

جامعة ملحد خيضر بسكرة
كلية العلوم الدقيقة وعلوم الطبيعة والحياة
قسم علوم المادة



مذكرة ماستر

علوم المادة
شعبة الفيزياء
فيزياء طاقة وطاقات المتجددة
رقم: أدخل رقم تسلسل المذكرة

إعداد الطالب:
علوي قويدر
يوم: 19/06/2024

دراسة الخلايا الشمسية MoS₂/Si وفق محاكاة بواسطة برنامج Silvaco-Atlas

لجنة المناقشة:

رئيسا	جامعة محمد خيضر - بسكرة-	أ.م.أ	أعراب لويزة
مؤطرا	جامعة محمد خيضر - بسكرة-	أ.م.ب	بومعراف رامي
مناقشا	جامعة محمد خيضر - بسكرة-	أ.د	تبير مسين توفيق

شكر و عرفان

بِسْمِ اللَّهِ الرَّحْمَنِ الرَّحِيمِ

قال الله تعالى: " قل هو الذي أنشأكم وجعل لكم السمع والأبصار والأفئدة قليلا ما تشكرون "

الحمد لله الذي أعانني على إتمام عملي ووفقي إليه، ويسر لي أسباب النجاح.
أتقدم بأسمى عبارات الشكر والتقدير إلى كل من وقف إلى جانبي خلال عملي
هذا وساعدني من قريب أو من بعيد.

وإلى السيد المؤطر الذي كان خير أستاذ وخير مؤطر ولم ييخل علينا لا بجهد
ولا بوقت.

إلى كل أساتذتي

إلى كل العائلة والإخوة الكرام

إلى كل زملائي أعضاء دفعتي

إلى كل من وسعه قلبي ولم يسعه قلبي

أقول شكرا

إهداء

بِسْمِ اللَّهِ الرَّحْمَنِ الرَّحِيمِ

أهدي ثمرة عملي

...إلى أمي وأبي حفظهما الله .

...إلى زوجتي .

...إلى إبني أحمد .

الفهرس

1 مقدمة عامة

الفصل الأول

عموميات حول الخلايا الشمسية

3 تمهيد

3 1. الطاقة الشمسية والإشعاع الشمسي

3 1-1- الطاقة الشمسية

4 2-1. الشمس

5 3-1. الإشعاع الشمسي

5 1-3-1. تعريف

5 2-3-1. طيف الإشعاع الشمسي

6 4-1. الثابت الشمسي

7 5-1. كتلة الهواء Air Mass

8 6-1. تحويل الطاقة الشمسية

9 2. ثنائي الوصلة P-N

9 1-2. النواقل وأنصاف النواقل والعوازل

10 2-2. التطعيم "Doping"

10 3-2. ثنائي الوصلة p-n

11 4-2. ثنائي الوصلة عند الاستقرار

12 3- الخلايا الشمسية

12 1-3- تعريف الخلايا الشمسية

12 2-3. آلية عمل الخلايا الشمسية

- 3-3. الخصائص الكهربائية للخلية الشمسية..... 13
- 1-3-3. المنحنى المميز تيار جهد (I-V) 13
- 2-3-3. جهد الدارة المفتوحة V_{OC} 14
- 3-3-3. تيار الدارة القصيرة I_{sc} 14
- 4-3-3. الاستطاعة الأعظمية P_{max} 14
- 5-3-3. معامل الشكل FF 14
- 6-3-3. كفاءة الخلية الشمسية..... 15
- 4-3. الدارة المكافئة للخلية الكهروضوئية..... 15
- 1-4-3. محاكاة خلية شمسية بدارة تحوي ديود واحد أو صمام ثنائي..... 15
- 2-4-3. الدارة المثالية المكافئة للخلية الشمسية..... 16
- 5-3. أنواع الخلايا الشمسية..... 18
- 1-5-3. الجيل الأول الخلايا الشمسية للسيليكون المتبلور..... 18
- 2-5-3. الجيل الثاني: الخلايا الشمسية من الشرائح الرقيقة Thin Film..... 21
- 3-5-3. الجيل الثالث..... 23
- 6-3. الوحدة الشمسية PV..... 24
- 4- ايجابيات وسلبيات الخلايا الشمسية..... 25

الفصل الثاني

خلايا كبريتيد الموليبدنوم MoS_2

- تمهيد 27
- 1-تعريفات..... 27
- 1-1-المواد ثنائية البعد 2D..... 27
- 2-1-الكالوجينات..... 28
- 3-1-المعادن الإنتقالية (transition metals)..... 28

29 <u>2-كبريتيد الموليبدينيوم MoS2</u>
30 <u>2-1- البنية البلورية لكبريتيد الموليبدينيوم MoS2</u>
31 <u>2-2-بنية عصابات الطاقة</u>
33 <u>2-3-التركيز الجوهري والتطعيم</u>
35 <u>2-4-خصائص كبريتيد الموليبدينيوم</u>
35 <u>2-4-1-الخصائص الضوئية</u>
36 <u>2-4-2- الخصائص الحرارية</u>
36 <u>2-4-3- الخصائص الميكانيكية</u>
37 <u>3-طرق الترسيب</u>
38 <u>3-1-التقشير "Exfoliation"</u>
38 <u>3-1-1-التقشير الميكانيكي "Mechanical exfoliation"</u>
38 <u>3-1-2- التقشير الكيميائي Chemical Exfoliations</u>
39 <u>3-2-الترسيب بالأبخرة الكيميائية (CVD) Chemical vapor deposition</u>
40 <u>3-3-الترسيب بالأبخرة الكيميائية المعدنية العضوية (MOCVD)</u>
41 <u>3-4-الترسيب بالليزر النبضي (PLD)</u>
42 <u>3-5-المقارنة بين طرق ترسيب MoS2 المتبعة</u>
43 <u>4-تطبيقات شرائح كبريتيد الموليبدينيوم</u>
43 <u>4-1-تحسين الخلايا الشمسية</u>
44 <u>4-2-الإلكترونيات الدقيقة</u>
44 <u>4-3- MoS2 كمحفز ضوئي</u>
46 <u>4-4- MoS2 للكشف عن الغازات</u>

