



Ricerca di Sistema elettrico

## Metasuperfici per migliorare l'efficienza di celle solari

M. Principe, A. Micco, A. Ricciardi, M. Pisco, A. Cusano,  
L.V. Mercaldo, P. Delli Veneri



## METASUPERFICI PER MIGLIORARE L'EFFICIENZA DI CELLE SOLARI

M. Principe, A. Micco, A. Ricciardi, M. Pisco, A. Cusano, (Divisione Optoelettronica, Dipartimento di Ingegneria, Università del Sannio)

L.V. Mercaldo, P. Delli Veneri (ENEA)

Settembre 2016

### Report Ricerca di Sistema Elettrico

Accordo di Programma Ministero dello Sviluppo Economico - ENEA

Piano Annuale di Realizzazione 2015

Area: Generazione di energia elettrica con basse emissioni di carbonio

Progetto: "Ricerca su Tecnologie Fotovoltaiche Innovative"

Obiettivo: Celle solari ad eterogiunzione a-Si/c-Si - Ottimizzazione del guadagno ottico in celle ad eterogiunzione di silicio: texturing del silicio e sviluppo di TCO ad alta mobilità

Responsabile del Progetto: Paola Delli Veneri, ENEA



Il presente documento descrive le attività di ricerca svolte all'interno dell'Accordo di collaborazione "Metasuperfici per migliorare l'efficienza di celle solari"

Responsabile scientifico ENEA: Lucia V. Mercaldo



Responsabile scientifico Università del Sannio: Marco Pisco, Andrea Cusano

## Indice

SOMMARIO.....	4
1 INTRODUZIONE.....	5
2 PROGETTAZIONE DI UNA METASUPERFICIE DIELETRICA PER L'OTTIMIZZAZIONE DI CELLE SOLARI AD ETEROGIUNZIONE.....	5
2.1 LE METASUPERFICI.....	5
2.2 SCHEMA DELLA CELLA SOLARE DA OTTIMIZZARE.....	7
2.2.1 <i>Sequenze utilizzate</i> .....	7
2.3 PROGETTAZIONE DEL SINGOLO ELEMENTO.....	10
2.3.1 <i>Modellazione numerica</i> .....	10
2.3.2 <i>Analisi parametrica</i> .....	11
2.4 ANALISI IN BANDA DEL SINGOLO ELEMENTO.....	13
2.5 PROGETTAZIONE DELLA METASUPERFICIE.....	14
2.6 ANALISI DELLE PRESTAZIONI ATTESE.....	17
2.7 RIASSUNTO DEL PROGETTO E VALUTAZIONI DI FATTIBILITÀ.....	18
2.7.1 <i>Parametri di progetto del pattern basato sulla sequenza di Rudin-Shapiro</i> .....	18
2.7.2 <i>Parametri di progetto del pattern basato sulla sequenza periodica binaria</i> .....	18
3 CONCLUSIONI.....	19
4 RIFERIMENTI BIBLIOGRAFICI.....	20

## Sommario

Questo documento descrive le attività di ricerca svolte nell'ambito dell'accordo di collaborazione, dal titolo "Metasuperfici per migliorare l'efficienza di celle solari", tra il centro ricerche ENEA di Portici e l'Università degli Studi del Sannio.

Il documento è organizzato nel modo seguente: dopo una breve introduzione sulle motivazioni che hanno spinto all'avvio di questa attività di ricerca sono descritti i requisiti che devono soddisfare le metasuperfici da progettare. Innanzitutto nella sezione 2.1 sono introdotte le metasuperfici. In 2.2 è descritta la struttura generale della cella solare da ottimizzare e successivamente le strutture scelte per la progettazione della metasuperficie. Viene affrontato poi il problema della progettazione del singolo elemento della metasuperficie (sezione 2.3) con proprietà specifiche di sfasamento del campo elettromagnetico per abilitare il funzionamento della stessa. Nella sezione 2.4 è poi affrontato lo studio in banda per analizzare il comportamento del singolo elemento della metasuperficie al di fuori della lunghezza d'onda di progetto. Nella sezione 2.5 si passa dal singolo elemento alla metasuperficie e nella sezione 2.6 è riportata l'analisi delle prestazioni attese. Viene infine riepilogato il progetto ottenuto di metasuperficie da realizzare con tecniche litografiche su larga area. Infine, nell'ultima sezione, sono riportate le conclusioni.

## 1 Introduzione

L'attività di ricerca qui descritta, formalizzata nell'ambito dell'Accordo di collaborazione tra ENEA e Università del Sannio, si inquadra nella linea "Celle solari a eterogiunzione a-Si/c-Si su wafer di silicio p" del progetto "B.1.2 - Ricerca su tecnologie fotovoltaiche innovative" e in particolare nel subtask che mira allo sviluppo di opportune morfologie superficiali del wafer di silicio con l'obiettivo di ottimizzare il guadagno ottico nelle celle solari e quindi la corrente da esse ottenibile.

I trend attuali, dettati dall'abbattimento dei costi di produzione, vedono l'utilizzo di wafer sempre più sottili. La riduzione dello spessore del wafer comporta però una riduzione dell'efficienza della cella solare dovuta al non completo assorbimento della radiazione nelle regioni ad alta lunghezza d'onda dello spettro solare. Risulta dunque importante investigare nuovi metodi più efficaci per ottimizzare il guadagno ottico. Il mondo della ricerca sulla nanofotonica è in forte espansione da anni, e molte sono le possibilità per incrementare l'intrappolamento della luce in celle solari, da semplici texturing superficiali a nanostrutture [1-3]. L'utilizzo di metamateriali, ovvero layer nanostrutturati sul silicio cristallino con particolari proprietà ottiche, potrebbe offrire nuove strade per migliorare l'efficienza delle celle solari. I metamateriali sono materiali artificiali ingegnerizzati per ottenere proprietà ottiche che non sono ottenibili da materiali esistenti in natura [4-6]. Con tali materiali è possibile manipolare la luce, indirizzandola in una direzione preferenziale o foccheggiandola, come con una lente, in un punto. In quest'attività abbiamo appunto cercato di sfruttare le proprietà delle metasuperfici per massimizzare l'assorbimento nelle celle solari con architettura ad eterogiunzione.

Una metasuperficie è un metamateriale bidimensionale, ovvero con spessore trascurabile rispetto alla lunghezza d'onda di lavoro, costituito da una modulazione spaziale dell'indice di rifrazione, in modo da modificare localmente ampiezza e fase di un fronte d'onda incidente. L'implementazione più semplice delle metasuperfici, da un punto di vista della progettazione e della fabbricazione, consiste in un array disomogeneo di risonatori. Ogni risonatore possiede una risposta differente (in ampiezza e/o fase) alla luce incidente, così che l'intera metasuperficie imprime un determinato profilo di fase e/o ampiezza al campo trasmesso [7-9]. Per le loro proprietà, le metasuperfici si adattano bene all'utilizzo nelle celle solari basate su wafer di silicio.

Generalmente i risonatori che danno luogo a metasuperfici sono costituiti da elementi metallici che supportano risonanze plasmoniche. [7,8,10,11]. Essi non sono preferibili nell'applicazione alle celle solari in quanto la presenza di metalli comporta inevitabili effetti di perdite parassite che finiscono per limitare l'efficienza di conversione. Per superare le limitazioni associate all'utilizzo di metalli, l'attenzione della comunità scientifica internazionale si è rivolta allo studio di metasuperfici basate su materiali dielettrici e semiconduttori [12]. In quest'attività ci siamo posti l'obiettivo di studiare e progettare metasuperfici dielettriche in grado di allargare il diagramma di radiazione della luce incidente su una cella solare ad eterogiunzione per intrappolare il più possibile la luce confinandola su una profondità ridotta. L'attività è stata condotta in parallelo all'Accordo di Collaborazione tra ENEA e Scuola Superiore Sant'Anna di Pisa dedicato agli aspetti realizzativi delle metasuperfici su wafer di silicio. I pattern progettati sono stati dunque infine discussi con l'istituto pisano dal punto di vista della realizzabilità sperimentale.

## 2 Progettazione di una metasuperficie dielettrica per l'ottimizzazione di celle solari ad eterogiunzione

### 2.1 Le metasuperfici

I metamateriali sono materiali artificiali ottenuti disponendo opportunamente elementi dielettrici e/o metallici con dimensioni "sub-wavelength", esibendo proprietà ottiche particolari. [13]

Nel corso degli ultimi quindici anni hanno suscitato un interesse esponenzialmente crescente nel campo delle scienze e tecnologie grazie al fatto che offrono una valida strada per ottenere effetti di interazione luce-materia non convenzionali (come ad esempio indice di rifrazione “negativo” [14] o “superlenti” [15]), così come la possibilità di manipolare campi elettromagnetici attraverso il corretto posizionamento degli elementi costituenti il metamateriale [5].

