

DESENVOLVIMENTO DE NOVOS MATERIAIS PARA MITIGAÇÃO DE SUJIDADE EM SISTEMAS FOTOVOLTAICOS POR DESIGN INVERSO

Pedro Brito – pbrito@pucminas.br

Antônia Sônia Alves Cardoso Diniz – asacd2012@gmail.com

Sérgio de Moraes Hanriot – hanriot@pucminas.br

Pontifícia Universidade Católica de Minas Gerais, Departamento de Engenharia Mecânica

Lawrence Lee Kazmerski – solarpvkaz@gmail.com

National Renewable Energy Laboratory (NREL)

Resumo. Um dos problemas emergentes relacionados à confiabilidade de sistemas fotovoltaicos é a sujidade – o acúmulo de sujeira nas superfícies externas dos painéis que prejudica a absorção de luz e reduz a eficiência das instalações. Apesar disso, a questão é tratada na maior parte das vezes a partir do ponto de vista estritamente operacional, buscando-se realizar a limpeza dos equipamentos prejudicados por meios manuais ou mecanizados. Desse modo, as soluções encontradas para mitigação do problema de sujidade contrastam com as avançadas técnicas atualmente empregadas em outras áreas voltadas para o aumento da eficiência de sistemas fotovoltaicos, como o desenvolvimento de novos materiais dotados de capacidade superior de conversão de energia. Destacam-se, nesse sentido, as técnicas de design inverso de materiais, por meio das quais se buscam arranjos ou estruturas atômicas fundamentais que gerem funcionalidades específicas favoráveis ao desempenho do produto final. Partindo-se dessa premissa, no presente trabalho propõe-se um primeiro estudo sobre o tema voltado para sujidade, buscando-se identificar as funcionalidades-chave necessárias para o desenvolvimento de novos materiais com propriedades anti-sujidade por meio da metodologia de design inverso. Espera-se que desenvolvimentos posteriores sejam, então, capazes de ampliar o leque de possibilidades de materiais ou recobrimentos disponíveis capazes de aperfeiçoar o rendimento de instalações baseadas em luz solar.

Palavras-chave: Design inverso, Sujidade, Energia solar.

1. INTRODUÇÃO

O desempenho dos módulos fotovoltaicos é fortemente influenciado pela sedimentação de partículas em suas superfícies externas. O acúmulo de sujidade na superfície coletora pode reduzir significativamente (entre 25 a 50%, ou mais) a potência gerada, prejudicando a operação da instalação (Sarver *et al.*, 2013; Mani e Pillai, 2010). Historicamente, os estudos sobre acúmulo de sujidade em painéis fotovoltaicos se concentraram na avaliação de desempenho e eficiência, tendo sido realizados apenas recentemente estudos voltados para a mitigação dos problemas causados pela sedimentação e/ou controle dos mecanismos nela envolvidos (Kazmerski *et al.*, 2014; Kazmerski *et al.*, 2015). Assim, embora a pesquisa envolvendo sujidade acumule cerca de 7 décadas de desenvolvimento, as propriedades fundamentais ligadas ao acúmulo de partículas e o seu controle ainda não são compreendidas satisfatoriamente. Atualmente, a técnica de mitigação mais eficaz é a limpeza física das superfícies dos dispositivos solares com água ou outras soluções. Essa abordagem é dispendiosa em termos de recursos (água) e mão-de-obra, aumentando os custos de operação e manutenção das instalações. Além disso, observa-se que nas regiões onde há maior disponibilidade de energia solar os recursos hídricos são sazonalmente escassos, onerando ainda mais as operações de limpeza.

A poeira pode ser definida como uma partícula de diâmetro inferior a 0,5 mm, sendo normalmente formada por pólen, células animais, fibras têxteis, minerais como areia, argila ou cal, além de poluentes atmosféricos e particulados de origem antrópica. A poeira atmosférica pode originar-se da elevação de elementos do solo pela ação do vento, erupções vulcânicas e trânsito de veículos. A composição, morfologia e tamanho médio das partículas que constituem a poeira podem variar significativamente de acordo com a região por diferenças geológicas, de clima e urbanização. Consequentemente, mecanismos de deposição e taxas de acumulação de sujidade também variam regionalmente.

A influência dos fatores regionais torna complexo o desenvolvimento de técnicas de mitigação de sujidade. Uma das abordagens utilizadas consiste na aplicação de técnicas de modificação superficial e no desenvolvimento de revestimentos que podem ser aplicados sobre a superfície dos dispositivos solares (Sarver *et al.*, 2013). As propriedades físico-químicas ideais de uma superfície com ação anti-sujidade foram elencadas por Cuddihy (1980):

1. Dureza elevada (menor suscetibilidade de incrustação de partículas e maior resistência ao desgaste);
2. Baixa rugosidade (menor possibilidade de incorporação de partículas);
3. Hidrofobia (menor atração a compostos iônicos, absorção de sólidos e retenção de água);
4. Baixa energia superficial (menor propensão à reação química com o meio);
5. Limpeza (especialmente de materiais pegajosos ou viscosos);
6. Ausência de sais solúveis em água (que podem ser combinados com outras partículas de poeira).