الفصل الثالث

المحاكاة وفق برنامج Silvaco-Atlas

48	1-نظرة عامة حول برنامج Silvaco-TCAD
49	1-1-وحدات برنامج Silvaco-TCAD
52	1-1-2-منطق البرمجة
52	2-خطوات المحاكاة
52	2-1-تحديد البنية
56	2-2- تحديد المواد والنماذج الفيزيائية
57	2-3- الطرق الرقمية للحل
58	2-4-تخصيص الحلول وعرض النتائج
58	3-النتائج والمناقشة
58	3-1-خواص المواد المدروسة
59	3-2-دراسة تأثير شدة التطعيم على خواص الخلية
59	3-2-1- المنطقة p
62	3-2-2- المنطقة n
63	3-3- تأثير السُمك على خواص الخلية
63	3-3-1- تأثير سُمك المنطقة p
66	3-3-2- تأثير سُمك المنطقة n
71	خاتمة
72	قائمة المراجع

قائمة الأشكال والجداول

قائمة الأشكال

الصفحة	العنوان	الرقم
4	أنواع الإشعاع الشمسي	(1-1)
5	أبعاد الشمس والأرض والمسافة بينهما	(2-1)
6	توزيع الإشعاع الشمسي	(3-1)
7	منحنى الثابت الشمسي خلال السنة	(4-1)
8	طول المسار في الغلاف الجوي D للإشعاع الشمسي عند زاوية السم θ_z	(5-1)
8	مخطط استخدامات الطاقة الشمسية	(6-1)
9	نطاق الطاقى الممنوع E_g لكل نوع	(7-1)
10	تشكل الوصلة الثنائية p-n	(8-1)
10	الوصلة الثنائية p-n	(9-1)
11	الوصلة p-n عند الاستقرار	(10-1)
11	منطقة الشحنة الفراغية في الوصلة	(11-1)
12	فكرة عمل الخلية الشمسية	(12-1)
13	المنحنى المميز تيار - جهد للخلية الشمسية في الظلام والضوء	(13-1)
13	منحنى المميز للخصائص الكهربائية تيار- جهد والإستطاعة الكهربائية	(14-1)
15	الدارة المكافئة للخلية الشمسية	(15-1)
16	الدارة المثالية المكافئة للخلية الشمسية	(16-1)
17	أثر المقاومة التسلسلية R_s على المنحنى المميز تيار- جهد لخلية شمسية	(17-1)
17	أثر المقاومة التفرعية R_{sh} على المنحنى المميز تيار- جهد لخلية شمسية	(18-1)
18	مخطط أجيال الخلايا الشمسية	(19-1)
19	بنية السليكون أحادية التبلور ومتعددة التبلور وغير المتبلورة	(20-1)
19	صورة خلية شمسية من السليكون أحادي التبلور	(21-1)
20	صورة خلية شمسية لسليكون متعدد التبلور	(22-1)
20	تصميم الخلية ذات التخميل الأمامي والسطح الخلفي المنتشر محلليا PERL	(23-1)
22	بنية الخلية للسليكون غير المتبلور (a-Si (amorphous silicon	(24-1)
22	بنية خلية CdTe	(25-1)
23	بنية خلية CIGS	(26-1)
23	مجموعة من الخلايا الشمسية بتقنية الصبغات العضوية	(27-1)
24	لوح الخلايا الكهروضوئية المركزة (CPV)	(28-1)

25	بنية وحدة شمسية PV	(29-1)
29	كبريتيد الموليبدنيوم في شكله الخام	(1-2)
30	مخطط تطور عدد الدراسات المنشورة حول MoS_2 خلال السنوات 2000-2024 حسب قاعدة بيانات موقع Science Direct	(2-2)
30	الأطوار الثلاثة للبنية البلورية ل MoS_2	(3-2)
32	بنية العصابات الطاقة ل MoS_2 في سمك مختلف (a) أحادي الطبقة (b) ثنائي الطبقة (c) شريحة سميكة	(4-2)
33	تأثير عدد الطبقات على النطاق الممنوع ل MoS_2	(5-2)
35	منحنى معامل الإمتصاص بدلالة الطول الموجي	(6-2)
36	(a) منحنى نسبة الإمتصاص بدلالة الطول الموجي، (b) بنية الكاشف MoS_2 فابري-بير	(7-2)
37	مخطط طرق ترسيب MoS_2 المعتمدة والعائلة المنتمة إليها	(8-2)
38	(a) الإحمام الكهروكيميائي (b) الإحمام الكيميائي	(9-2)
39	(a) مقطع طولي للغرف الثلاثة في تقنية (CVD) ، (b) مخطط لنظام التسخين المتبع لترسيب MoS_2 ، (c) رسم توضيحي لطريقة نمو طبقة MoS_2 على مسند من الياقوت	(10-2)
40	معادلة التحويل التي تصف ترسيب طبقة أحادية ل MoS_2 وفق تقنية MOCVD	(11-2)
41	رسم توضيحي لتقنية الترسيب بالليزر النبضي (PLD)	(12-2)
43	خلية شمسية n- MoS_2 /p-Si	(13-2)
44	تصميم لصمام ثنائي البوابة DGFET	(14-2)
45	عملية التحليل الكهروضو كيميائي للماء PEC	(15-2)
45	آلية عمل تطهير الماء بواسطة كبريتيد الموليبدنيوم والتفاعلات الحادثة للحصول على الأكسجين التفاعلي O_2^-	(16-2)
46	تغيرات المقاومة ومراحل ضخ غاز NO_2	(17-2)
48	رسم توضيحي للعلاقة بين وحدات برنامج SILVACO	(1-3)
49	صورة لنافذة الوحدة DECKBUILD	(2-3)
50	رسم توضيحي لمداخلات ومخرجات برنامج أطلس	(3-3)
51	بنية البرامج التي يستخدمها أطلس خلال المحاكاة	(4-3)
53	شبكة البنية المحددة للخلية n- MoS_2 /p-Si	(5-3)
54	شكل البنية بعد تحديد المناطق	(6-3)

55	شكل البنية بعد تحديد الإلكترونيات	(7-3)
56	توزيع التطعيم في البنية	(8-3)
60	الخاصية (I-V) للخلية بدلالة تغير شدة التطعيم في المنطقة p	(9-3)
60	وسائط الخروج للخلية بدلالة تغير شدة التطعيم في المنطقة p	(10-3)
62	الخاصية (I-V) بدلالة تغير شدة التطعيم في المنطقة n	(11-3)
63	تأثير تغير تطعيم المنطقة n على وسائط خروج الخلية	(12-3)
64	الخاصية (I-V) للخلية بدلالة تغير سمك المنطقة p	(13-3)
65	تأثير تغيير سمك المنطقة p على وسائط خروج الخلية	(14-3)
67	تأثير سمك المنطقة n على الخاصية (I-V) للخلية	(15-3)
68	تأثير سمك المنطقة n على وسائط خروج الخلية.	(16-3)
69	تغير معامل الإنطفاء K بدلالة الطول الموجي لشرائح MoS_2 أحادية، ثنائية، ثلاثية الطبقة والسميكة حسب بيانات المرجع	(17-3)