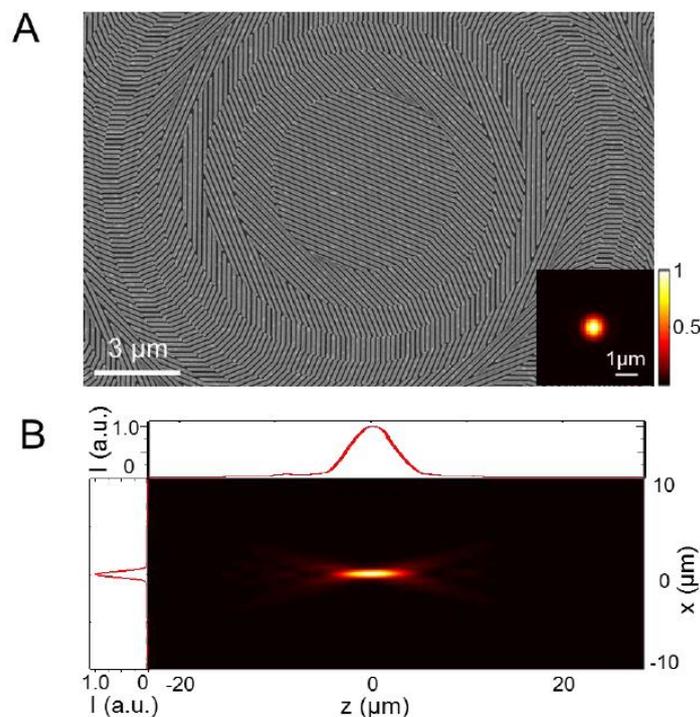
Nonostante gli interessanti scenari aperti da tali materiali, le applicazioni pratiche in ottica e fotonica restano ancora limitate, soprattutto a causa delle significative sfide tecnologiche da superare per la fabbricazione di nanostrutture 3D [16-18]. A causa di ciò è cresciuto maggiormente l’interesse per implementazioni 2D, tipicamente indicate come “metasuperfici” che risultano molto più semplici da realizzare essendo compatibili con le già assestate tecniche di lavorazione planare su silicio.

L’idea che sta alla base delle metasuperfici ottiche è molto simile a quelle di array di antenne trasmettenti/riceventi a radiofrequenza [19,20], costituite da una schiera di elementi risonanti 2D capaci di modificare localmente sia la fase che l’ampiezza di un’onda elettromagnetica incidente.

Tuttavia, rispetto alle applicazioni a radiofrequenza, le implementazioni ottiche non sono necessariamente basate su risonatori con dimensioni prossime alla lunghezza d’onda; infatti sfruttando effetti plasmonici [21] o dielettrici ad alto indice di rifrazione [9] essi possono avere dimensioni molto più piccole della lunghezza d’onda.

Partendo dal lavoro di Yu et al. [7] che dimostra le capacità di una metasuperficie basata su nanoantenne a forma di V di modificare il fronte d’onda di un’onda elettromagnetica e ottenere effetti di riflessioni/rifrazioni anomali, sono stati realizzati diversi modelli per cercare di aumentare la banda e l’efficienza di tali dispositivi. Ciò ha posto le basi per un nuovo settore della ricerca basato sull’ottica e fotonica di superficie 2D applicabile in tanti scenari quali l’imaging [22,23], il sensing [24,25], e il calcolo ottico [26,27].

Recentemente è stato dimostrato che con risonatori dielettrici o semiconduttori è possibile realizzare lenti bidimensionali [12] con l’ausilio di una particolare metasuperficie (Figura 1) aprendo possibilità interessanti per l’utilizzo nelle celle solari, sfruttando la presenza del silicio, campo ancora fortemente inesplorato dalle potenzialità offerte dalle metasuperfici.



**Figura 1. Immagine SEM di una metasuperficie in grado di realizzare una funzione di lente 2D superficiale con profilo di campo misurato a valle della lente [12].**

## 2.2 Schema della cella solare da ottimizzare

La cella solare oggetto dell'ottimizzazione è schematicamente rappresentata in Figura 2. Questa tipologia di cella, nota come cella ad eterogiunzione in silicio, è costituita da vari film sottili a base di silicio o ossido di silicio depositati sulle due facce di un wafer di silicio cristallino e da ulteriori strati per la contattatura. Considerando wafer con drogaggio di tipo p, sul lato frontale ("top") viene generalmente realizzata la giunzione p/n grazie alla deposizione di un film sottile drogato di tipo "n" di spessore nel range 10-20 nm. Nelle celle studiate presso il centro ricerche ENEA di Portici tale strato è stato ottimizzato introducendo l'ossido di silicio non stechiometrico drogato. Sul retro ("bottom") viene invece realizzato il cosiddetto *back surface field* depositando un film drogato di tipo p. Entrambi i film drogati sono preceduti da un sottilissimo buffer di silicio amorfo idrogenato intrinseco (5 nm) utilizzato per passivare le superfici del wafer. I contatti elettrici, infine, sono costituiti da un film di ossido trasparente e conduttivo (nel caso delle celle ENEA si tratta di AZO, ossia ZnO drogato con Al, dello spessore di 70 nm) seguito da una griglia metallica sul lato frontale e sulla faccia opposta da un film di AZO accoppiato a un metallo che funge sia da contatto che da riflettore posteriore.

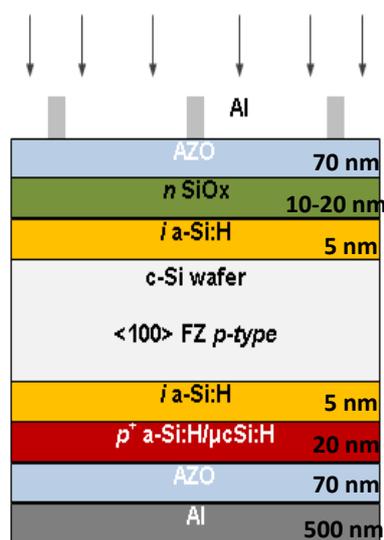
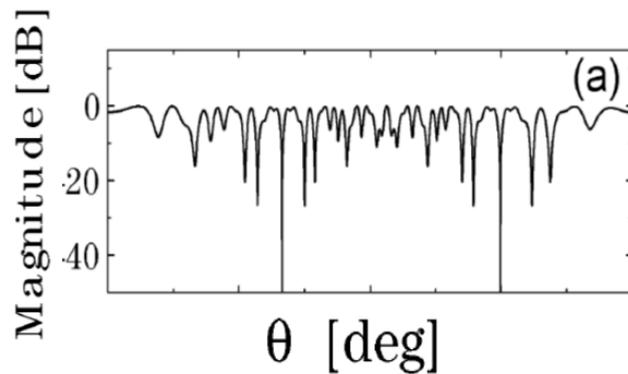


Figura 2. Schema della struttura della cella eterogiunzione oggetto dello studio di ottimizzazione.

### 2.2.1 Sequenze utilizzate

Come già anticipato, si vuole realizzare una metasuperficie sulla faccia frontale del wafer di silicio al fine di trasmettere la luce incidente, idealmente, in modo uniforme a tutti gli angoli di trasmissione. Dunque, la metasuperficie che si vuol progettare deve avere un diagramma di trasmissione uniforme rispetto all'angolo, ovvero la potenza trasmessa deve avere distribuzione uniforme rispetto all'angolo di uscita. Con tale obiettivo, abbiamo preso in considerazione alcune sequenze su cui sarà basata la metasuperficie da realizzare.

Le prime sequenze considerate sono un tipo particolare di sequenze aperiodiche: le sequenze di Rudin-Shapiro [28]. Esse sono sequenze deterministiche, ma possiedono interessanti proprietà, che le accomunano alle sequenze assolutamente aleatorie. In [28] è stato dimostrato che array di antenne progettati secondo la sequenza di Rudin-Shapiro, all'aumentare del numero di antenne e quindi dell'ordine della sequenza, tendono ad avere diagramma di radiazione uniforme in funzione dell'angolo di radiazione (Figura 3).