Além disso, observam Sarver *et al.*, (2013), os materiais aplicados como revestimentos nas superfícies de dispositivos solares devem apresentar elevada durabilidade em ambientes por vezes agressivos (com tempestades de areia, temperaturas elevadas, exposição a radiação ultravioleta e infravermelha) baixo custo e, naturalmente, elevada transmissibilidade de luz.

A incorporação de várias características ou funcionalidades diferentes em uma superfície motiva o desenvolvimento de novos materiais para serem aplicados no revestimento de painéis solares. Muitos dos dispositivos de destaque desenvolvidos no esteio da revolução tecnológica observada nas últimas décadas como, por exemplo, as próprias células solares fotovoltaicas, lasers de estado sólido, diodos emissores de luz, displays de tela plana, transistores de efeito de campo ou a nova geração de computadores quânticos, são baseados em materiais que apresentam um conjunto de propriedades especializadas. As funcionalidades dos materiais utilizados nessas aplicações tecnológicas incluem a capacidade de absorção de luz, incorporação de elétrons e buracos por dopagem, capacidade para melhorar a condutividade e a mobilidade dos portadores, além de tentar minimizar a recombinação dos portadores em defeitos de estrutura cristalina.

As propriedades especializadas encontradas nos materiais são em geral decorrentes de arranjos estruturais específicos que podem ser inerentes às substâncias envolvidas ou então criados por meio da combinação de blocos de construção primários. Nessa perspectiva, como ressaltaram recentemente Jain *et al.*, (2014), a descoberta de novos materiais funcionais pode ser alcançada pelo arranjo de blocos primários (solventes, colóides, polímeros, etc) para obtenção de morfologias específicas (configuração espacial de moléculas, fases e interfaces) que redundem no comportamento macroscópico desejado (propriedades mecânicas, óticas, catalíticas, etc).

Apesar dos avanços observados nas técnicas de caracterização de materiais nos últimos anos, que aprofundaram o conhecimento acerca das relações entre estrutura interna e propriedades, o teste laboratorial dos diversos arranjos possíveis constitui uma tarefa impraticável pela quantidade de combinações possíveis. Assim, nas últimas décadas se buscou inverter a sequência de trabalho tradicional empregada na pesquisa de novos materiais, levando-se em conta o objetivo seguinte: a partir de propriedades desejadas, determinar o arranjo estrutural necessário. Essa abordagem tornou-se possível com o advento dos recursos computacionais necessários para as simulações numéricas de primeiros princípios (*ab initio* ou *first principles*), mediante as quais é possível passar da escala quântica (estrutura fundamental) para as propriedades macroscópicas desejadas, conforme ilustrado na Figura 1.

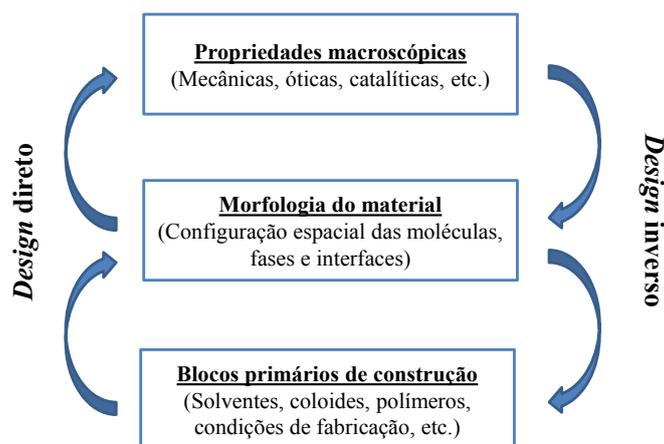


Figura 1- Esquema hierárquico para o desenvolvimento de novos materiais por estratégia direta e inversa.

Adaptação de Jain *et al.* (2014).