قائمة الجداول

الرقم	العنوان	الصفحة
(1-2)	المواد ثنائية البعد المصنعة حتى اليوم وتصنيفها	27
(2-2)	العناصر الإنتقالية	28
(3-2)	ثوابت الشبكة لكل طور	31
(4-2)	تأثير تغير البنية البلورية لكبريتيد الموليبيدينوم على النطاق الممنوع	33
(5-2)	أهم الطرق المتبعة لتطعيم كبريتيد الموليبيدينوم أحادي الطبقة	34
(6-2)	المقارنة بين طرق ترسيب MoS_2 المعتمدة	42
(1-3)	الترتيب المنطقي لمجموعة الأوامر الأساسية في برنامج أطلس	52
(2-3)	خواص المواد المدروسة	59
(3-3)	خواص MoS_2 حسب عدد الطبقات	66

ملخص

برز كبريتيد الموليبدنيوم MoS_2 كواحد من أهم كالكوجينات المعادن الإنتقالية TMDC لما يتميز به من إمكانية التحكم في نطاق الطاقة (مباشر أو غير مباشر) وفاصل طاقي قابل للضبط (1.2-2.4 eV) إضافة إلى معامل إمتصاص جيد في المجال المرئي وخواص ميكانيكية وحرارية مميزة .

يهدف هذا العمل إلى دراسة خصائص الخلايا الشمسية $n\text{-MoS}_2/p\text{-Si}$ بإستخدام برنامج المحاكاة Silvaco-Atlas حيث قمنا بمحاكاة تأثير التطعيم على المنطقة p ثم n في الخلية حيث كان تغيير شدة التطعيم في المجال $[5*10^{12}-5*10^{18}\text{cm}^{-3}]$ و $[10^{17}-1.6*10^{19}\text{cm}^{-3}]$ على الترتيب، وتحصلنا في النتائج على التطعيم الأحسن لكل منطقة من أجل الحصول على أعلى مردود ممكن وهو 7.41775% بينما قمنا في الجزء الثاني من المحاكاة بدراسة تأثير السُمك في المنطقتين p و n وذلك بتغيير السُمك في المجال $[20-100\mu\text{m}]$ و $[0.00065-0.065\mu\text{m}]$ على الترتيب وتحصلنا في النتائج على السُمك الأحسن لكل منطقة من أجل الحصول على أعلى مردود وهو 7.41875% .

الكلمات المفتاحية: المحاكاة، Silvaco -Atlas، خلية شمسية، كبريتيد الموليبدنيوم MoS_2 ، المواد الثنائية البعد 2D، كالكوجينات المعادن الإنتقالية TMDC، المردود، التطعيم .

Abstract

Molybdenum sulfide, MoS_2 , has emerged as one of the most important transition metal chalcogens (TMDC), due to its ability to control the energy range (directly or indirectly) and an adjustable Gap (12-2.4 eV), in addition to a good absorption coefficient in the visible field and distinctive mechanical and thermal properties.

This work aims to study the properties of $n\text{-MoS}_2/p\text{-Si}$ solar cells using the Silvaco-Atlas simulation program, where we simulated the effect of doping on the region p and then n in the cell, where the change in doping intensity was in the range $[5*10^{12}-5*10^{18}\text{cm}^{-3}]$. and $[10^{17}-1.6*10^{19}\text{cm}^{-3}]$, respectively. In the results, we obtained the best grafting for each region in order to obtain the highest possible PCE, which is 7.41775%, while in the second part of the simulation we studied the effect of the thickness in the p and n regions by changing the thickness. In the range $[20-100\mu\text{m}]$ and $[0.00065-0.065\mu\text{m}]$, respectively, we obtained the best thickness for each area in order to obtain the highest PCE, which is 7.41875%.

Keywords: simulation, Silvaco-Atlas, solar cell, molybdenum sulfide MoS₂, 2D materials, transition metal chalcogens TMDC, yield, doping

Résumé

Le sulfure de molybdène, MoS₂, est devenu l'un des chalcogènes de métaux de transition (TMDC) les plus importants, en raison de sa capacité à contrôler la plage d'énergie (directement ou indirectement) et un Gap réglable (1,2-2,4 eV), en plus d'un bon coefficient d'absorption dans le champ visible et propriétés mécaniques et thermiques distinctives.

Ce travail vise à étudier les propriétés des cellules solaires n-MoS₂/p-Si à l'aide du programme de simulation Silvaco-Atlas, où nous avons simulé l'effet du dopage sur la région p puis n dans la cellule, où le changement d'intensité du dopage était dans la plage [$5 \cdot 10^{12}$ - $5 \cdot 10^{18}$ cm⁻³] et [10^{17} - $1,6 \cdot 10^{19}$ cm⁻³], respectivement. Dans les résultats, nous avons obtenu le meilleur greffage pour chaque région afin d'obtenir le rendement le plus élevé possible, ce qui est de 7,41775 %, tandis que dans la deuxième partie de la simulation, nous avons étudié l'effet de l'épaisseur dans les régions p et n en modifiant l'épaisseur dans la plage [20-100µm] et [0,00065-0,065µm], respectivement, nous avons obtenu la meilleure épaisseur pour chaque zone afin d'obtenir le rendement le plus élevé, qui est de 7,41875 %.

Mots- clés: simulation, Silvaco-Atlas, cellule solaire, sulfure de molybdène MoS₂, matériaux 2D, chalcogènes de métaux de transition TMDC, rendement, dopage

مقدمة

مقدمة عامة

إن الإستهلاك العالمي للطاقة في تزايد مستمر بسبب النمو السكاني والتطور التكنولوجي ، هذا الإستهلاك يعتمد في الأساس على الوقود الأحفوري (غاز ، ببتروول ...) ولا يخفى على أحد النواتج السلبية لهذا النوع من الطاقة حيث تتزايد الإنبعاثات الملوثة ماسبب أزمة مناخ تتجلى أثارها الكارثية يوما بعد يوم ، وماتشدهه الجزائر من حرائق ودرجات حرارة قياسية خير دليل على ذلك.

يسعى الباحثون إلى تطوير بدائل للوقود الأحفوري ، وأهم إهتماماتهم هي الطاقة الشمسية لما تتميز به من وفرة وديمومة وخلو تقنياتها من الإنبعاثات الملوثة ،وقد كان السليكون أهم المواد النصف ناقلة إهتماما وبحثا لعقود عديدة ، واليوم يقترب مردود المركبات الضوئية المعتمدة على السليكون من حده النظري ، لذا وجب البحث عن بدائل أكثر مردود .