**Figura 3. Diagramma di radiazione di un array di antenne basato sulla sequenza di Rudin-Shapiro. Esso risulta omnidirezionale, ovvero pressocchè costante al variare dell'angolo di trasmissione.**

Una sequenza aperiodica di Rudin-Shapiro è generata utilizzando un alfabeto a due simboli, ad esempio  $\{+1, -1\}$ , utilizzando la seguente formula ricorsiva:

$$\alpha_0 = 1, \alpha_{2n} = \alpha_n, \quad \alpha_{2n+1} = (-1)^n \alpha_n. \quad (1)$$

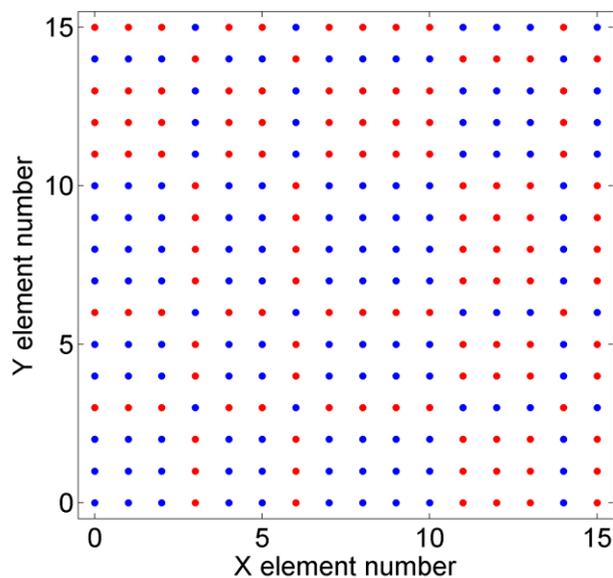
Ad esempio, i primi dieci simboli nella sequenza di Rudin-Shapiro sono:

$$1, 1, 1, -1, 1, 1, -1, 1, 1, 1.$$

La sequenza che si ottiene con la formula in (1) è detta sequenza alternata di Rudin-Shapiro. Esiste un altro tipo di sequenza di Rudin-Shapiro, detta sequenza Golay-complementare, che, fissato il numero di elementi, per la prima metà coincide con la sequenza alternata e nella seconda metà ha i simboli invertiti, ovvero -1 è sostituito con 1 e viceversa.

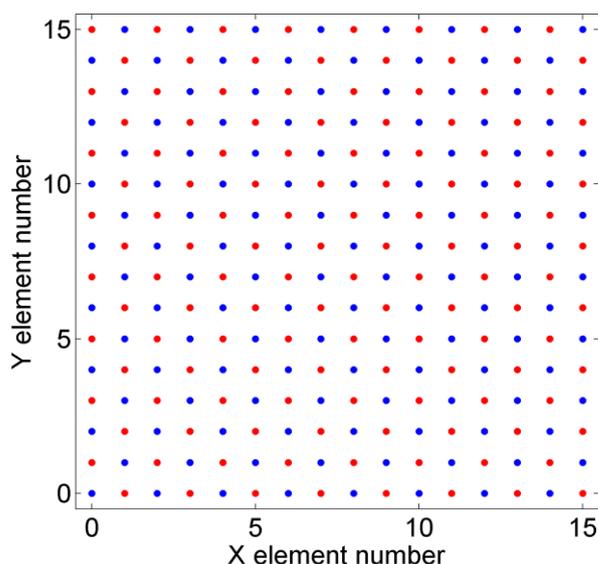
Esistono altri modi per generare le sequenza di Rudin-Shapiro, ad esempio sfruttando gli omonimi polinomi  $P_m(\xi)$  e  $Q_m(\xi)$ , i cui coefficienti corrispondono rispettivamente alla sequenza alternata e a quella Golay-complementare [28].

La sequenza di Rudin-Shapiro bi-dimensionale si ottiene facendo il prodotto cartesiano tra due vettori identici che rappresentano la relativa sequenza mono-dimensionale. Quindi se  $X_N$  è il vettore contenente la sequenza di Rudin-Shapiro con  $N$  elementi, la corrispondente sequenza bi-dimensionale, si ottiene dall'operazione:  $\{X_N \times X_N\}$ , dove l'operatore  $\times$  indica il prodotto cartesiano. In Figura 4 è illustrata la sequenza alternata di Rudin-Shapiro bi-dimensionale con  $16 \times 16$  elementi, in cui i due colori corrispondono ai due simboli dell'alfabeto.



**Figura 4. Sequenza di Rudin-Shapiro alternata bidimensionale con 16 x 16 elementi. I due colori rappresentano i due simboli dell'alfabeto.**

Una seconda sequenza utilizzata è la sequenza periodica formata dall'alternanza dei due simboli  $\{+1, -1\}$ . Questa sequenza è stata presa in considerazione in quanto il suo diagramma di radiazione possiede due lobi principali ad un angolo  $\pm\theta$ , dove  $\theta$  può essere opportunamente progettato. La sequenza binaria periodica bidimensionale è illustrata in Figura 5.



**Figura 5. Sequenza periodica binaria bidimensionale con 16 x 16 elementi. I due colori rappresentano i due simboli dell'alfabeto.**

Le metasurpefici da progettare sono dunque array inomogenei costituiti da due diversi elementi dielettrici, che corrispondono ai simboli  $\{+1, -1\}$  e che si susseguono nel piano secondo le sequenze sopra descritte. Nel paragrafo successivo viene descritto il metodo di progettazione dei due elementi.

### 2.3 Progettazione del singolo elemento

Il materiale degli elementi che costituiranno la metasuperficie è il silicio cristallino. Pertanto, per implementare entrambe le sequenze introdotte nel paragrafo precedente, occorre trovare due elementi in silicio cristallino, che implementino i due simboli  $\{+1, -1\}$ . Con riferimento a quanto dimostrato in [28], per ottenere un diagramma di radiazione omnidirezionale, ai due simboli devono corrispondere due elementi che abbiano coefficiente di trasmissione di pari ampiezza, e una differenza di fase di  $\pi$  l'uno rispetto all'altro.

Per la progettazione dei due elementi, si adotta la strategia proposta in [29]. A differenza delle altre strategie di implementazione di metasuperfici, in [29] gli autori utilizzano elementi non risonanti per realizzare una metasuperficie. Per la presente applicazione si scelgono metasuperfici basate su elementi non risonanti per avere una maggiore tolleranza agli errori di fabbricazione.

Dunque, l'obiettivo di questa prima fase è progettare due elementi in silicio cristallino al di fuori del regime risonante, che se posti all'interfaccia aria-silicio presentino un coefficiente di trasmissione uguale in modulo e con un differenza di fase di  $\pi$ .

Come elementi base sono stati scelti dei cilindri, e la lunghezza d'onda di progetto è stata scelta pari a 750nm. La luce proviene dall'aria, che rappresenta il mezzo d'incidenza, e viene trasmessa nel wafer interagendo con la metasuperficie.

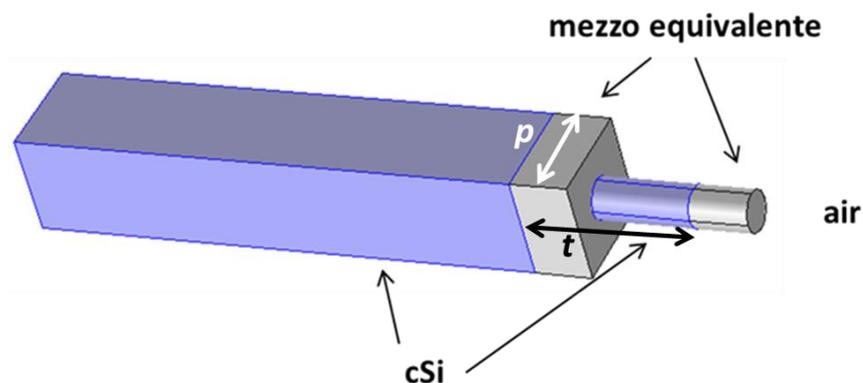
#### 2.3.1 Modellazione numerica

Per dimensionare e progettare numericamente gli elementi, è stato definito un modello numerico per approssimare lo stack della cella solare. Lo strato di silicio cristallino è considerato semi-infinito, su di esso vi è il cilindro dello stesso materiale. Al di sopra del silicio, sono depositati i seguenti strati conformi: 5 nm di aSi, ~15 nm di n-SiOx e 70 nm di AZO. Lo stack di questi tre strati, essendo i loro spessori molto più piccoli delle lunghezze d'onda di lavoro, è equivalente otticamente a un unico strato di spessore pari alla somma dei singoli spessori, e indice di rifrazione calcolato con la formula delle misture per compositi stratificati [30], ovvero:

$$n_{eq} = \sqrt{n_i^2 t_i}, \quad (2)$$

dove  $t_i$  è lo spessore del  $i$ -simo materiale e  $n_i$  il suo indice di rifrazione. Nell'eq. (2) è stata omessa la dipendenza degli indici di rifrazione dalla lunghezza d'onda  $\lambda$ .

Pertanto il singolo elemento considerato è modellato come in Figura 6.



**Figura 6. Schematizzazione numerica per la progettazione del singolo elemento**

I due parametri di progetto della struttura in Figura 6 sono:

$p$ : il periodo della cella unitaria (quadrata),

$t$ : l'altezza del cilindro.