Os estudos envolvendo metodologia de design inverso de materiais (“*inverse design*” ou ainda “*materials by design*”) para aplicações em energia solar concentram-se na busca pelo aumento da eficiência dos dispositivos. Conforme relatam Zakutayev *et al.* (2013) diversos compostos inorgânicos ternários possíveis existem que não foram ainda catalogados ou sintetizados. Nesse sentido, as simulações baseadas em primeiros princípios podem ajudar a delinear roteiros de síntese e processamento de compostos, diferenciando os estáveis dos instáveis, e abrindo o leque das possíveis propriedades disponíveis para o projeto de diversos tipos de componentes (Zakutayev *et al.*, 2013). Na busca por novos materiais para sistemas fotovoltaicos, destacam-se os que apresentam elevada absorção fotônica, baseados em elementos abundantes na crosta terrestre, que permitem a elevação da eficiência de conversão de energia. Nesse sentido, as propriedades importantes são o coeficiente de absorção, o formato da curva de absorção e a energia de espaçamento entre bandas (Itthibenchapong *et al.*, 2013). Outros exemplos ainda incluem: controle da energia de espaçamento de bandas em função da estrutura eletrônica (Franceschetti e Zunger, 1999; Piquini *et al.*, 2008), a busca por novos materiais de realização teórica possível (Zhang *et al.*, 2012) e o desenvolvimento de filmes com maior capacidade de absorção de luz (Yu *et al.*, 2013).

Apesar desses avanços significativos, relativamente pouca informação há com relação ao desenvolvimento de novos materiais ou recobrimentos por design inverso para fins de mitigação de sujidade em células solares. Destaca-se a

complexidade no desenvolvimento de tais materiais, já que, como visto, a ação anti-sujidade requer materiais ou superfícies multifuncionais adaptados a características regionais variáveis. No presente trabalho, pretende-se identificar as oportunidades de desenvolvimento no campo de materiais para fins de mitigação de problemas de sujidade em painéis fotovoltaicos, buscando-se compreender as funcionalidades-chave que devem ser alcançadas nos novos materiais desenvolvidos.

2. PRIMEIROS PRINCÍPIOS

Nesta seção se pretende descrever de modo superficial a base teórica dos métodos computacionais empregados em design inverso de materiais, que são denominados “Primeiros Princípios” ou *ab initio* por partirem da descrição dos arranjos de partículas elementares para descreverem características macroscópicas de materiais. A metodologia de design inverso de materiais depende fortemente de modelos matemáticos capazes de descrever arranjos estáveis de átomos de que possuam as propriedades consideradas desejáveis para uma aplicação. Por sua escala reduzida, esses modelos, por sua vez, são baseados nas interações das partículas fundamentais da matéria, como os núcleos atômicos e os elétrons. Um dos aspectos centrais é a determinação da configuração eletrônica de um conjunto qualquer de átomos. Isso é importante porque a energia de um grupo de átomos depende da sua configuração eletrônica de tal forma que a tanto sua ocupação espacial como sua resposta a estímulos externos diversos estão condicionados pela distribuição dos estados energéticos dos seus elétrons. Assim, a configuração eletrônica não determina apenas as propriedades elétricas do material, mas também diversas características físicas como estrutura cristalina, temperatura de fusão, módulo de elasticidade, reatividade química, entre outros fatores.

A Teoria do Funcional de Densidade (*Density Functional Theory, DFT*) é uma das principais ferramentas utilizadas para descrever os estados de energia de grupos de átomos e, por essa razão, tem sido largamente empregada para o desenvolvimento de novos materiais, em diversos tipos de aplicações (Jain *et al.*, 2014). O alicerce conceitual dos métodos baseados em DFT é a equação de Schrödinger, que permite a determinação do estado de energia dos átomos de um sistema (especificamente, a versão não relativística e independente do tempo):

$$H\psi = E\psi \quad (1)$$

onde H é o Hamiltoniano (simplicadamente a soma das energias cinéticas e potencial das partículas consideradas), ψ é uma função de onda que pode ser expressa em termos das coordenadas espaciais dos elétrons do sistema e E é o nível-base de energia.

A equação (1) não possui soluções exatas exceto para sistemas muito simples. Por exemplo, para o átomo de hidrogênio (somente 1 elétron), a equação (1) em unidades atômicas pode ser expressa segundo (Szabo e Ostlund, 1996):

$$\left(-\frac{1}{2}\nabla^2 - \frac{1}{r}\right)\psi = E\psi \quad (2)$$

A equação (2) pode ser resolvida supondo-se *e.g.* $\psi = A\exp(-ar^2)$ sendo r o raio vetor do elétron. Contudo, para situações envolvendo vários elétrons os termos do Hamiltoniano tornam-se mais complexos, não havendo solução exata (Sholl e Steckel, 2009):

$$\left(-\frac{1}{2}\sum_{i=1}^n \nabla_i^2 + \sum_{i=1}^n V(r_i) + \sum_{i=1}^n \sum_{j<i}^n U(r_i, r_j)\right)\psi = E\psi \quad (3)$$

onde r_i são agora vetores contendo as posições dos elétrons (em número n) e V é a energia potencial dos elétrons. Como o sistema não é composto por somente 1 elétron, então um terceiro termo (o duplo somatório) deve ser incluído para representar a energia envolvida nas interações entre elétrons (U).