برز كبريتيد الموليبدينيوم MoS_2 كأهم مركبات كالكوجينات المعادن الإنتقالية TMDC - بعد الثورة الهائلة التي أحدثها فصل أول شريحة ثنائية البعد من الغرافين سنة 2004 - لما يتميز به من القدرة على التحكم في الفاصل الطاقى والنطاق الممنوع القابل للضبط ومعامل الإمتصاص الجيد في المجال المرئي .

في هذا الصدد يأتي هذا البحث لدراسة الخلايا الشمسية $n-MoS_2/p-Si$ والتعرف على خواصها من أجل تحسين مردوها بشكل أفضل ، وقد قسمنا بحثنا إلى ثلاث فصول هي :

الفصل الأول : يحتوي هذا الفصل على عموميات حول الخلايا الشمسية.

الفصل الثاني : يتطرق هذا الفصل إلى خلايا كبريتيد الموليبدينيوم من حيث الخواص وطرق الترسيب والتطبيقات .

الفصل الثالث: أنجزنا هذا الفصل على قسمين ،الأول يُعرف برنامج Silvaco-Atlas ويبرز أهم مكوناته ، أما في القسم الثاني فقد عرضنا نتائج المحاكاة وقمنا بمناقشتها وإستخلاص نتائج المناقشة .

الفصل الأول

عموميات حول الخلايا الشمسية

تمهيد:

تعتبر الطاقة الشمسية أهم أنواع الطاقات المتجددة لما تعده من أفاق مستقبلية وذلك بسبب الوفرة والمجانية والديمومة ، كما أنها صديقة للبيئة ولا تسبب إنبعاثات .

إن إستعمال الإنسان للطاقة الشمسية قديم جدا لكن هذا الإستعمال كان محدود في تجفيف الأطعمة والملابس وتدفئة المنازل في الشتاء ، وتذكر كتب التاريخ أن اليونانيين القدمى قاموا حوالي 700 ق.م بإشعال النار بواسطة أشعة الشمس وعدسة مكبرة ماجعل العالم اليوناني الشهير أرخميدس (212-214 ق.م) يستعمل مرآيا كبيرة لإشعال سفن العدو بإستخدام أشعة الشمس [1].

أما في العصر الحديث فقد قام المخترع السويسري هوراس بنديكت دي سوسور سنة 1767م بإختراع أول فرن شمسي، وصل هذا الفرن الشمسي إلى درجة حرارة داخلية تبلغ $110C^{\circ}$ ، وفي مطلع القرن التاسع عشر إكتشف الفرنسي إدموند بيكريل سنة 1839م التأثير الكهروضوئي بعد أن اكتشف أن بعض المواد ستتغير في جهدها الكهربائي عندما تتعرض للضوء، لتتولى البحوث حول الإستغلال الكهرو - ضوئي للطاقة الشمسية التي أثمرت أول خلية شمسية سنة 1954م بكفاءة 1% قادرة على تشغيل بعض الأجهزة الكهربائية الصغيرة (ألعاب أطفال) في أمريكا من قبل الثلاثي كالفن فولر وجيرالد بيرسون وداريل تشابين في مختبرات بيل ، ثم سنة 1958م تستخدم أول خلية شمسية في الفضاء على الأقمار الصناعية ، ثم كثفت البحوث من أجل زيادة كفاءة الخلية الشمسية وتقليل كلفتها من أجل إستعمالها على نطاق واسع تجاريا ولاتزال هذه الأبحاث جارية لليوم وتحظى بإهتمام الباحثين والمطورين والشركات العالمية بسبب التكلفة الباهضة للطاقات التقليدية الأحفورية بيئيا وإقتصاديا وتذبذب الإنتاج وعدم ديمومته [2].

1. الطاقة الشمسية و الإشعاع الشمسي:

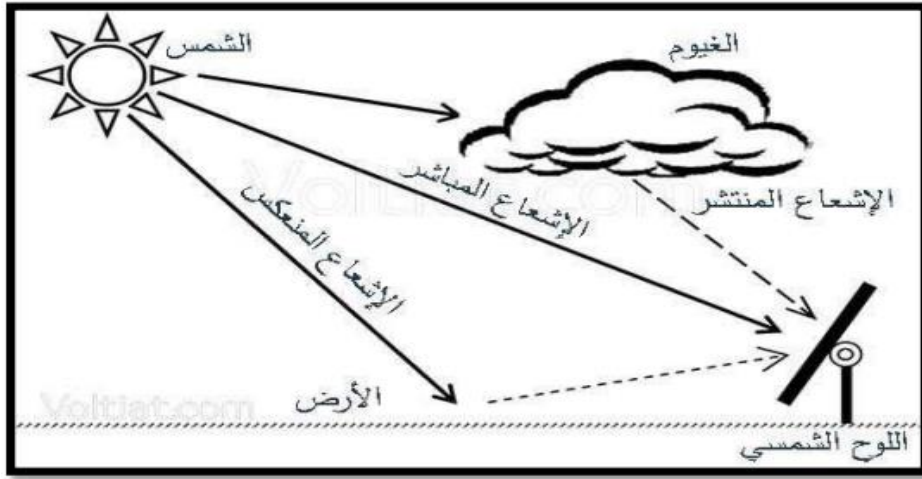
1-1. الطاقة الشمسية :

الطاقة الشمسية هي طاقة يتم الحصول عليها من ضوء الشمس تأتي على شكل إشعاع متدفق. يخترق هذا الإشعاع الغلاف الجوي الأرضي وينعكس جزء منه في الفضاء خارج الغلاف الجوي، كما يتشتت جزء داخله، أما الجزء المتبقي فينفذ عبر الغلاف وبالتالي فإن الإشعاع الشمسي الواصل إلى سطح الأرض يكون على ثلاث أنواع: [1]

✓ الإشعاع المباشر (S): هو الإشعاع الذي يعبر الغلاف الجوي دون إنعكاس ولا تشتت، أي عبارة عن حزمة ضوئية مباشرة من الشمس وتبقى على حالها دون ضياع.

✓ الإشعاع المنتشر (D): هو الإشعاع الذي يتعرض إلى تشتت بواسطة مكونات الغلاف الجوي.

✓ الإشعاع الكلي (G): هو الإشعاع الواصل إلى نقطة من سطح الأرض الناتج من مجموع الأشعة المباشر والمنتشر والمنعكس $G=S+D+R$.