Il diametro del cilindro,  $d$ , è lasciato libero di variare tra 0 e  $p$ . I due parametri,  $p$  e  $t$ , devono essere ottimizzati in modo da:

- i) massimizzare la trasmittanza dell'elemento, per ogni valore del duty cycle ( $d/p$ ) tra 0 e 1;
- ii) massimizzare, al variare del duty cycle, la variazione della fase del coefficiente di trasmissione.

Per l'analisi numerica della geometria in Figura 6 si utilizza il software commerciale COMSOL Multiphysics [31]. La geometria è terminata nelle due direzioni trasverse ( $x$ ,  $y$ , in cui giace la metasuperficie) con condizione di periodicità di Floquet, in modo da simulare un array bidimensionale omogeneo infinito, e nella direzione longitudinale da due porte. Il campo incide normalmente ed è polarizzato lungo  $x$  ed ha lunghezza d'onda pari a 750 nm. La dimensione massima della mesh è  $1/8$  della lunghezza d'onda della luce nelle diverse regioni dielettriche.

### 2.3.2 Analisi parametrica

Per trovare i valori ottimali dei due parametri  $p$  e  $t$ , al fine di soddisfare i criteri descritti nel paragrafo precedente, è stata effettuata un'analisi parametrica, così come in [29]. I risultati sono mostrati in Figura 7 per  $p=0.7 \lambda_n$ ,  $0.8 \lambda_n$ ,  $0.9 \lambda_n$ , e per  $t=0.8 \lambda_n$ ,  $1.0 \lambda_n$ ,  $1.2 \lambda_n$ , dove  $\lambda_n$  è la lunghezza d'onda di progetto all'interno del silicio. La lunghezza d'onda di progetto è stata scelta pari a 750 nm, a cui il silicio ha un indice di rifrazione pari a  $n \sim 3.8 + i0.008$ . Pertanto  $\lambda_n \sim 198$  nm.

Valori di  $p$  maggiori di  $\lambda_n$  farebbero propagare modi di ordine superiore in trasmissione, il che renderebbe difficile la progettazione; valori di  $p$  inferiori a  $0.9 \lambda_n$  determinano, invece, una minore trasmittanza a più alti valori del duty cycle ed in generale un andamento più irregolare. Il valore di  $t$  influisce maggiormente sulla variazione della fase al variare del duty cycle.

Dai grafici in Figura 7 si ottiene che i valori ottimali, ovvero che forniscono il miglior compromesso tra regolarità della curva di trasmittanza e grande variazione di fase al variare del duty cycle, sono  $p=0.9 \lambda_n$  e  $t=1.2 \lambda_n$ . Per tali valori di  $p$  e  $t$ , il coefficiente di trasmissione (in modulo quadro e fase) aria-silicio al variare del duty cycle è mostrato in Figura 8.

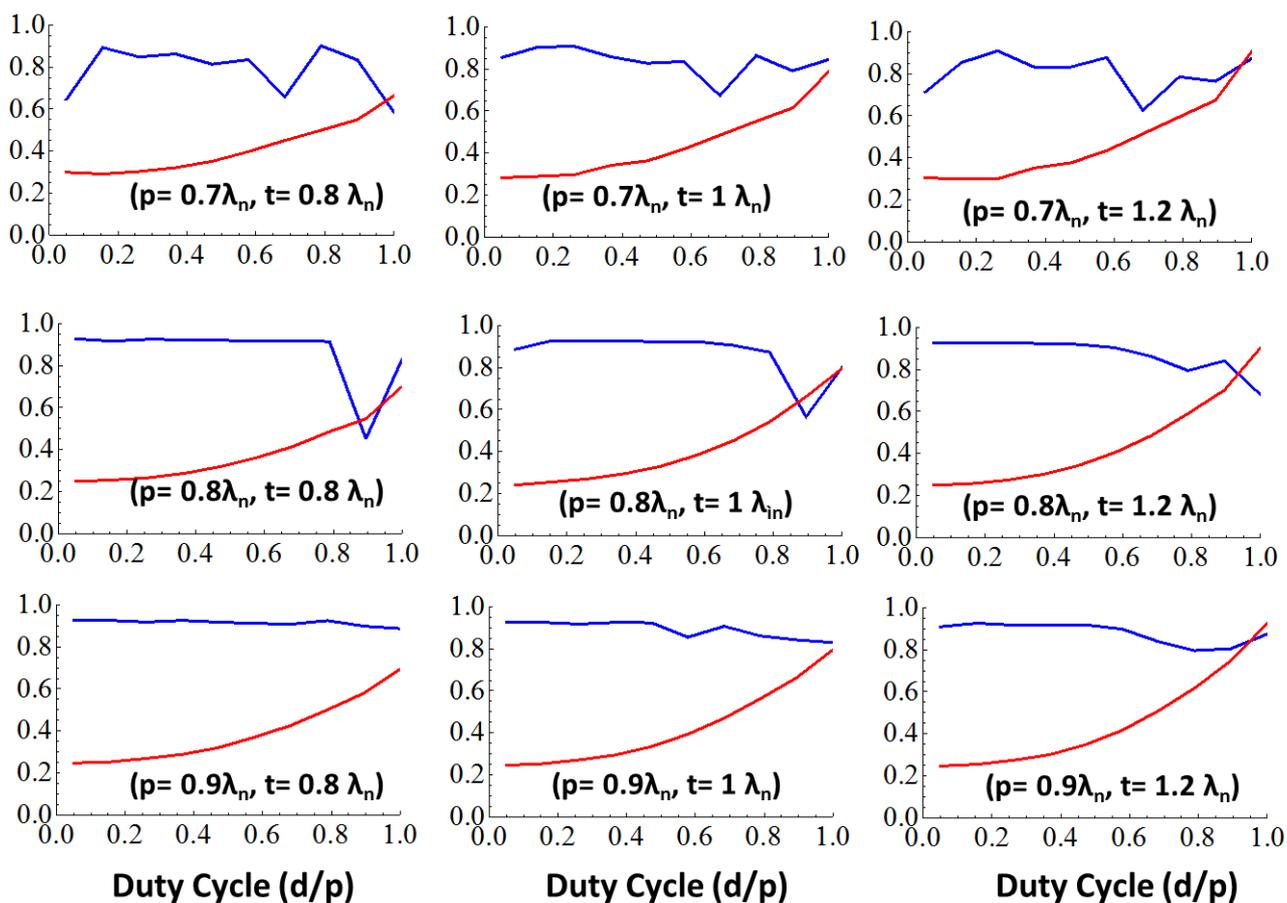


Figura 7. Coefficiente di trasmissione (modulo al quadrato) (in blu) e fase normalizzata a  $2\pi$  (in rosso) al variare dei due parametri  $p$  e  $t$ .

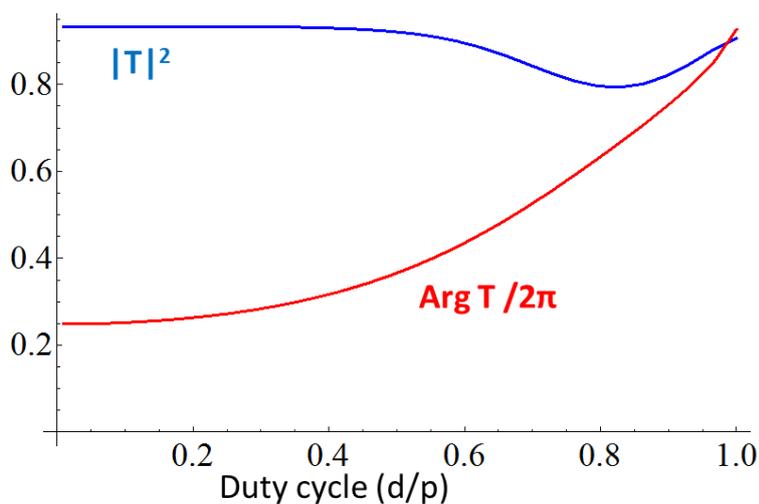


Figura 8. Coefficiente di trasmissione (modulo al quadrato) (in blu) e fase normalizzata a  $2\pi$  (in rosso).

Nelle Figure 7-8, essendo il periodo  $p$  fissato, ciò che varia è esclusivamente il diametro  $d$ , che varia tra 0 e  $p$ . Dalla figura si nota che per i valori di  $p$  e  $t$  considerati, la trasmittanza è superiore all'80% per ogni valore del diametro  $d$  del cilindro, e, al variare di  $d$  (essendo  $p$  fissato), ottengo un'escursione di fase circa pari a  $0.8 \cdot 2\pi$ . Ciò consente di individuare due elementi, ovvero due valori diversi del diametro, tali che il coefficiente di trasmissione, in corrispondenza di tali valori di  $d$ , abbia la stessa ampiezza ed una differenza di fase di  $\pi$ . Questi due elementi, ovvero questi due cilindri con diametro diverso, saranno usati per implementare la sequenza di Rudin-Shapiro e la sequenza binaria.