Por meio da solução da equação (3) é possível conhecer a distribuição espacial das partículas que resulta em uma configuração de energia mínima para o sistema. Assim, para materiais cristalinos, por exemplo, é possível determinar o tipo de estrutura cristalina mais estável para um determinado elemento químico em função do seu número atômico e quantidade de elétrons (Sholl e Steckel, 2009). Outras características podem ser avaliadas pela introdução no Hamiltoniano de novas contribuições de energia potencial devidas, por exemplo, a um campo elétrico (Szabo e Ostlund, 1996).

Diversos avanços teóricos foram realizados que possibilitaram a racionalização das formulações para a energia de grupos individuais de átomos, mas pela complexidade das equações envolvidas, devem ser buscadas soluções numéricas que exigem elevados recursos computacionais. Uma introdução à DFT com aplicações para a determinação de propriedades em função do arranjo estrutural é o trabalho de Sholl e Steckel (2009). A base teórica é abordada em maiores detalhes na obra de Szabo e Ostlund (1996). Observa-se, também, que em algumas situações a inclusão de novos termos no Hamiltoniano da equação (3) deve ser levada em consideração, conforme as necessidades de cada problema (Yu *et al.*, 2013).

É importante observar que outros métodos não baseados em DFT são empregados no contexto de design inverso, como, por exemplo, as simulações por métodos de Dinâmica Molecular ou Monte Carlo (Rapaport, 1998). Destaca-se, contudo, que as diferentes abordagens também dependem fortemente de recursos computacionais para a sua execução. Também podem ser considerados categorias de design inverso as buscas por otimização topológica de superfícies ou estruturas a partir de arranjos atômicos pré-estabelecidos (obtidos ou não por modelos baseados em DFT). Diversos métodos de otimização podem ser utilizados como, por exemplo, elementos finitos (Sigmund, 1995), diferenças finitas (Sheng *et al.*, 2011) e métodos mecânico-estatísticos (Jain *et al.*, 2014).

3. FUNCIONALIDADES CHAVE PARA MITIGAÇÃO DE SUJIDADE

3.1 Energia superficial

Conceitualmente, a energia de superfície (J/m^2 ou erg/cm^2) de um material sólido representa a quantidade de energia liberada quando ocorre a criação de uma interface no material: corresponde à energia liberada quando ocorre a separação dos átomos em um plano interno do material (observa-se que essa energia é menor do que a necessária para fraturar o material no estado sólido porque, nesse último caso, também há que se considerar o trabalho do atrito e o trabalho associado à deformação plástica envolvida). É importante notar que os átomos localizados na superfície de um material possuem comportamento diverso daqueles localizados no seu interior. Os átomos na superfície possuem número de coordenação menor e orbitais não preenchidos, de modo que podem mais facilmente combinar-se com outros elementos. Dessa forma, a energia de superfície está relacionada com o potencial de se estabelecer ligações químicas com novos agentes. Para os casos em que se deseja evitar o acúmulo de impurezas sobre uma superfície, a redução da energia superficial é primordial devido à consequente redução de forças de atração secundárias entre a superfície e as partículas de sujidade (Cuddihy, 1980). Tipicamente, materiais poliméricos possuem baixa energia superficial. Exemplos incluem o Teflon ($0,0183 \text{ J/m}^2$) cujo valor de energia superficial contrasta com o do Al, $1,12 \text{ J/m}^2$ (Popov, 2010).

3.2 Hidrofobia

O desenvolvimento de materiais com caráter hidrófobo recebeu atenção dos pesquisadores nas últimas décadas devido ao potencial para a criação de superfícies auto-limpantes e impermeáveis, interessantes para aplicação em dispositivos eletrônicos com tela sensível ao toque (evitando-se a impregnação de marcas de digitais dos usuários), pára-brisas de automóveis além de superfícies de módulos fotovoltaicos. Um material é considerado hidrofóbico quando o ângulo de molhamento (AM) formado entre a sua superfície e a água excede 90° , conforme ilustrado na Figura 2(a). Materiais com caráter hidrófobo acentuado (ou superhidrófobo) apresentam AM superior a 150° . A ação de repulsão de água em superfícies hidrófobas está conectada com baixa energia superficial. Em superfícies superhidrófobas, o efeito é ampliado pela criação de estrutura superficial hierárquica em escala micro/nano-métrica, que permite o estabelecimento de micro bolsões de ar entre a gota de água e a superfície – Figura 2(b). Como consequência, a área de contato efetiva entre a superfície e a água é reduzida e o efeito de repulsão de água é amplificado devido à menor ação de forças de van der Waals (Schaeffer *et al.*, 2015).