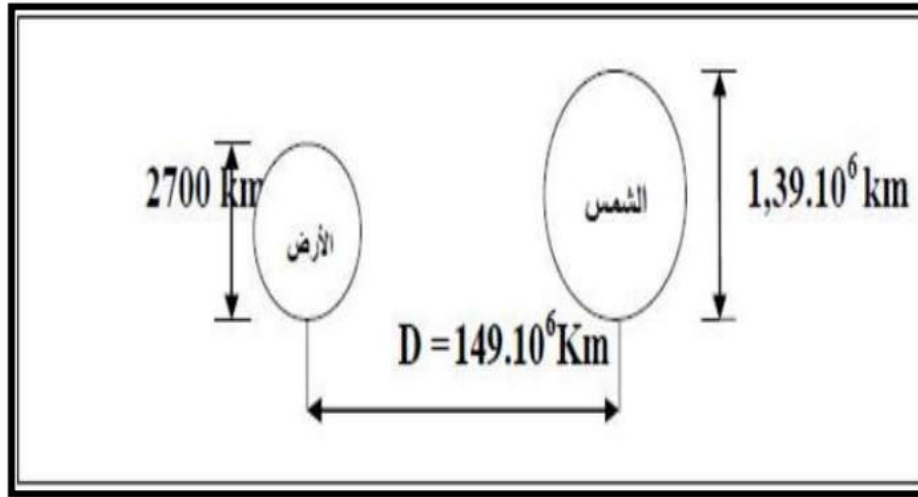
الشكل (1-1) يوضح أنواع الإشعاع الشمسي. [3]

2-1. الشمس:

الشمس هي أقرب نجم إلينا وهي عبارة جسم كروي ذاتي الجاذبية يتكون بشكل أساسي من الهيدروجين يقع في مركز النظام الشمسي، على مسافة متوسطة حوالي 1.5×10^{11} m من الأرض.

في النواة الداخلية للشمس، تخلق قوة الجاذبية ضغطاً يولد اندماجاً نووياً يحول الهيدروجين إلى هيليوم وفي هذه العملية يتم تحويل جزء من الكتلة إلى كمية وفيرة من الإشعاع الكهرومغناطيسي، الذي يجعل الشمس المصدر الدائم للطاقة الإشعاعية في النظام الشمسي. للشمس بنية فيزيائية معقدة وتتكون من عدة مناطق، من النواة الداخلية الكثيفة إلى طبقة الغلاف الجوي الخارجي إلى الهالة. كل من الهالة والقلب ساخنان للغاية، في حدود $10^6 - 10^7$ كلفن، بينما تكون المناطق المتوسطة التي تنقل الطاقة وتبعثها كإشعاع صادر أكثر برودة (على الرغم من كونها ساخنة بالمعايير الأرضية).

يتم نقل الطاقة من تفاعلات الاندماج داخل الشمس من خلال توالي عمليات الحمل الحراري والإشعاع والامتصاص والانبعاث وإعادة الإشعاع إلى ما يعادل سطح الشمس، وهو الغلاف الضوئي أو الفوتوسفير، الذي يمتص ويشع طيفاً مستمراً من الإشعاع. الغلاف الضوئي هو مصدر معظم الإشعاع المرئي الذي يصل إلى الأرض. له درجة حرارة سطحية أو بشكل أكثر دقة، درجة حرارة جسم أسود فعالة تبلغ 5777 كلفن، وهي درجة حرارة الجسم الأسود الذي يشع نفس القدر من الطاقة مثل الشمس. (على الرغم من أنها تتكون من عدة طبقات امتصاص وانبعاث ولها تدرج كبير في درجة الحرارة عبر نصف قطرها، تشبه الشمس إلى حد كبير الجسم الأسود المثالي [1].



الشكل (1-2) أبعاد الشمس والأرض والمسافة بينهما [3]

3-1. الإشعاع الشمسي:**1-3-1. تعريف:**

ترسل الشمس أشعتها وهي موجات كهرو ميغناطيسية مستعرضة ذات أطوال موجية (λ) تتكون من جسيمات هي الفوتونات التي تصل إلى الأرض بسرعة الضوء، لكل فوتون كمية من الطاقة تتناسب عكسيا مع الطول الموجي وحسب نظرية بلانك كما توضحه المعادلة (1-1). [1]

$$[1] \quad E = h\nu = h \frac{c}{\lambda} \quad (1-1)$$

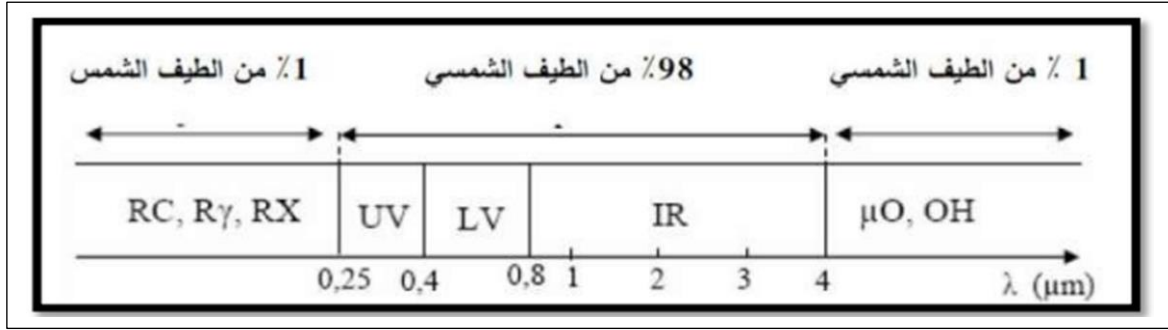
حيث:

- ν : تردد الموجة (Hz)
- λ : طول الموجة (m)
- C: سرعة الضوء في الفراغ (1.10^8 m/s)
- h: ثابت بلانك (6.62×10^{-34} j*s)

1-3-2. طيف الإشعاع الشمسي:

الإشعاع الشمسي هو أمواج كهرو مغناطيسية، تنتزع طاقتها على عدة أطوال موجية وتكون 98% منها ضمن أطوال الموجات $\lambda \in [0.25\mu\text{m}-4\mu\text{m}]$ ، 1% تحت هذا، و 1% فوقه، وكل فوتون يمتلك طاقة تعطى وفق العلاقة التالية: [3]

$$E_{\text{photon}}(ev) = \frac{1.24}{\lambda(\mu\text{m})} \quad (2-1)$$



الشكل (3-1) توزيع الإشعاع الشمسي [3]

ويمكن شرح الشكل (3-1) على النحو التالي :