I due valori del duty cycle che soddisfano i suddetti criteri sono 0.35 e 0.93, che corrispondono ai seguenti valori di diametro:

- $d_1 = 0.35 \quad p = 63.6 \text{ nm}$
- $d_2 = 0.93 \quad p = 168.3 \text{ nm}$

Come si vede dalla Figura 8, tra questi due valori di duty cycle si ha una differenza di 0.5 tra i valori della curva  $\text{Arg } T/(2\pi)$ , che corrisponde ad una differenza di  $\pi$ . L'ampiezza del coefficiente di trasmissione è pressoché uguale per i due valori di duty cycle considerati.

#### 2.4 Analisi in banda del singolo elemento

La progettazione descritta nel paragrafo precedente da cui sono stati ricavati i due elementi con diametro  $d_1$  e  $d_2$ , rispettivamente, è stata condotta alla lunghezza d'onda di progetto  $\lambda_0 = 750 \text{ nm}$ .

Per verificare il comportamento a larga banda di tali elementi, è stato calcolato il coefficiente di trasmissione dei due elementi nel range di lunghezze d'onda compreso tra 700 e 1000 nm.

I risultati sono mostrati nelle Figure 9 e 10 e sono stati ottenuti da una simulazione numerica in COMSOL [31] con gli stessi parametri descritti nel paragrafo precedente variando la lunghezza d'onda del campo incidente.

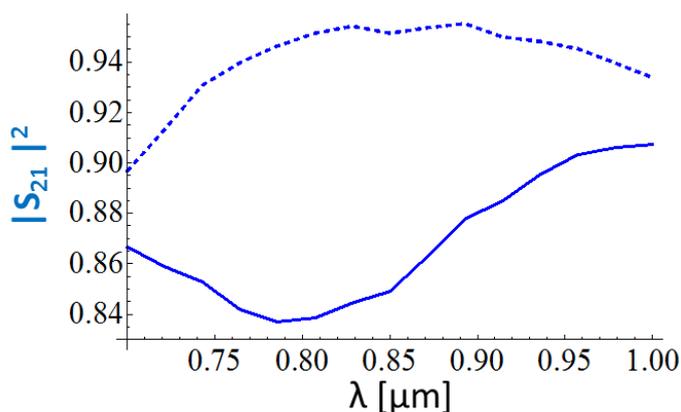


Figura 9. Variazione delle trasmittanza dei due elementi con diametro  $d_1=63.6\text{nm}$  (curva tratteggiata), e con diametro  $d_2=168.3\text{nm}$  (curva continua).

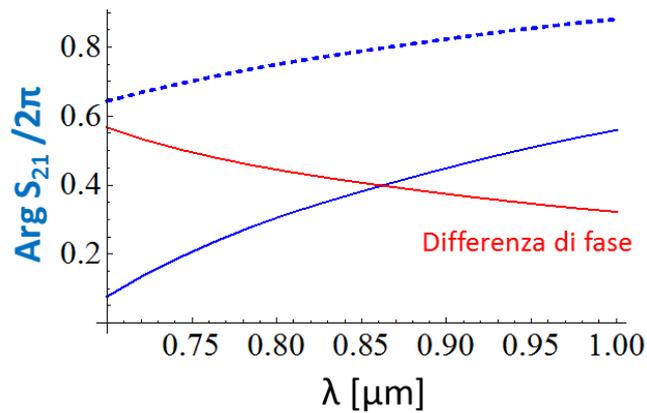


Figura 10. Variazione della fase del coefficiente di trasmissione dei due elementi con diametro  $d_1=63.6\text{nm}$  (curva tratteggiata), e con diametro  $d_2=168.3\text{nm}$  (curva continua). In rosso a differenza tra le due fasi, che idealmente dovrebbe essere costante e pari a 0.5.

Dalla Figura 9 si vede che la trasmittanza subisce piccole variazioni nel range di lunghezze d’onda considerato. La fase del coefficiente di trasmissione subisce maggiori variazioni; ma ciò che conta ai fini del funzionamento della metasuperficie, non è la fase assoluta del coefficiente di trasmissione dei due elementi, bensì la loro differenza di fase. In Figura 10 in rosso è illustrata la variazione della differenza di fase tra il coefficiente di trasmissione dei due elementi al variare della lunghezza d’onda. Idealmente tale differenza di fase dovrebbe essere costante e pari a  $\pi$  (0.5 nella Figura 10). Per i due elementi considerati essa subisce variazioni di circa il  $\pm 20\%$  dal valore ideale. Tali variazioni sono comunque compatibili con le variazioni di fase presenti in Letteratura, ai fini dell’implementazione di una sequenza di Rudin-Shapiro.

### 2.5 Progettazione della metasuperficie

Ottenuti i due elementi, che rappresentano i due simboli dell’alfabeto base, è possibile implementare la metasuperficie basata sulla sequenza di Rudin-Shapiro. Come esempio, consideriamo la sequenza alternata monodimensionale formata da 8 elementi: {1, 1, 1, -1, 1, 1, -1, 1}. Assegnando al simbolo 1, l’elemento con diametro  $d_1$  ed al simbolo -1 l’elemento con diametro  $d_2$ , l’implementazione di tale sequenze di Rudin-Shapiro è illustrata in Figura 11.

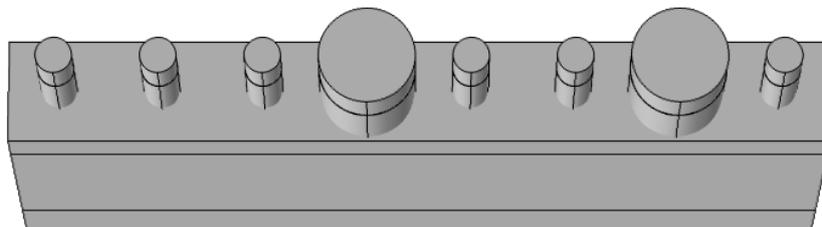
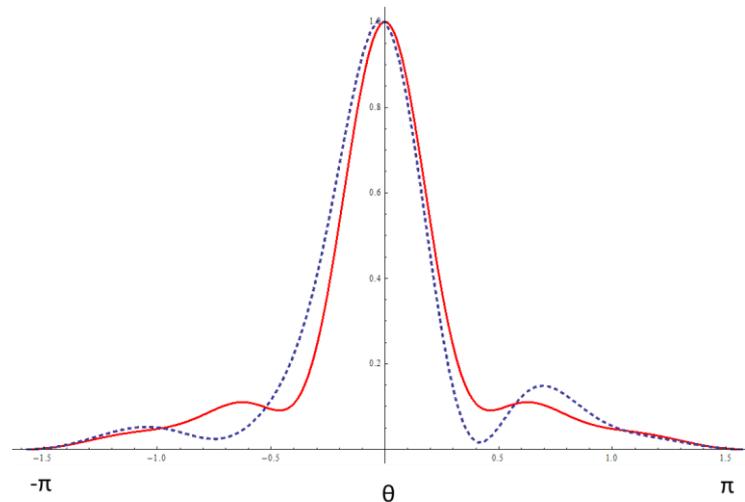


Figura 11. Esempio di implementazione della sequenza alternata di Rudin-Shapiro per 8 elementi.

Come prima verifica è stato effettuato il confronto tra il diagramma di radiazione ottenuto numericamente con la struttura in Figura 11, ed il diagramma di radiazione teorico di un array di antenne progettato secondo Rudin-Shapiro. Tale confronto è illustrato in Figura 12.

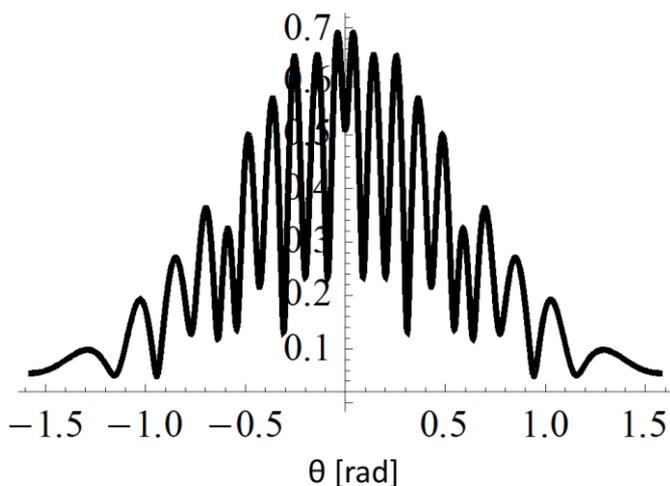


**Figura 12. Confronto tra il diagramma di radiazione numerico (tratteggiato in blu) e quello teorico (in rosso) per una sequenza di Rudin-Shapiro di 8 elementi.**

Il diagramma di radiazione teorico è preso da [28], quello numerico invece è ottenuto in due passi: 1-calcolo del campo vicino trasmesso nel silicio dalla struttura in Figura 11 attraverso una simulazione numerica in COMSOL Multiphysics [31] (la geometria in Figura 11 è terminata nelle due direzioni trasverse con condizioni di periodicità di Floquet e nella direzione longitudinale da PML opportunamente progettati per evitare riflessioni, la dimensione massima della mesh è  $1/8$  della lunghezza d'onda nelle diverse zone dielettriche, il campo incide normalmente ed è polarizzato lungo  $x$ ); 2-calcolo del campo lontano attraverso la formula analitica, a partire dal campo vicino ottenuto al passo 1 [32].