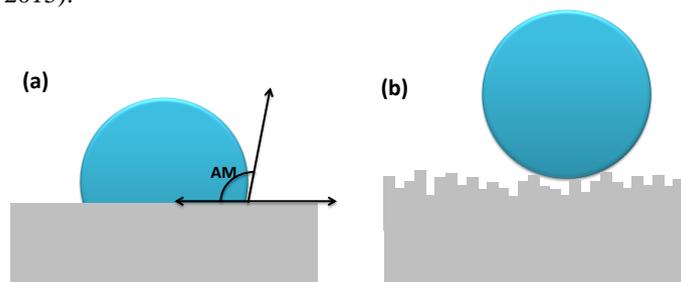


Figura 2 - Representação esquemática de uma superfície hidrófoba (a) e superhidrófoba (b) com indicação do ângulo de molhamento. As setas na figura (a) indicam a decomposição do vetor de tensão superficial. Adaptação de Schaeffer *et al.*, 2015.

Superfícies superhidrófobas podem ser produzidas artificialmente empregando-se técnicas de fabricação em duas etapas que envolvem a criação de uma superfície com o nível adequado de rugosidade superficial sobre a qual são depositados agentes químicos de baixa energia superficial (Lin *et al.*, 2013). A presença de rugosidade superficial é, contudo, prejudicial à transmissão de luz devido aos efeitos de espalhamento Mie e Rayleigh que ocorrem quando as irregularidades da superfície têm, respectivamente, dimensões da mesma ordem ou muito menores que o comprimento de onda da luz incidente (Lin *et al.*, 2013; Wang *et al.*, 2014).

A ação auto-limpante observada em superfícies superhidrófobas é ilustrada na Figura 3, elaborada a partir dos resultados obtidos por Liu *et al.*, 2012. Devido à baixa atração entre a água e a superfície externa do revestimento, existe tendência ao movimento de rolamento das gotas que aí se formam resultando na remoção de partículas de poeira depositadas. Com efeito, Kazmerski e outros (2015) recentemente avaliaram que a força necessária para destacar uma

partícula de poeira de uma superfície superhidrófoba mesmo seca é aproximadamente oito vezes menor do que uma superfície de vidro normal. No caso específico dos autores citados (Liu *et al.*, 2012), o efeito superhidrófobo foi obtido pela introdução de textura piramidal na camada mais externa de silício da célula solar (por meio de ataque químico com solução de hidróxido de potássio, KOH), a qual foi recoberta por óxido de zinco (ZnO) por meio de *magnetron sputtering*. Sobre essa camada inicial de ZnO foram desenvolvidos então nanotubos de ZnO, gerando a estrutura hierárquica de superfície observada na Figura 3. É importante observar que no trabalho de Liu *et al.* (2012), o efeito principal pretendido pela incorporação de nanotubos de ZnO sobre a superfície texturizada de Si foi o aperfeiçoamento do seu caráter anti-reflexo, tendo surgido o aspecto superhidrófobo como consequência secundária. Esse ponto é aqui enfatizado porque a superfície externa de ZnO não seria adequada para exposição ao tempo, devido à sua fragilidade.

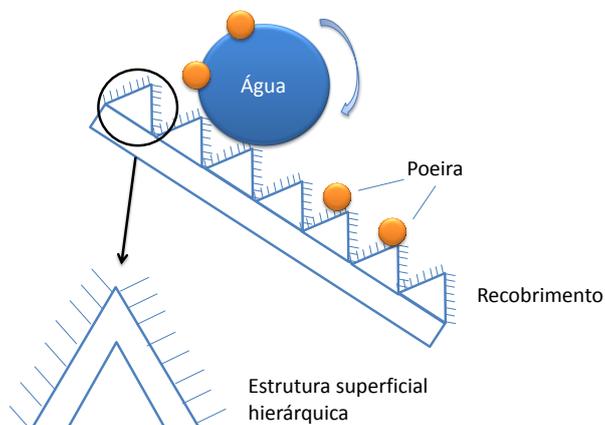


Figura 3 – Representação de estrutura superficial hierárquica e do efeito auto-limpante proporcionado por caráter superhidrófobo. Adaptação de Liu *et al.*, 2012.

A aplicação de recobrimentos com caráter superhidrófobo nas superfícies de painéis solares pode levar ao aumento da eficiência dos dispositivos ao longo do tempo. Esse efeito é ilustrado na Figura 4, em que se relaciona a variação da corrente de curto circuito (I_{SC}) com o tempo de exposição de módulos fotovoltaicos com distintos recobrimentos comerciais designados: superhidrófobo I, superhidrófobo II e superhidrófilico. Os dados são ainda comparados com o desempenho de painéis de controle, sendo um limpa diariamente (*Control module – cleaned daily*) e outro deixado sem limpar (*Control module – not cleaned*).