- ✓ $\lambda \in [0.25\mu\text{m}-0.4\mu\text{m}]$ مجال فوق البنفسجي (UV) يمثل 7% من الطاقة الكلية المنبعثة من الشمس، تمتلك الفوتونات في هذا المجال طاقة كبيرة تتراوح بين $E \in [4.96\text{eV}-3.10\text{eV}]$.
- ✓ $\lambda \in [0.4\mu\text{m}-0.8\mu\text{m}]$ المجال المرئي (LV) يمثل 47% من الطاقة الكلية المنبعثة من الشمس. تمتلك الفوتونات في المجال طاقة أقل تتراوح بين $E \in [1.55\text{eV}-3.10\text{eV}]$.
- ✓ $\lambda \in [0.8\mu\text{m}-4\mu\text{m}]$ المجال تحت الأحمر (IR) يمثل 45.5% من الطاقة الكلية المنبعثة من الشمس. تتناقص طاقة الفوتونات في هذال المجال فتكون بين $E \in [1.55\text{eV}-0.31\text{eV}]$.
- ✓ RX الأشعة السينية $R\gamma$ الأشعة غاما RC الأشعة الكونية. μO أشعة لماميكروويف OH أشعة الراديو. [3]

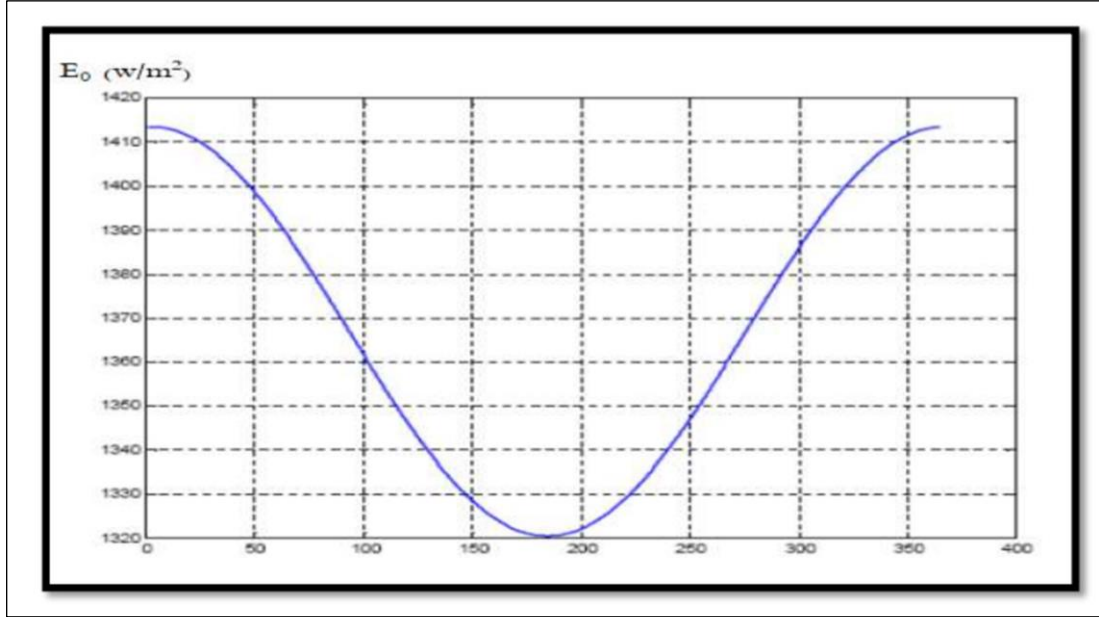
4-1. الثابت الشمسي:

هي كمية التدفق الإجمالي للطاقة الكهرومغناطيسية الآتية من الشمس عموديا على السطح المستوي خارج الغلاف الجوي الأرضي في وحدة الزمن ووحدة المساحة، ونتيجة الحساب والقياس فإن قيمة هذا الثابت الشمسي تقدر بـ $I_0 = 1367 \text{ W/m}^2$ خارج الغلاف الجوي بالإرتياب عن قيمة الثابت الشمسي I_0 ($\pm 3.30\%$) حسب اقتراب أو ابتعاد الشمس عن الأرض -بسبب المدار الإهليجي للأرض حول الشمس- وذلك حسب اليوم من السنة وتعطى علاقة التصحيح للثابت الشمسي خلال أيام السنة بالعلاقة التالية: [1]

$$I = I_0 \left[1 + 0.033 \cos \left(\frac{360}{360} N_j \right) \right] \quad (3-1)$$

حيث N_j يمثل رقم اليوم من السنة الشمسية ($N_j = 1, 2, \dots, 365$)

والشكل (4-1) عبارة على الرسم البياني لدالة الثابت الشمسي، حيث نلاحظ أن شدة الإشعاع الشمسي تكون أعظمية عند الأيام 1 و 364 في الشتاء.



الشكل (4-1) منحنى الثابت الشمسي خلال السنة [3]

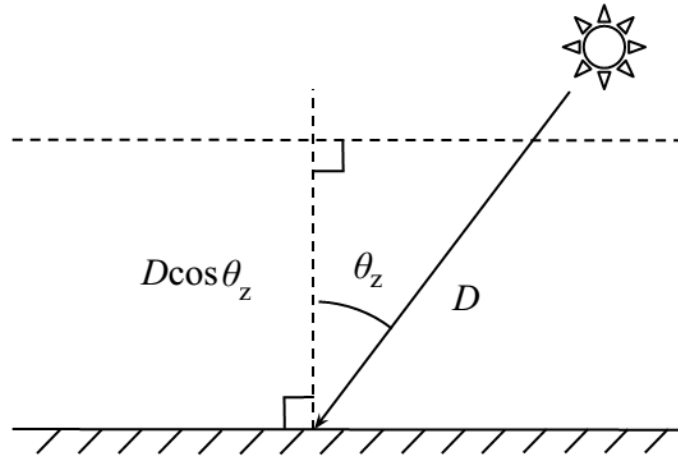
5-1. كتلة الهواء Air Mass:

تعرف الكتلة الهوائية بأنها النسبة بين كتلة الهواء الجوي الذي يعبر خلاله الشعاع من الموضع الحالي للشمس في السماء، إلى الكتلة التي يعبر خلالها إذا كانت الشمس في أوجها (مباشرة فوق الرأس). كلما زاد طول المسار، زاد عدد الجزيئات التي يتفاعل معها الشعاع. يتغير ذلك على مدار العام وعلى مدار اليوم. يحدث المسار الأطول في أواخر النهار، حيث تكون الشمس قريبة من الأفق، ويمكن حساب كتلة الهواء بالعلاقة التالية :

$$m = \frac{1}{\cos \theta_z} \quad (4-1)$$

حيث:

- θ_z زاوية الذروة (السمت) *zenith angle* أي الزاوية من الاتجاه الرأسي إلى الشمس.
- بسبب تغير العوامل الجوية مع الوقت، من المفيد وجود طيف قياسي للإشعاع الشمسي على سطح الأرض لتطوير واختبار الأجهزة الشمسية. الطيف القياسي المقبول هو الطيف عند $m = 1.5$ وهو المقابل لزاوية ذروة 48.2° كما هو موضح في الشكل (5-1) [1].