Il confronto in Figura 12 conferma la possibilità di implementare una sequenza di Rudin-Shapiro con i due elementi cilindrici progettati, in quanto i risultati numerici sono in ottimo accordo con quelli teorici. Chiaramente i diagrammi di radiazione in Figura 12 sono ben lontani dall'essere omnidirezionali, in quanto il numero di elementi che compongono la sequenza è molto piccolo, ma tale confronto è un'ulteriore verifica del metodo che si è scelto per implementare la metasuperficie.

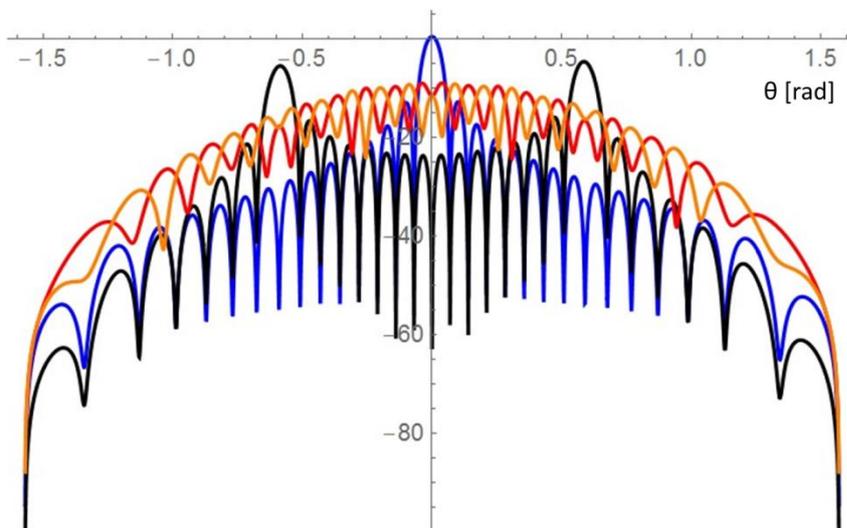
Al crescere del numero di elementi, il diagramma di radiazione tende ad essere uniforme in funzione dell'angolo di trasmissione. Ad esempio, già con 16 elementi si vede un notevole miglioramento (Figura 13). Al crescere del numero degli elementi cresce però la complessità (numero di gradi di libertà) della simulazione numerica, che diventa impraticabile.



**Figura 13. Diagramma di radiazione teorico di un array di antenne basato sulla sequenza alternata di Rudin-Shapiro con 16 elementi.**

Le sequenze considerate nelle simulazioni numeriche sono sequenze mono-dimensionali, per limitare il carico computazionale. Le sequenze che dovranno essere realizzate sono invece sequenze bi-dimensionali.

Consideriamo ora una cella solare molto piccola in cui entrano solo 16 elementi cilindrici e confrontiamo il diagramma di radiazione delle varie sequenze considerate, includendo: 1) la cella flat; 2) la sequenza periodica binaria formata dall'alternanza dei due simboli {1, -1}; 3) la sequenza alternata di Rudin-Shapiro; e 4) la sequenza Golay-complementare di Rudin-Sahpiro. In Figura 14 sono confrontati i diagrammi di radiazione di queste quattro strutture.



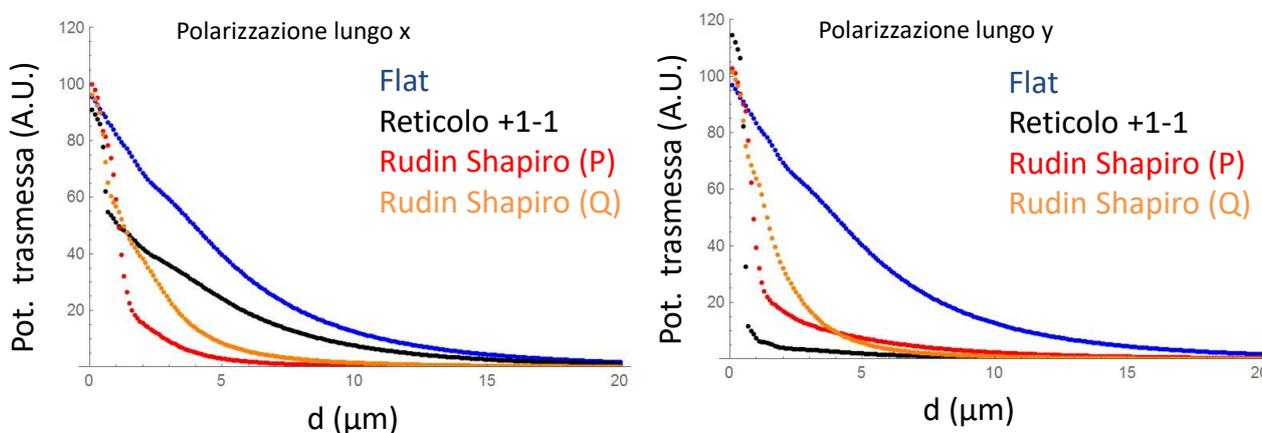
**Figura 14. Confronto del diagramma di radiazione teorici in dB di quattro strutture con 16 elementi: la cella flat (in blu); la cella patternata con sequenza periodica binaria (in nero); la cella patternata con la sequenza di Rudin-Shapiro alternata (in rosso) e Golay-complementare (in arazione).**

Dalla Figura 14 si vede chiaramente che le sequenze di Rudin-Shapiro presentano una maggiore uniformità in angolo del diagramma di radiazione, rispetto alle altre sequenze considerate. La sequenza binaria presenta invece due lobi principali, in corrispondenza di due angoli simmetrici rispetto a  $\theta=0$ , ovvero  $\pm 35^\circ$ .

## 2.6 Analisi delle prestazioni attese

Nel paragrafo precedente abbiamo confrontato il diagramma di radiazione delle quattro sequenze considerate. In questo paragrafo si vuole ottenere una stima della potenza assorbita al variare della profondità del silicio per le quattro strutture. Simulare una profondità del silicio superiore a pochi  $\mu\text{m}$  è impraticabile con le nostre attuali risorse computazionali, anche con una cella di ridotte dimensioni.

Pertanto abbiamo affrontato la stima dell'assorbimento da un punto di vista analitico, assumendo l'ipotesi di campo lontano, per una cella formata da 8 elementi. Fermo restando che a rigore l'ipotesi di campo lontano non vale all'interno della cella solare (viste le sue dimensioni sottili), tale analisi fornisce un'idea dell'effetto di spreading angolare che può imprimere la sequenza di Rudin-Shapiro a confronto con una semplice sequenza periodica o con una cella flat.



**Figura 15. Stima della potenza trasmessa per le sue polarizzazioni (x, a sinistra, e y, a destra) del campo incidente al variare della profondità z del silicio per le quattro strutture: la cella flat (in blu); la cella patternata con sequenza periodica binaria (in nero); la cella patternata con la sequenza di Rudin-Shapiro alternata (in rosso) e golay-complementare (in arancione).**

In Figura 15 è illustrata la potenza trasmessa per le quattro strutture considerate: flat, binaria periodica, le due sequenze (alternata e Golay-complementare) di Rudin-Shapiro. Le curve in Figura 15 sono state calcolate analiticamente, supponendo la stessa potenza totale trasmessa nel wafer per tutte le strutture. Evidentemente quanto più rapidamente decresce la potenza trasmessa, tanto più rapidamente aumenta la potenza assorbita nel silicio, al crescere della profondità z. Dalla Figura 15 si vede quindi come l'assorbimento della potenza per tutte le celle patternate è concentrato nei primi  $\mu\text{m}$  di spessore del silicio, mentre per la cella flat l'assorbimento avviene più lentamente nei primi 15/20  $\mu\text{m}$  di silicio. È stato verificato che il comportamento della cella (a rigore valido alla lunghezza d'onda di 750nm) è uniforme nel range di lunghezze d'onda tra 500 e 1000 nm.