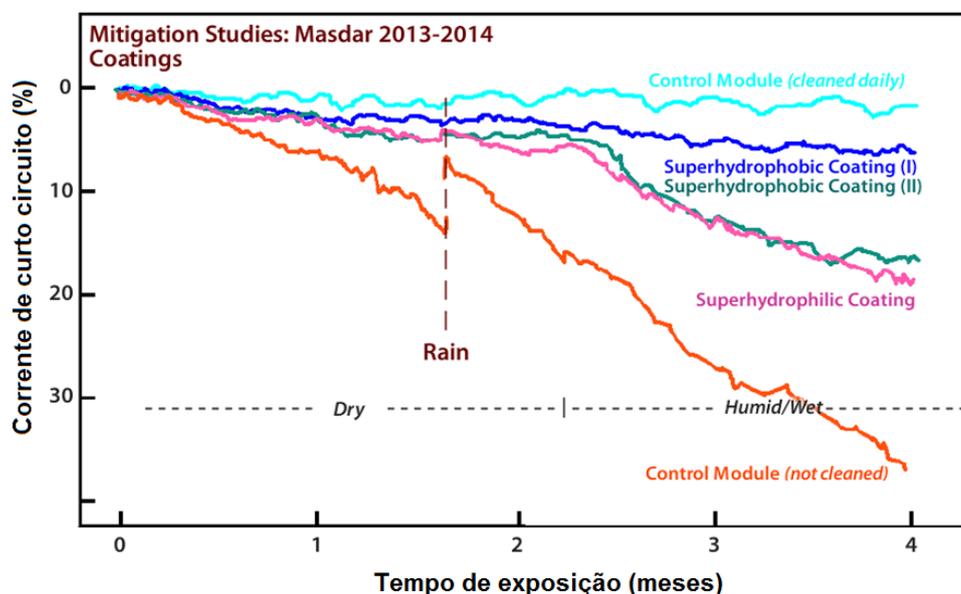


Figura 4 – Evolução da corrente de curto circuito de módulos fotovoltaicos como função do tempo de exposição para vários recobrimentos e, também, em comparação com superfícies de controle (Compilado a partir de dados provenientes de SERIUS – Solar Energy Research Institute for India and the United States coletados em Masdar entre 2013 e 2014).

Como se pode perceber, as superfícies revestidas (*Superhydrophobic I*, *Superhydrophobic II* e *Superhydrophilic*) apresentaram desempenho superior à superfície não revestida, com superioridade para um dos recobrimentos superhidrófobos (Figura 4). Contudo, percebe-se decaimento da eficiência com o tempo, que não é mitigado pela ação

da chuva sendo, portanto, devido à deterioração dos recobrimentos. De fato, pela necessidade de uma estrutura hierárquica de superfície, revestimentos superhidrófobos são particularmente sensíveis ao desgaste provocado *e.g.* pela abrasão de partículas de areia ou outros materiais particulados abrasivos em suspensão no ar. Recentemente, Schaeffer *et al.* (2015) mostrou que o desgaste superficial em filmes superhidrófobos formados por nanopartículas de sílica e aglomerante de poliuretano resulta na diminuição do AM pela remoção de sílica da superfície. A durabilidade de recobrimentos superhidrófobos é, portanto, uma questão importante devendo ser essa característica associada a outras funcionalidades que levem à minoração do desgaste superficial (Klimm, Lorenz e Weiss, 2013; Kazmerski *et al.*, 2014).

3.3 Dureza

A dureza é uma propriedade mecânica dos materiais geralmente definida em função da resistência à deformação plástica localizada que pode ser provocada pela perfuração ou abrasão da superfície. Do ponto de vista do desempenho de revestimentos e superfícies em geral, a dureza é importante pela sua relação com o desgaste sofrido pelo material que pode levar à perda de funcionalidades superficiais. De acordo com Popov (2010), tanto em mecanismos de desgaste abrasivo (que envolvem a abrasão de superfícies com durezas distintas) como adesivos (superfícies de dureza similar), o volume de material removido por desgaste é inversamente proporcional à sua dureza. A dureza superficial de recobrimentos anti-sujidade para células solares é, assim, importante para preservá-la do desgaste e manter a sua eficiência ao longo do tempo, sobretudo quando se considera que o aumento da rugosidade superficial (requisito necessário para revestimentos hidrófobos) leva ao aumento do coeficiente de atrito da superfície e, conseqüentemente, das taxas de desgaste (Popov, 2010).

