma da frequencia da luz
; com base na interpolação polinomial do AM1.5G
( define ( amplitude-solar fi)
  ( let ((a1 -0.788047) (a2 5.84046) (a3 -16.5026) (a4 20.6957) (a5 -8.69338) )
    (+ (* a1 (expt fi 4)) (* a2 (expt fi 3)) (* a3 (expt fi 2)) (* a4 (expt fi 1)) a5 ) )
)

;;;LOOP FONTES
( define ( sourceit f0i fmaxi dfi) ; esse codigo cria um loop para inserir varias fontes de frequencias diferentes
  ( append ( list
    (make source
      (src (make continuous-src (frequency f0i)))

```

```

(amplitude (amplitude-solar f0i)) (component Ez) (size sx 0) (center 0 ysrc) ))

(if (<= f0i fmaxi)
  ( sourceit (+ f0i dfi) fmaxi dfi) (list ) ) ) )

;; setting run
(set! geometry-lattice (make lattice (size sx sy no-size)))

;; BASE DA CELULA
(set! geometry ( list
  (make block (center (- (/ sx 2) (/ sx 2) ) (- (- t (/ sit 2)) (/ sy 2)) )
    (size sx sit infinity)
    (material silicon_m ) )
  ))

;; RETROREFLETOR
(if (not no-back-reflector?)
  (set! geometry (append geometry
    (list (make block
      (center 0 (- (- t sit (/ backt 2)) (/ sy 2) ))
      (material backreflmat)
      (size sx backt infinity)))) ) )

;; TEXTURA
(if (not no-texture?)
  (set! geometry ( append geometry ( doit f nf 1) ) ) )

;; blocos extras otimizacao construtal

(set! geometry ( append geometry ( construct-block 0 0 ) ))

;; rotina de execucao
(set! geometry-lattice (make lattice (size sx sy no-size)))

(set! sources (list
  (make source
    (src (make continuous-src (frequency f0)))
    (component Ez) (size sx 0) (center 0 ysrc) )))

(set! sources ( append sources (sourceit (+ f0 dfsrc) fmax dfsrc)) )

(define k-point (vector3 0 0 0))
(set! pml-layers (list (make pml (direction Y) (thickness pmlt)))) ; cria pml só na direção y

(set! resolution res_value)
;; running routine

(run-until tfinal
  (at-beginning output-epsilon)
  (at-end synchronized-magnetic output-poynting output-tot-pwr)
)
;;; AQUI FAZ O CALCULO DE PERFORMANCE

(restart-fields)

(change-sources! (list (make source
  (src (make gaussian-src (frequency fcen) (fwidth df)))
  (component Ez) (size sx 0) (center 0 ysrc)))))

(define trans (add-flux fcen df nfreq
  (make flux-region (center 0 ytrans ) (size sx 0 ))))
(define refl (add-flux fcen df nfreq

```

```

(make flux-region (center 0 yrefl ) (size sx 0 )))

(load-minus-flux "referencia-refl-flux" refl)

(set! filename-prefix prefixo2 )

(run-until (stop-when-fields-decayed 50 Ez (vector3 ysilicon) decayf)
  (at-beginning output-epsilon)
  (before-time 500 (to-appended "ez" (at-every 100 output-tot-pwr))))

(display-fluxes trans refl)
EOF

para_otimizacao=0
para_simulacao=0
ult_passo_relevante=0
## limpa as variaveis

#####LOOP OTIMIZACAO NA CAMADA
#### for otm in $(seq 0 40) ; do
for otm in $(seq 0 40) ; do

### REPETI AQUI AS LIMPEZA DAS VARIAVEIS PODE SER UMA QUESTAO DA INTERPRETACAO
### DAS VARIAVEIS EM NESTED LOOPS NO BASH
para_otimizacao=0
para_simulacao=0
ult_passo_relevante=0
## limpa as variaveis

echo "PASSO DE OTIMIZACAO NA CAMADA: $otm \n"

if [ $otm -eq 0 ]
then
sufotm=
else
sufotm=$otm
fi

##para começar simulacao em um passo arbitrario
#cp $arquivo.ct1 $arquivo$sufotm.ct1

sx=1
hf=0.05
sit=5
lf=0.05
res_value=200
fcen=2
dar=5
sy=$(echo "$dar+1+((1/$fcen)/2)+$hf+1+$sit+1+((1/$fcen)/2)" | bc -l)
#nome para arquivo de saida contendo variaveis
arquivo_out=$arquivo$sufotm.sit$sit.sx$sx.lf$lf.hf$hf.res_value$res_value