In definitiva, sebbene non sia possibile ottenere una stima numerica delle prestazioni di una cella solare con una metasuperficie basata sulla sequenza alternata di Rudin-Shapiro, l'analisi effettuata evidenzia come la sequenza alternata di Rudin-Shapiro sia in grado di concentrare il campo nei primi  $\mu\text{m}$  della cella. Inoltre la struttura progettata riesce per entrambe le polarizzazioni a diffondere la luce su un ampio spreading angolare aumentando il cammino ottico della luce stessa (e quindi potenzialmente l'assorbimento della cella su spessori sottili).

## 2.7 Riassunto del progetto e valutazioni di fattibilità

In questo paragrafo si riportano i parametri delle due strutture progettate: quella basata sulla sequenza alternata di Rudin-Shapiro, e quella periodica binaria.

### 2.7.1 Parametri di progetto del pattern basato sulla sequenza di Rudin-Shapiro

Il pattern da realizzare è formato da 65536 x 65536 elementi corrispondenti ad un'area di 11.862 mm<sup>2</sup>. Il periodo lungo le due direzioni del piano è pari a 181 nm e l'altezza dei cilindretti è pari a 242 nm. Una porzione del pattern di Rudin-Shapiro è illustrato in Figura 16.

Al simbolo 1 dell'alfabeto è associato il cilindro con diametro minore  $d_1 = 63.6$  nm, mentre al simbolo -1 è associato il cilindro con diametro maggiore  $d_2 = 168.3$  nm.

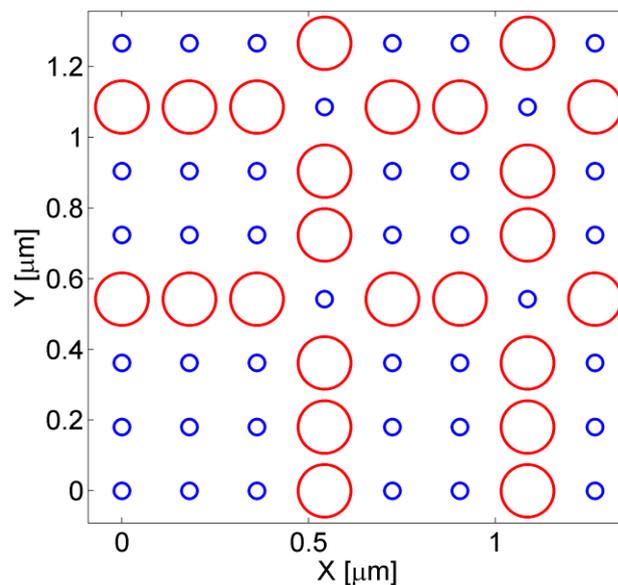


Figura 16. Sezione del pattern di Rudin-Shapiro da realizzare sulla cella.

### 2.7.2 Parametri di progetto del pattern basato sulla sequenza periodica binaria

Tale sequenza consiste nell'alternanza dei due elementi in entrambe le direzioni del piano. Una porzione è illustrata in Figura 17. Il pattern da realizzare è formato da 65536 x 65536 elementi corrispondenti ad un'area di 11.862 mm<sup>2</sup>. Il periodo lungo le due direzioni del piano è pari a 181 nm e l'altezza dei cilindretti è pari a 242 nm. I diametri dei due cilindri che si alternano sono pari a:  $d_1 = 63.6$  nm e  $d_2 = 168.3$  nm.

Una volta definiti, i pattern progettati sono stati valutati in termini di fattibilità dalla Scuola Superiore Sant'Anna di Pisa coinvolta in un Accordo di Collaborazione parallelo con l'ENEA dedicato agli aspetti realizzativi delle metasuperfici su wafer di silicio. L'analisi ha evidenziato delle criticità per il design Rudin-Shapiro, legate alla distanza estremamente ridotta tra cilindri di diametro maggiore adiacenti (~13 nm da garantire su aree dell'ordine del cm<sup>2</sup> e con altezze dei cilindri di oltre 200 nm, dove la non perfetta verticalità può essere un forte problema). Si è dunque deciso di procedere per la presente annualità con il test realizzativo del pattern binario periodico. La fase sperimentale è stata completata a valle del complesso lavoro di messa a punto dei vari passi di processo necessari per la nanostrutturazione del wafer, condotto dal Centro Tecnologie per la Fotonica Integrata "INPHOTEC" della Scuola Superiore Sant'Anna parallelamente alla fase di progettazione delle metasuperfici. Attività e risultati sono descritti nel Report "Nanostrutture su substrati di Silicio per celle fotovoltaiche di nuova generazione", RdS-PAR2015-295.

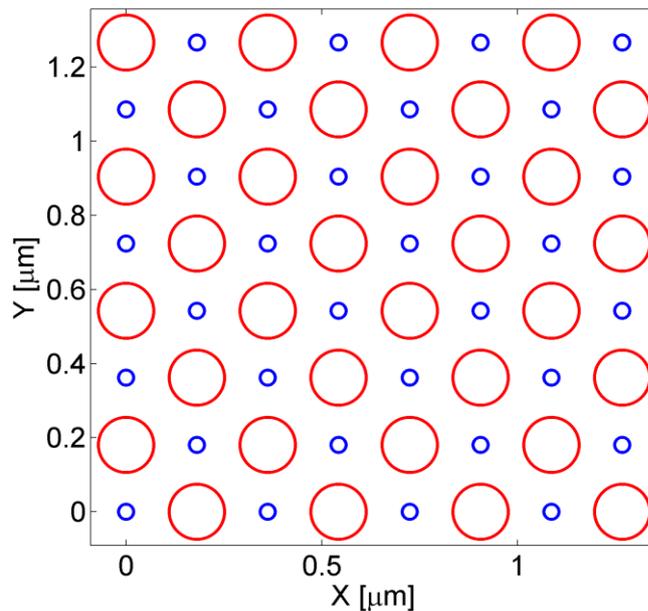


Figura 17. Sezione del pattern binario periodico da realizzare sulla cella.

### 3 Conclusioni

L'attività si è incentrata sullo sviluppo di una metasuperficie dielettrica in grado di ottimizzare le prestazioni di celle solari a eterogiunzione. Partendo dalle specifiche della cella si è scelto di realizzare una funzione di "spreading" angolare uniforme della radiazione incidente per confinare il campo su una profondità ridotta. Tra le sequenze possibili si è scelto di investigare sugli effetti di una sequenza di Rudin-Shapiro che mostra vantaggi in termini di uniformità del diagramma di radiazione. La progettazione numerica ha portato alla definizione delle dimensioni delle singole antenne costituenti la metasuperficie, costituite da corpi cilindrici di diametri 63.6 e 168.3 nm. Sono state valutate le prestazioni in banda dimostrando come i coefficienti di trasmissione si mantengano pressoché costanti fino a 1000 nm di lunghezza d'onda. Si è passato a valutare quindi la bontà del progetto simulando una struttura finita di sequenza di Rudin-Shapiro con gli elementi progettati. La simulazione ha mostrato un buon accordo tra il diagramma di radiazione teorico e il diagramma di radiazione numerico. Infine è stata valutata la potenza trasmessa oltre la metasuperficie in funzione della distanza, mostrando un guadagno netto delle sequenze progettate rispetto a una cella senza strutturazione. In altri termini l'obiettivo di confinare il campo in sommità del wafer con allargamento della radiazione è stato raggiunto. Tale effetto sarà tanto più influente sulle prestazioni delle celle finali quanto più sottili saranno i wafer di silicio.