Embora a composição da sujidade acumulada em células solares em função das condições geográficas do local da instalação, alguns componentes são prevalentes em várias localidades, especialmente sílica (SiO₂) e calcita (CaCO₃) (Kazmerski *et al.*, 2014). Destaca-se a elevada dureza dos grãos de areia (7 na escala Mohs, comparável à dureza *e.g.* de ferramentas de corte para usinagem, com números de dureza situados entre 600 e 700 na escala Vickers). Assim, o desgaste por abrasão da superfície exterior de células solares afigura-se como uma possibilidade real, especialmente em locais arenosos de grande incidência de vento gerando elevação de partículas do solo. Além do dano por abrasão, que em filmes superhidrófobos pode levar à perda da estrutura hierárquica na superfície, a dureza elevada dificulta a deformação da superfície, prevenindo a criação de pontos de ancoragem para a incrustação de partículas.

Uma possibilidade para o aumento da dureza de superfícies de vidro consiste na substituição dos íons da família 1 como sódio e potássio por íons da família 13 como alumínio. Segundo Cuddihy (1980), além de potencializar o caráter hidrófobo da superfície (pois os íons da família 1 possuem caráter hidrófilo), esse procedimento pode elevar a dureza superficial de modo considerável pelo aumento da quantidade de ligações cruzadas. Ainda segundo Cuddihy (1980), a mesma metodologia poderia ser utilizada para superfícies de plástico já que nos polímeros acrílicos também é possível a incorporação de íons de alumínio objetivando o aumento da dureza pela promoção de ligações cruzadas.

4. CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS

Neste trabalho buscou-se apresentar um estudo preliminar das propriedades físicas mais importantes para fins de mitigação de problemas de acúmulo de sujidade nas superfícies externas de módulos fotovoltaicos. O problema da sujidade é multifatorial e exige uma combinação complexa de propriedades que são, por vezes, contraditórias (*e.g.* superfícies hidrófobas requerem rugosidade superficial, o que intensifica taxas de desgaste). Nesse contexto, ressaltam as iniciativas de desenvolvimento de novos materiais que possam combinar mais de um tipo de funcionalidade-chave em seu comportamento. Essa busca pode ser impulsionada pelo emprego de novas técnicas de desenvolvimento de materiais que visam a determinação das estruturas fundamentais a partir das propriedades necessárias. Dessa forma, se visualiza um campo amplo para o desenvolvimento de novos materiais por meio das metodologias de *design* inverso.

Agradecimentos

Os autores agradecem a FAPEMIG e a CAPES, financiadora do projeto PVE “Estudo de Problemas Emergentes de Confiabilidade de Módulos Fotovoltaicos: Sujidade na Superfície e Acoplamento Fotônico em Materiais Solares”.

REFERÊNCIAS

- Cuddihy, E. F., 1980. Theoretical considerations of soil retention, *Solar Energy Materials*, vol. 3, pp. 21-33.
- Itthibenchapong, V., Kokenyesi, R. S., Ritenour, A. J., Zakharov, L. N., Boettcher, S. W., Wagerd, J. F., Keszler, D. A., 2013. Earth-abundant Cu-based chalcogenide semiconductors as photovoltaic absorbers, *Journal of Materials Chemistry C*, vol. 1, pp. 657-662.
- Franceschetti, A. Zunger, A., 1999. The inverse band-structure problem of finding an atomic configuration with give electronic properties, *Nature*, vol. 402, pp. 60-63.
- Jain, A., Bollinger, J. A., Truskett, T. M., 2014. Inverse Methods for Material Design, *AIChE Journal*, vol. 60, n. 8, pp. 2732-2740.
- Kazmerski, L. L., Jordan, M., A., Jnoobi, Y. A., 2014. Ashes to ashes, dust to dust: averting a potential showstopper for solar photovoltaics, 40th IEEE Photovoltaic Specialists Conference, Denver (EUA).