الشكل (5-1) : طول المسار في الغلاف الجوي D للإشعاع الشمسي عند زاوية السم θ_z . [1]

1-6-6- تحويل الطاقة الشمسية:

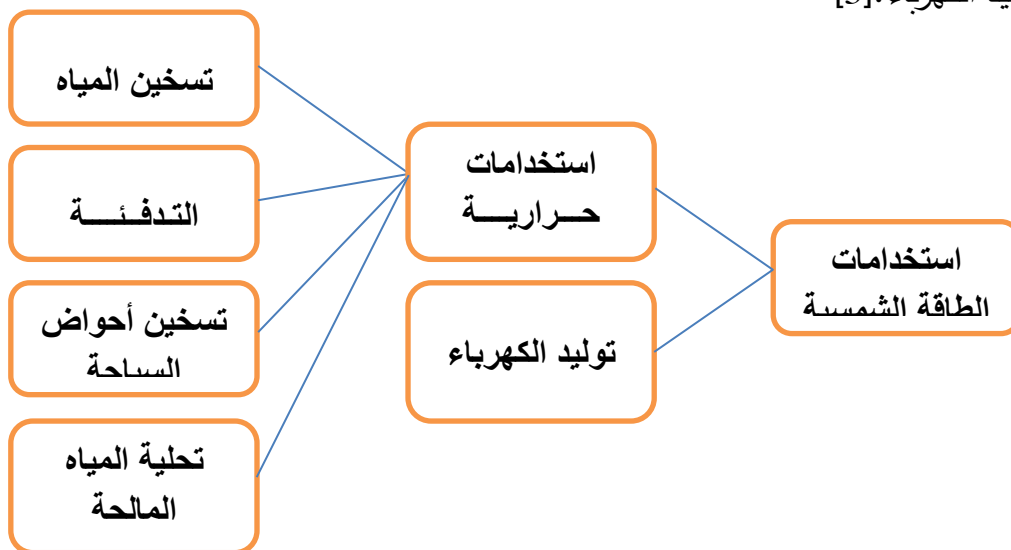
يمكن تحويل الطاقة الشمسية إلى نوعين من الطاقة وهما:

1-6-1- طاقة كهربائية:

نتحصل على هذه الطاقة من خلال آلية التحويل الكهروضوئي والتي يقصد بها تحويل الإشعاع الشمسي مباشرة إلى طاقة كهربائية بواسطة الخلايا الشمسية.

1-6-2- طاقة حرارية:

يتم الحصول عليها بواسطة آلية التحويل الحراري والذي يعتمد على تحويل الإشعاع الشمسي إلى طاقة حرارية عن طريق المجمعات الشمسية، فإذا تعرض جسم داكن اللون ومعزول إلى الإشعاع الشمسي فإنه يمتص الإشعاع وترتفع درجة حرارته ويستفاد من هذه الحرارة في التدفئة والتبريد وتسخين المياه وتوليد الكهرباء. [3]



الشكل (6-1) مخطط يوضح استخدامات الطاقة الشمسية [3]

2. الوصلة الثنائية P-N:

2-1. النواقل وأنصاف النواقل والعوازل:

يمكن تصنيف المواد الصلبة المتواجدة في الطبيعة انطلاقاً من قابليتها للنقل الكهربائي إلى ثلاث مجموعات والتي تتمثل في:

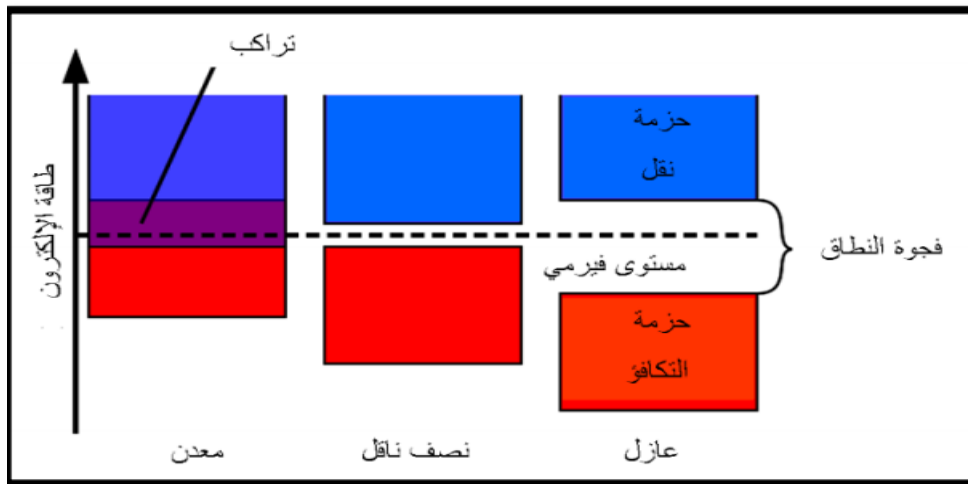
مواد ناقلة، ومواد عازلة، ومواد نصف ناقلة

بالاعتماد على أساس تركيب مستويات الطاقة للمادة وكذا على مقدار طاقة النطاق الممنوع (E_g) والتي تفصل بين عصابة النقل (BC) وعصابة التكافؤ (BV) وبالإضافة إلى الخواص الإلكترونية فيزيائية تم تصنيف هذه المواد.

في المواد العازلة وعند درجة 0 كلفن تكون حزمة النقل فارغة تماماً من الإلكترونات بينما حزمة التكافؤ تكون ممتلئة، وحتى عند رفع درجة حرارتها تبقى هذه الخاصية في العوازل، وذلك لأن الطاقة الحرارية غير كافية لنقل إلكترون من عصابة التكافؤ إلى عصابة النقل وجعله حراً، وهذا راجع إلى كبر الفاصل الطاقي (E_g)، فناقلية العوازل ضعيفة جداً.