#linha par rodar programa
#por um problema de leitura da referencia :
cp referencia-refl-flux.h5 OTM$sufotm-referencia-refl-flux.h5
#### meep prefixo="\$arquivo_out\" sit=$sit nfreq=$nfreq sx=$sx sy=$sy hf=$hf res_value=$res_value nf=$nf lf=$lf $arquivo$sufotm
mpirun -np $(nproc) /home/mestrado/rogeriog/meep/meep-1.3/bin/meep-mpi prefixo="\OTM$sufotm\" prefixo2="\OTMperf$sufotm\" sit=$sit

echo "Calculo meep realizado! \n"

```

```

grep flux2 $arquivo_out.out > flux2.otm$sufotm.dat
paste flux1.dat flux2.otm$sufotm.dat | awk '{print $2,(-1)*$7/$3, (-1)*$8/$3, (1+$7/$3+$8/$3)}' > flux.otm$sufotm.dat

#### CALCULO DA PERFORMANCE A PARTIR DO FLUX.DAT ####
#####OBS: verifica se o interp-photonflux está lá #####
##transforma eV em nm
#awk '{ print (6.626*10^-34*299792458)*(1/(1.602176565*10^-19)))/($1*10^-9), $4}' flux.otm$sufotm.dat > fluxnm2.dat
##transforma frequencia em nm
awk '{ print 1e3/($1), $4}' flux.otm$sufotm.dat > fluxnm2.dat
##inverte os dados e faz interpolação
tac fluxnm2.dat | /home/mestrado/rogeriog/spline-1.2/spline -f -t 390 700 0.001 > fluxnm.dat
##remove arquivo velho temporario
rm fluxnm2.dat
##junta os dados do espectro solar com a absorção da celula
awk '{ if ($1>=390 && $1<=700) print $0 }' /home/mestrado/rogeriog/calculos-meep/interp-photonfluxAM1.5G > photonfluxAM1.5G
paste photonfluxAM1.5G fluxnm.dat > photonfluxnm.dat
## multiplica os fluxo de fótons pela espectro de absorcao da celula, dando a densidade
## de fotons absorvidos
awk '{print $1, $2*$4}' photonfluxnm.dat > absorbedphotons.dat
## soma todos os valores de fótons absorvidos e multiplica pelo intervalo entre os dados,
## equivale a uma integração, multiplica pela carga elementar
#awk '{sum+=$2*0.001} END {print sum}' absorbedphotons.dat | awk '{ print 1.60218e-19*$1}' > J.otm$sufotm.dat
awk '{sum+=$2*0.001} END {print sum}' absorbedphotons.dat | awk '{ printf "%.17g\n",1.1*1.60218e-19*$1}' > J.otm$sufotm.dat

# para mostrar o numero de blocos na estrutura
nblocks=$(grep "append geometry ( construct-block" $arquivo$sufotm.ct1 | wc -l)
sed -i "$ a\nblocks=$nblocks" J.otm$sufotm.dat

#### CALCULA VALORES EM PXS DAS POSICOES DA SUPERFICIE E ENXERTO NA GEOMETRIA ###
#### (será alimentado no processamento com python)
round() {
    printf "%.2f" "$1"
}
multhf=$(echo "0.4/$hf" | bc -l)
#### a altura da superfície da celula cresce conforme passa as camadas seguintes
h_superficiecelula=$(echo "1+(1/$fcen)/2+1+$sit" | bc -l)
####
h_superficiecelula_pxs=$(echo "$h_superficiecelula*$res_value+2" | bc -l)
h_superficiecelula_pxs=$(round $h_superficiecelula_pxs 0)

h_topo_pxs=$(echo "$h_superficiecelula_pxs+($multhf*$hf*$res_value)" | bc -l)
h_topo_pxs=$(round $h_topo_pxs 0)
#####

energyfile=$(ls OTM$sufotm-energy-*.h5)
##### ARQUIVO PYTHON #####
cat > python.sh << EOF
#!/usr/bin/env python
import h5py
import numpy as np
from numpy import unravel_index

##### EXCLUIR O RETROREFLETOR #####
#### BASIC DEFINITIONS OF FILE ####
eps_file_name = './OTM$sufotm-eps-000000000.h5'
eps_dataset_name = '/eps'

```

