

Multi-Scale Enhancement of Photovoltaic Performance; Nanophotonic Spectral Conversion and Intelligent Thermal Prediction

Abstract

This thesis targets two unresolved performance bottlenecks in photovoltaics: the inefficient utilization of high-energy photons in crystalline silicon solar cells, and the difficulty of accurately predicting temperature-driven performance under real operating conditions. Although crystalline silicon remains the dominant photovoltaic technology, its response to ultraviolet and blue photons is limited by shallow absorption depth, front-surface recombination, parasitic absorption, and rapid thermalization losses. At the system level, photovoltaic performance is further constrained by module temperature, which directly affects voltage, efficiency, operating stability, and long-term degradation. Within this context, the thesis investigates both photon-level and system-level routes for improvement through three connected studies: CsPbBr₃ quantum-dot luminescent down-shifting coatings for silicon photovoltaics, plasmon-assisted enhancement of quantum-dot emission, and sequence-based prediction of photovoltaic module temperature. The central novelty of the thesis lies in bridging nanoscale optical engineering with predictive thermal intelligence within one coherent framework for photovoltaic enhancement.

The first part of the thesis develops a planar luminescent down-shifting architecture based on ligand-assisted reprecipitation synthesized CsPbBr₃ quantum dots, APTES-mediated surface treatment, and PMMA film integration for crystalline silicon mini-modules. This work addresses the practical gap between the excellent optical properties of perovskite quantum dots and their stable implementation in a device-relevant coating geometry. The results show that APTES-mediated treatment improves photoluminescence behaviour and recombination characteristics, while the PMMA-integrated coating produces measurable enhancement in current density and power conversion efficiency. These findings demonstrate the feasibility of surface-engineered perovskite quantum-dot coatings as external spectral-management layers for silicon photovoltaics, while also highlighting the need for further durability studies and

more complete mechanistic separation of luminescent conversion from other front-optical effects.

The second part examines plasmon-assisted photoluminescence enhancement in CdSe/CdS core-shell quantum-dot films coupled with Au nanoparticles deposited by magnetron sputtering. The problem addressed here is the lack of a controlled and reproducible strategy for tuning plasmon-exciton coupling in hybrid quantum-dot-metal systems. The novelty of this work lies in using sputter-deposited Au nanoparticles together with a PMMA spacer layer to systematically study the relationship between nanoparticle morphology, separation distance, and emission response. The results show that spacer thickness is the critical parameter, with an intermediate separation of about 25 nm providing the most favourable balance between photoluminescence enhancement and quenching. This establishes a more controlled nanophotonic route for improving the radiative performance of colloidal quantum-dot films relevant to photovoltaic light management.

The third part develops a high-resolution thermal forecasting framework for photovoltaic modules using long short-term memory networks. This work addresses the limitations of conventional physics-based and non-sequential machine-learning models in capturing thermal inertia, temporal dependence, and nonlinear environmental interactions under outdoor conditions. The proposed LSTM model achieved strong predictive performance on real-world data, with MAE of 0.621 °C, RMSE of 0.863 °C, and R^2 of 0.998, outperforming benchmark physics-based models. Uncertainty quantification through Monte Carlo dropout and interpretability analysis using SHAP further showed that the framework is both accurate and physically meaningful. Overall, the thesis demonstrates that photovoltaic improvement can be pursued through complementary advances in spectral management, plasmonic control of quantum-dot emission, and intelligent thermal prediction, thereby contributing a multi-scale strategy for more efficient and better understood photovoltaic systems.

Keywords: Photovoltaics; crystalline silicon solar cells; spectral mismatch; luminescent down-shifting; CsPbBr₃ quantum dots; surface passivation; plasmonic enhancement; gold nanoparticles; CdSe/CdS core-shell quantum dots; photoluminescence enhancement; photovoltaic module temperature; machine learning; long short-term memory networks; uncertainty quantification; SHAP explainability; thermal prediction

Abstract in Italian

Questa tesi affronta due criticità ancora aperte nel miglioramento delle prestazioni fotovoltaiche: l'utilizzo inefficiente dei fotoni ad alta energia nelle celle solari in silicio cristallino e la difficoltà di prevedere con accuratezza gli effetti della temperatura sulle prestazioni dei moduli fotovoltaici in condizioni operative reali. Sebbene il silicio cristallino rappresenti ancora la tecnologia dominante nel settore fotovoltaico, la sua risposta ai fotoni ultravioletti e blu è limitata dalla ridotta profondità di assorbimento, dalla ricombinazione alla superficie frontale, dall'assorbimento parassita e dalle rapide perdite per termalizzazione. A livello di sistema, le prestazioni fotovoltaiche sono ulteriormente condizionate dalla temperatura del modulo, che influenza direttamente la tensione, l'efficienza, la stabilità operativa e la degradazione a lungo termine.