- Kazmerski, L., L., Diniz, A. S. A. C., Maia, C. B., Viana, M. M., Costa, S. C., Brito, P. P., Campos, C. D., Neto, L. V. M., Hanriot, S. M., Cruz, L. R. O., 2015, Fundamental studies of adhesion of dust to PV module surfaces: chemical and physical relationships at the microscale, IEEE Journal of Photovoltaics (in press).
- Klimm, E., Lorenz, T., Weiss, K. –A., 2013. Can anti-soiling coating on solar glass influence the degree of performance loss over time of PV modules drastically?, 28th European PV Solar Energy Conference and Exhibition, Paris (França).
- Lin, J., Chen, H., Fei, T., Zhang, J., 2013. Highly transparent superhydrophobic organic-inorganic nanocoating from the aggregation of silica nanoparticles, Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects, vol. 421, pp. 51-62.
- Liu, Y., Das, A., Xu, S., Lin, Z., Xu, C., Wang, Z. L., Rohatgi, A., Wong, C. P., 2012. Hybridizing ZnO Nanowires with Mycropyramid Silicon Wafers as Superhydrophobic High-Efficiency Solar Cells, Advanced Energy Materials, vol. 2, pp. 47-51.
- Mani, M., Pillai, R., 2010. Impact of dust on solar photovoltaic (PV) performance: research status, challenges and recommendations, Renewable and Sustainable Energy Reviews, vol. 14, pp. 3124-3131.
- Piquini, P., Graf, P. A., Zunger, A., 2008. Band-gap design of quarternary (In,Ga)(As,Sb) semiconductor via the inverse-band-structure approach, Physical Review Letters, vol. 100, pp. 186403-1 – 186403-4.
- Popov, V. L., 2010. Contact mechanics and friction: physical principles and applications. 1.ed. Springer: Berlin, 362p.
- Rapaport, D. C., 1998. The art of molecular dynamics simulation. 1.ed. Cambridge University Press: Cambridge, 400p.
- Sarver, T., Al-Qaraghuli, A., Kazmerski, L. L., 2013. A comprehensive review of the impact of dust on the use of solar energy: History, investigations, results, literature, and mitigation approaches, Renewable and Sustainable Energy Reviews, vol. 22, pp. 698-733.
- Schaeffer, D. A., Polizos, G., Smith, D. B., Lee, D. F., Hunter, S. R., Datskos, P. G., 2015. Optically transparent and environmentally durable superhydrophobic coating based on functionalized SiO₂ nanoparticles, Nanotechnology, vol. 26, pp. 1-8.
- Sheng, X., Johnson, S. G., Michel, J., Kimerling, L. C., 2011. Optimization-based design of surface textures for thin-film Si solar-cells, Optics Express, vol. 19, pp. A841-A850.
- Sholl, D., S. e Steckel, J. A., 2009. Density Functional Theory: A Practical Introduction. 1. ed. John Wiley & Sons: New Jersey, 238p.
- Sigmund, O., 1995. Tailoring materials with prescribed elastic properties, Mechanics of Materials, vol. 20, pp. 351-368.
- Szabo, A. e Ostlund, N. S., 1996. Modern Quantum Chemistry: Introduction to Advanced Electronic Structure Theory. 1. ed. Dover: New York, 466p.
- Yu, L., Kokenyesi, R. B., Keszler, D. A., Zunger, A., 2013. Inverse design of high absorption thin-film photovoltaic materials, Advanced Energy Materials, vol. 3, pp. 43-48.
- Wang, C., Wu, A. H. F., Lamb, R., 2014. Superhydrophobicity and optical transparency in thin films: criteria for coexistence, The Journal of Physical Chemistry C, vol. 118, pp. 5328-5335.
- Zakutayev, A., Zhang, X., Nagaraja, A., Yu, L., Lany, S. Mason, T. O., Ginley, D. S., Zunger, A., 2013. Theoretical prediction and experimental realization of new stable inorganic materials using the inverse design approach, Journal of the American Chemical Society, vol. 135, pp. 10048-10054.
- Zhang, X., Yu, L., Zakutayev, A., Zunger, A., 2012. Sorting Stable versus Unstable Hypothetical Compounds: The Case of Multi-Functional ABX Half-Heusler Filled Tetrahedral Structures, Advanced Functional Materials, vol. 22, pp. 1425-1435.

DEVELOPMENT OF NEW MATERIALS FOR SOILING MITIGATION IN PHOTOVOLTAIC SYSTEMS BY INVERSE DESIGN

Abstract. *One of the emerging problems associated with reliability of photovoltaic systems is soiling – accumulation of dirt on the external surfaces of panels that undermines light absorption and reduces efficiency of the installations. Soiling is, however, generally treated by strictly operational measures, such as manual or mechanical cleaning of the affected devices. Hence, the solutions utilized for soiling mitigation contrast with the advanced techniques currently applied in other areas focused on increasing efficiency of photovoltaic systems, such as the development of new materials with superior energy conversion properties. In this sense, some of the most interesting and promising approaches are comprised by techniques known as inverse design (or materials by design), whereby first principles calculations are employed in order to search for the fundamental atomic arrangements capable of yielding desirable functionalities for a given application. Based on this premise, in the present work a first approach is proposed regarding inverse design targeted towards anti-soiling in photovoltaic systems by identifying the key functionalities required. It is expected that future investigations shall be then able to expand the possibilities of available materials or coatings that can be used to increase performance of solar energy installations.*

Key words: *Inverse design, soiling, solar energy.*