```

##### LER ARQUIVOS H5 #####
epsfile = h5py.File(eps_file_name, 'r')
epsdataset = epsfile[eps_dataset_name]

epsdataset = map(lambda x: (x), epsdataset);
maxval = [ 2000 ]
##### Para excluir valores infinitos #####
nrow=0
for row in epsdataset:
    nval = 0
    for val in row:
        if (val>maxval):
            maxval = val
            nval += 1
    nrow += 1
#####
nrow=0
for row in epsdataset:
    nval = 0
    for val in row:
        if (val==maxval):
            epsdataset[nrow][nval] = 1.04
            nval += 1
    nrow += 1
print 'Dados infinitos excluidos!'
## ver o eps
h = h5py.File('eps0.h5', 'w')
dset = h.create_dataset('eps', data=epsdataset)
print 'Dados novos no arquivo eps0.h5!'
epsfile.close()
h.close()
#####

##### GERA O ARQUIVO DE ENERGIA PROCESSADO #####
##### BASIC DEFINITIONS OF FILE #####
eps_file_name = './eps0.h5'
eps_dataset_name = '/eps'

hdf5_file_name = './$energyfile'
dataset_name = '/energy'

##### LER ARQUIVOS H5 #####
file = h5py.File(hdf5_file_name, 'r')
dataset = file[dataset_name]

dataset = map(lambda x: (x), dataset);

##### Para excluir valores abaixo de um determinado indice #####
print(np.shape(dataset))
dataset = np.delete(dataset, np.s_[0:$h_superficiecelula_pxs], axis=1)
epsdataset = np.delete(epsdataset, np.s_[0:$h_superficiecelula_pxs], axis=1)
print(np.shape(dataset))
dataset = np.delete(dataset, np.s_[$h_topo_pxs-$h_superficiecelula_pxs:10000], axis=1)
epsdataset = np.delete(epsdataset, np.s_[$h_topo_pxs-$h_superficiecelula_pxs:10000], axis=1)
print(np.shape(dataset))

print 'Dominio de interesse na celula extraido!'

```

```

#### Exclui o dominio do dataset #####
excludedomain = np.equal(epsdataset,1) ## mascara booleana
dataset = np.multiply(dataset,excludedomain)
print 'Dieletrico excluido do dataset!'
#### Exclui o dominio do dataset #####

## ver o eps
h = h5py.File('eps0.h5', 'w')
dset = h.create_dataset('eps', data=epsdataset)
print 'Dados novos no arquivo eps0.h5!'
h.close()

## ver a energia
h = h5py.File('novoenergy.h5', 'w')
dset = h.create_dataset('energy', data=dataset)
print 'Dados novos no arquivo novoenergy.h5!'
h.close()

lado=int($hf*$res_value)
ncolunas=int($multhf) ###16
nlinhas=int($sx/$hf) ###40

#### CORRIGIR A TRANSLACAO DO DOMINIO ####
print(np.shape(epsdataset))
translatedata = epsdataset[0:(lado/2)+1]
print(translatedata[0])
print(epsdataset[0])
print 'deletou'
epsdataset = np.delete(epsdataset, np.s_[0:(lado/2)+1], axis=0)
print(epsdataset[0])
print 'fez append'
epsdataset = np.r_[epsdataset, translatedata]
print(epsdataset[-1])
print(np.shape(epsdataset))
## ver o eps
h = h5py.File('eps01.h5', 'w')
dset = h.create_dataset('eps', data=epsdataset)
print 'Dados novos no arquivo eps0.h5!'
h.close()
#####

##### FAZ A MATRIZ DE EPS #####
#### MATRIZ DE EPS ####
EPS=np.ones((nlinhas, ncolunas))
somaeps = 0
mediaeps = 0

for M in range(0, nlinhas) :
for N in range(0, ncolunas) :
epsdataset2 = epsdataset[M*lado:(M+1)*lado,N*lado:(N+1)*lado]
for row in epsdataset2 :
for val in row :
somaeps += val
mediaeps = somaeps / 100
EPS[M][N] = mediaeps
somaeps = 0
mediaeps = 0

```

```

print 'EPS:'
EPSmask = np.less_equal(EPS, 1.005)
EPS = np.multiply(1, EPSmask)
print(EPS)
print(np.shape(EPS))

#####

#### MATRIZ DE CORRECAO A PARTIR DA MATRIZ EPS ####

EPSrep = np.zeros((len(EPS)+2,len(EPS[0])+2))
EPSrep[1:-1,1:-1] = EPS
EPSrep[:, -1] = np.ones((1, len(EPSrep)))
EPSrep[0,1:-1] = EPS[-1,:]
EPSrep[-1,1:-1] = EPS[1,:]
print 'EPSrep:'
print(EPSrep)

Mcorr = np.zeros((len(EPS), len(EPS[0])))

for i in range(1,len(EPSrep)-1):
for j in range(1,len(EPSrep[0])-1):
if EPSrep[i][j] == 0:
Mcorr[i-1][j-1] = 0
else :
if (EPSrep[i+1][j] == 1) and (EPSrep[i-1][j] == 1) and (EPSrep[i][j+1] == 1) and (EPSrep[i][j-1] == 1) :
Mcorr[i-1][j-1] = 0
else :
Mcorr[i-1][j-1] = 1
print 'Mcorr:'
print(Mcorr)
#####