In questo contesto, la tesi studia strategie di miglioramento sia a livello fotonico sia a livello di sistema attraverso tre studi collegati: rivestimenti luminescenti down-shifting basati su quantum dots di CsPbBr_3 per fotovoltaico in silicio, incremento dell'emissione di quantum dots assistito da plasmoni, e previsione sequenziale della temperatura dei moduli fotovoltaici. La novità centrale della tesi consiste nel collegare l'ingegneria ottica su scala nanometrica con l'intelligenza predittiva termica all'interno di un quadro coerente per il miglioramento delle prestazioni fotovoltaiche.

La prima parte della tesi sviluppa un'architettura planare di luminescent down-shifting basata su quantum dots di CsPbBr_3 sintetizzati mediante ligand-assisted reprecipitation, trattamento superficiale mediato da APTES e integrazione in film di PMMA per mini-moduli in silicio cristallino. Questo lavoro affronta il divario pratico tra le eccellenti proprietà ottiche dei quantum dots perovskitici e la loro implementazione stabile in una geometria di rivestimento rilevante per il dispositivo. I risultati mostrano che il trattamento mediato da APTES migliora il comportamento di fotoluminescenza e le caratteristiche di ricombinazione, mentre il rivestimento integrato in PMMA produce un miglioramento misurabile della densità di corrente e dell'efficienza di conversione di potenza. Questi risultati dimostrano la fattibilità di rivestimenti esterni per la gestione spettrale basati su quantum dots perovskitici ingegnerizzati superficialmente per il fotovoltaico in silicio, evidenziando al tempo stesso la necessità di ulteriori studi di durabilità e di una separazione meccanicistica più completa tra conversione luminescente e altri effetti ottici frontali.

La seconda parte esamina l'incremento della fotoluminescenza assistito da plasmoni in film di quantum dots core-shell CdSe/CdS accoppiati con nanoparticelle d'oro depositate mediante sputtering magnetronico. Il problema affrontato riguarda la mancanza di una strategia controllata e riproducibile per regolare l'accoppiamento plasmone-eccitone in sistemi ibridi quantum dot-metallo. La novità di questo lavoro consiste nell'utilizzo di nanoparticelle d'oro depositate mediante sputtering insieme a uno strato spaziatore di PMMA per studiare sistematicamente la relazione tra morfologia delle nanoparticelle, distanza di separazione e risposta emissiva. I risultati mostrano che lo spessore dello spaziatore è il parametro critico, con una separazione intermedia di circa 25 nm che fornisce il miglior equilibrio tra incremento della fotoluminescenza e quenching. Questo studio stabilisce quindi una via nanofotonica più controllata per migliorare le prestazioni radiative di film colloidali di quantum dots, rilevanti per la gestione della luce nel fotovoltaico.

La terza parte sviluppa un framework ad alta risoluzione per la previsione termica dei moduli fotovoltaici mediante reti long short-term memory. Questo lavoro affronta i limiti dei modelli convenzionali basati sulla fisica e dei modelli di machine learning non sequenziali nel catturare inerzia termica, dipendenze temporali e interazioni ambientali non lineari in condizioni outdoor. Il modello LSTM proposto ha raggiunto elevate prestazioni predittive su dati reali, con MAE pari a 0,621 °C, RMSE pari a 0,863 °C e R^2 pari a 0,998, superando i modelli fisici di riferimento. La quantificazione dell'incertezza mediante Monte Carlo dropout e l'analisi di interpretabilità tramite SHAP hanno inoltre dimostrato che il framework è non solo accurato, ma anche fisicamente significativo.

Nel complesso, la tesi dimostra che il miglioramento del fotovoltaico può essere perseguito attraverso progressi complementari nella gestione spettrale, nel controllo plasmonico dell'emissione dei quantum dots e nella previsione termica intelligente. In questo modo, il lavoro contribuisce a una strategia multi-scala per sistemi fotovoltaici più efficienti e meglio compresi.