## 4 Riferimenti bibliografici

- [1] A. Chutinan and S. John, Light trapping and absorption optimization in certain thin-film photonic crystal architectures, *Phys. Rev. A* 78 (2008), 023825.
- [2] I. Tobias, A. Luque, and A. Marti, Light intensity enhancement by diffracting structures in solar cells, *J. Appl. Phys.* 104 (2008), 034502.
- [3] A Micco, A Ricciardi, M Pisco, V La Ferrara, LV Mercaldo, P Delli Veneri, A Cutolo, A Cusano, "Light trapping efficiency of periodic and quasiperiodic back-reflectors for thin film solar cells: A comparative study", *Journal of Applied Physics* 114 (6) (2013), 063103-063103-9.
- [4] V.G. Veselago, The electrodynamics of substances with simultaneously negative values of  $\epsilon$  and  $\mu$ , *Sov. Phys. Uspekhi* 10 (1968), 509.
- [5] J. B. Pendry, D. Schurig, and D. R. Smith, Controlling Electromagnetic Fields, *Science* 312 (2006), 1780.
- [6] C. M. Soukoulis and M. Wegener, Materials science. Optical metamaterials--more bulky and less lossy, *Science* 330 (2010), 1633.
- [7] N. Yu, P. Genevet, M.A. Kats, F. Aieta, J.-P. Tetienne, F. Capasso, and Z. Gaburro, Light Propagation with Phase Discontinuities: Generalized Laws of Reflection and Refraction, *Science* 334 (2011), 333.
- [8] X. Ni, N. K. Emani, A. V. Kildishev, A. Boltasseva, V. M. Shalaev, Broadband light bending with plasmonic nanoantennas, *Science* 335 (2012), 427.
- [9] L. Zou, W. Withayachumnankul, C.M. Shah, A. Mitchell, M. Bhaskaran, S. Sriram, and Ch. Fumeaux, Dielectric resonator nanoantennas at visible frequencies, *Optics Express* 21 (2013), 1344.
- [10] H.A. Atwater, and A. Polman, "Plasmonics for improved photovoltaic devices," *Nature Mater.* 9, 205 (2010)
- [11] S. Mookapati, F.J. Beck, A. Polman, and K.R. Catchpole, "Designing periodic arrays of metal nanoparticles for light-trapping applications in solar cells," *Appl. Phys. Lett.* 95 (2009), 053115.
- [12] D. Lin, P. Fan, E. Hasman and M. L. Brongersma, "Dielectric gradient metasurface optical elements," *Science* 345 (2014), 298–302.
- [13] F Capolino. *Theory and Phenomena of Metamaterials*. CRC Press; 2009.
- [14] Smith, D. R., Padilla, W. J., Vier, D. C., Nemat-Nasser, S. C., & Schultz, S. Composite medium with simultaneously negative permeability and permittivity. *Phys. Rev. Lett.* 2000; 84, 4184-4187.
- [15] Pendry, J. B. Negative refraction makes a perfect lens. *Phys. Rev. Lett.* 2000; 85, 3966-3966.
- [16] Valentine, J., Zhang S, Zentgraf T, Ulin-Avila E, Genov DA et al. Three-dimensional optical metamaterial with a negative refractive index. *Nature* 2008; 455, 376-379.
- [17] Liu, N., Guo HC, Fu LW, Kaiser S, Schweizer H et al. Three-dimensional photonic metamaterials at optical frequencies. *Nat. Mater.* 2008; 7, 31-37.
- [18] Chanda, D., Shigeta K, Gupta S, Cain T, Carlson A et al. Large-area flexible 3D optical negative index metamaterial formed by nanotransfer printing. *Nat. Nanotechnol.* 2011; 6, 402-407.
- [19] Berry, D. C., Malech, R. G, & Kennedy, W. The reflectarray antenna. *IEEE Trans. Antennas Propagat.* 1963; 11, 645-651
- [20] McGrath, D. Planar three-dimensional constrained lenses. *IEEE Trans. Antennas Propagat.* 1986; 34, 46-50.
- [21] Meinzer, N., Barnes, W. L, & Hooper, I. R. Plasmonic meta-atoms and metasurfaces. *Nature Photon.* 2014; 8, 889-898
- [22] Aieta, F, Genevet P, Kats MA, Yu NF, Blanchard R et al. Aberration-free ultrathin flat lenses and axicons at telecom wavelengths based on plasmonic metasurfaces. *Nano Lett.* 2012; 12, 4932-4936
- [23] Aieta, F., Kats, M. A., Genevet, P., & Capasso, F. Multiwavelength achromatic metasurfaces by dispersive phase compensation. *Science* 2015; 347, 1342-1345
- [24] Yang, YM., Kravchenko, I. I., Briggs, D. P., & Valentine, J. All-dielectric metasurface analogue of electromagnetically induced transparency. *Nat. Commun.* 2014; 5, 5753
- [25] Zhang, XJ., & Wu, Y. Effective medium theory for anisotropic metamaterials. *Sci. Rep.* 2015; 5, 7892
- [26] Silva, A., Monticone F, Castaldi G, Galdi V, Alu A et al. Performing mathematical operations with metamaterials. *Science* 2014; 343, 160-163

- [27] Pors, A., Nielsen, M. G., & Bozhevolnyi, S. I. Analog computing using reflective plasmonic metasurfaces. *Nano Lett.* 2015; 15, 791-797
- [28] V. Galdi et al., "Radiation Properties of One-Dimensional Random-Like Antenna Arrays Based on Rudin–Shapiro Sequences," *IEEE Trans Antenn Propag* 53, 3568 (2005)
- [29] A. Zhan et al., "Low-Contrast Dielectric Metasurface Optics," *ACS Photonics* 3, 209 (2016)
- [30] M. Born and E. Wolf, *Principles of Optics*, Pergamon Press 1970.
- [31] <https://www.comsol.it/>
- [32] Collin, R. E. *Antennas and Radiowave Propagation*, McGraw-Hill, 1985.

## Curriculum scientifico del gruppo di lavoro dell'Università del Sannio

**Andrea Cusano** was born on May 31, 1971, in Caserta. He received his Master degree cum Laude in Electronic Engineering on November 27, 1998 from University of Naples "Federico II", Italy and his Ph.D. in "Information Engineering" from the same university, with tutor Professor Antonello Cutolo. He is actually Associate Professor at the University of Sannio, Benevento. From 1999 his activity is focused in the field of optoelectronic devices for sensing and telecommunication applications. He was cofounder in 2005 of the spin-off company "OptoSmart S.r.l." and in 2007 of the spin-off company "MDTech". He published over 100 papers on prestigious international journals and more than 150 communications in well-known international conferences worldwide; he has 4 international patents currently in charge of prestigious industrial companies (Ansaldo STS, Alenia WASS, Optosmart and MdTEch) and more than 10 national patents. He is also referee of several scientific international journals. He is associate editor of Sensors and Transducers Journal, Journal of Sensors (Hindawi), The Open Optics Journal (Bentham), The Open Environmental & Biological Monitoring Journal (Bentham) and the International Journal on Smart Sensing and Intelligent Systems. He is a member of the technical committee of several international conferences such as IEEE Sensors, ICST, EWSHM, EWOFs. Andrea Cusano was principal investigator and scientific responsible of several national and international research projects. He is coauthor of more than 10 chapters published in international books and invited papers in prestigious scientific international journals. He is coeditor of 2 Special Issues (Special Issue on Optical Fiber Sensors, IEEE Sensors 2008, and Special Issue on "Fiber Optic Chemical and Biochemical Sensors: Perspectives and Challenges approaching the Nano-Era", Current Analytical Chemistry, Bentham, 2008. and of 3 scientific international books. He is also consultant for big companies of the Finmeccanica group such as Ansaldo STS and Alenia WASS. He has also collaborations with CERN in Geneva where he is working on the development of innovative sensors for high energy physics applications.

**Marco Pisco** was born in Naples, Italy on 1977. He received the information and telecommunication engineering degree in 2003 from the University of Naples Federico II, Italy. He finished his international Ph.D. course at the University of Sannio, Italy, in joint with the Faculty of Electrical Engineering (FER) at the University of Zagreb in 2007. Currently he is a postdoctoral researcher at the Optoelectronic Division - Engineering Department of the University of Sannio. His field of interest is in the area of optoelectronic sensors and photonic bandgap based devices for sensing and communication applications. He is author and co-author of several international publications, including international journals, conferences and books' chapters and reviewer for IEEE, OSA and Elsevier journals.

**Armando Ricciardi** graduated from University of Sannio (Italy) in Telecommunication Engineering in 2006. He received his Ph.D. in Information Engineering from the University of Naples "Parthenope", in 2010. He spent a half of his Ph.D. at the Microphotonics Group of the St Andrews University in Scotland. From January 2011 he is a post-doc student at the optoelectronic division of the Engineering Department of University of Sannio.

His current research activity essentially focuses on the theoretical analysis and design of Photonic Crystals optical devices for a wide range of applications, including:

- Backreflectors in thin film Solar Cells
- Lab on Fiber Technology
- Hybrid Plasmonic-Photonic structures for biosensing

**Alberto Micco** was born on March 7, 1985 in Benevento, Italy. received his Ph.D. in Information Engineering from the University of Sannio (Italy) in 2015. Since then, he is a post-doc student at the optoelectronic division of the Engineering Department of University of Sannio.

His research interests essentially include the design of backreflectors in thin film Solar Cells and nanostructures to be integrated on optical fibers.

**Maria Principe** (Benevento, 19/11/1983) received the Master Degree in Telecom Engineering cum laude and honorable mention in 2006, and the PhD in Information Engineering in July 2010 from University of Sannio. She attained a SURF fellowship at CALTECH in Pasadena (CA, USA) in 2005, an INFN fellowship at Legnaro National Laboratory in Legnaro (PD, Italy) in 2006, and the 2009/10 Fulbright fellowship for Visiting Student Researcher at University of Texas (TX, USA). Her main research activities focus on development of optical metamaterial and metasurfaces for sensing and communication applications, and of optical coatings for high precision metrology. She is contract professor in physics at Giustino Fortunato University. She is member of the LIGO-Virgo collaboration. She is author of several papers in international Journals, book chapters, and several technical reports and works presented at national and international conferences.