##### MATRIZ DE ENERGIA #####
ENERGIA=np.ones((nlinhas, ncolunas))

ENERGIA=np.ones((nlinhas, ncolunas))
somaenergia = 0
mediaenergia = 0

for M in range(0, nlinhas) :
for N in range(0, ncolunas) :
dataset2 = dataset[M*lado:(M+1)*lado,N*lado:(N+1)*lado]
for row in dataset2 :
for val in row :
somaenergia += val
mediaenergia = somaenergia / 100
ENERGIA[M][N] = mediaenergia
somaenergia = 0
mediaenergia = 0

print 'ENERGIA:'
print(ENERGIA)
print(np.shape(ENERGIA))

#####

##### MULTIPLICA ENERGIA POR Mcorr #####

```

```

#### Somente as regioes de energia disponivel para crescimento ####

ENERGIACorr = np.multiply(ENERGIA, Mcorr)
print 'Energiacorr:'
print(ENERGIACorr)
#ENERGIACorr = np.transpose(ENERGIACorr)
#print(ENERGIACorr)

##### ENCONTRA MAXIMO DE ENERGIA E SUA POSICAO #####
#### AGORA PARA ACHAR PONTOS DE MAXIMO ####
arrayvertical= []
rowmax = []
nrow=0
for row in ENERGIACorr:
    nval = 0
    for val in row:
        arrayvertical.append(val)
nval += 1
    maxarray=max(arrayvertical)
    arrayvertical = []
    rowmax.append(maxarray)
    nrow += 1

maximo= max(rowmax)
print(maximo)

print 'maximo:', maximo

itemindex = unravel_index(ENERGIACorr.argmax(), ENERGIACorr.shape)
print itemindex

file2write=open("coordenadas0",'w')
file2write.write(str(itemindex))
file2write.close()

EOF
chmod +x python.sh
echo "Script python sendo executado... "
./python.sh
echo "Completo.\n"
echo "As coordenadas criticas da otm $otm serão repassadas para proxima otimização. \n"

### Apos rodar o script do python, tem que pegar as coordenadas dos pontos criticos e repassar para
### o arquivo que gerara proxima estrutura
sed -e 's/[^0-9 ]*//g' -e 's/ /\n/g' coordenadas0 > coordenadas

#### echo "Serão geradas imagens de campos agora. \n"
#pos-processamento dos campos

h5topng eps0.h5 -o OTM$sufotm-eps0.png #gerar eps
echo "Arquivo EPS gerado para otm $otm \n"
h5topng -Zc dkbluered -a yarg -A eps0.h5 novoenergy.h5 -o OTM$sufotm-campoenergia.png #gerar pngs
echo "Imagens de campo gerados para otm $otm! \n"

cp $arquivo$sufotm.ct1 $arquivo$sufotm.ct1.tmp

##numero da linha no input onde codigo dos proximos blocos
numberline=$(grep -n "extra blocks constructal" $arquivo$sufotm.ct1.tmp | cut -d: -f 1)
numberline=$((numberline+1))

```

```

for line in $(sed -n '1p' coordenadas) ; do    ## coordenada x!
COORDx=$(echo "$line" | awk -v lf=$lf -v sx=$sx -v res=$res_value '{printf "%.3f \n", (($1+1)-sx/(2*lf))*lf}')
done
for line in $(sed -n '2p' coordenadas) ; do    ## coordenada y!
COORDy=$(echo "$line")
done

sed -i "$numberline a\set! geometry ( append geometry ( construct-block $COORDx $COORDy) ))" $arquivo$sufotm.ctl.tmp
## a opção sed -i salva no arquivo as mudanças diretamente ##

cp $arquivo$sufotm.ctl.tmp $arquivo$((otm+1)).ctl

done

##### Calcula tempo de execucao #####
res2=$(date +%s.%N)    # tempo final da execucao
dt=$(echo "$res2 - $res1" | bc)
dd=$(echo "$dt/86400" | bc)
dt2=$(echo "$dt-86400*$dd" | bc)
dh=$(echo "$dt2/3600" | bc)
dt3=$(echo "$dt2-3600*$dh" | bc)
dm=$(echo "$dt3/60" | bc)
ds=$(echo "$dt3-60*$dm" | bc)

printf "\nTempo de execucao: %d:%02d:%02d:%02.4f\n" $dd $dh $dm $ds
#####

```