أما النواقل فتتميز بتراكب عصابة النقل و عصابة التكافؤ فوق بعضها البعض، لذا فليس هناك فاصل طاقي و عصابة النقل تكون مشغولة جزئياً حتى عند درجات الحرارة المنخفضة، مما يؤدي إلى ناقلية كهربائية عالية جداً

أما في ما يخص أنصاف النواقل فلها ناقلية تقع بين هاتين المجموعتين بالإضافة إلى أن الفاصل الطاقي (E_g) لديها صغير بالمقارنة مع العوازل حيث يمكن للإثارة الحرارية أو الضوئية أن تجعل الإلكترونات تنتقل من عصابة النقل (BC) إلى عصابة التكافؤ (BV). [3].



الشكل (1-7) يوضح نطاق الطاقي الممنوع E_g لكل نوع. [3].

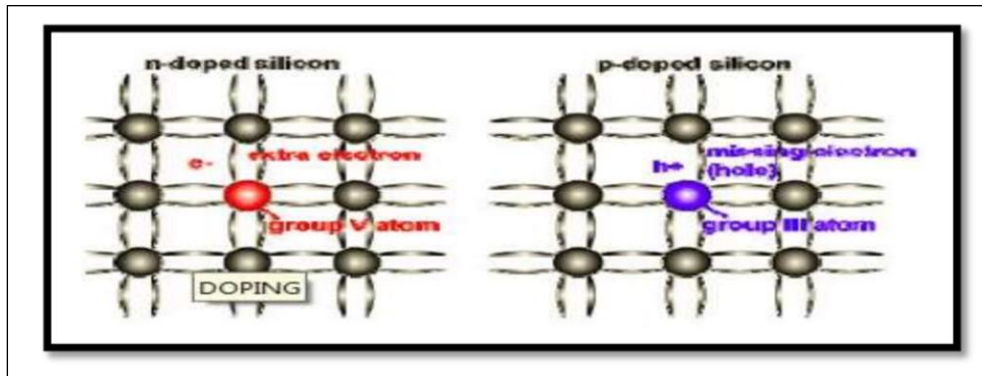
2-2. التطعيم "Doping":

نظرا لكون ناقلية أنصاف النواقل النقية (أشباه الموصلات) تعتبر صغيرة جدا إذا ما قورنت مع ناقلية المعادن، فإن بعض الشوائب تضاف إلى أشباه الموصلات النقية وذلك للرفع من ناقليتها، ويطلق على عملية إضافة الشوائب هذه بعملية التطعيم (Doping).

تصنف أشباه الموصلات المطعمة من حيث المواد المطعمة بها إلى أشباه موصلات من النوع السالب (n-Type) وأشباه الموصلات من النوع الموجب (p-Type).

من أجل الحصول على النوع (p) في الخلية الكهرو شمسية تدخل ذرات البور (B) والموجودة في العمود الثالث التي تمتلك ثلاث إلكترونات تكافؤية، فترتبط هذه الذرات مع ذرات السليكون ويتشكل ثقب إيجابي الشحنة، تشكل ذرات السليكون مع شوائب البور ناقلا إيجابيا أو وصلة من نوع (P).

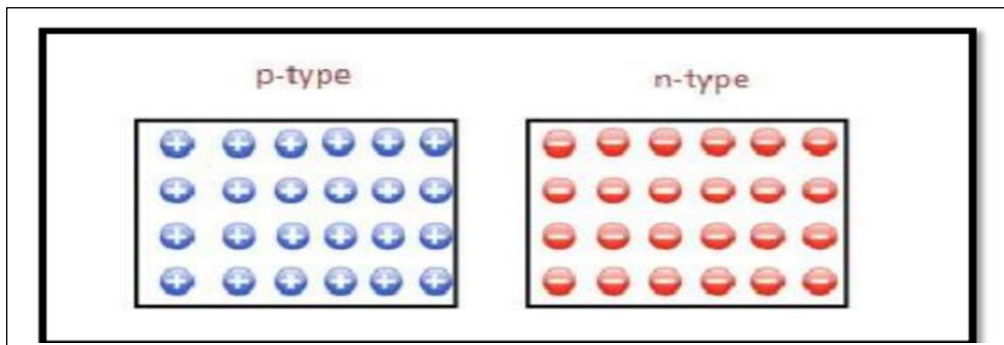
لتوليد الشحنة السالبة في الخلية الكهرو شمسية تدخل ذرات الفوسفور (P) التي تمتلك خمس إلكترونات تكافؤية في تركيب السليكون الصافي، فترتبط هذه الذرات مع ذرات السليكون ويتشكل إلكترون سلبى الشحنة، وتشكل ذرات السليكون مع شوائب الفوسفور ناقلا سلبى أو وصلة من نوع (n). [4]



الشكل (8-1) تشكل الوصلة (n-p) [3]

3-2. الوصلة الثنائية p-n:

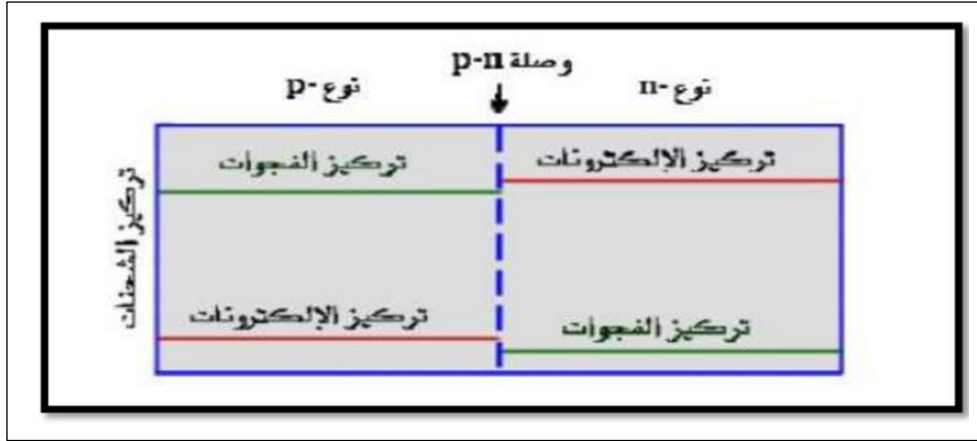
تتكون الوصلة الثنائية (p-n) من بلورتين متلاصقتين من أشباه الموصلات أحدهما من نوع (n-type) الغني بالإلكترونات الحرة لوجود شائبة خماسية والجزء الثاني من النوع (p-Type) الغني بالفجوات لوجود شائبة ثلاثية. عند توصيل الجزئين مع بعض عند منطقة التلامس تنتقل شحنات سالبة من (n-type) وتلتحم مع الثقوب الموجودة في الجزء (p-type). [4]



الشكل (9-1) ثنائي الوصلة p-n [4]

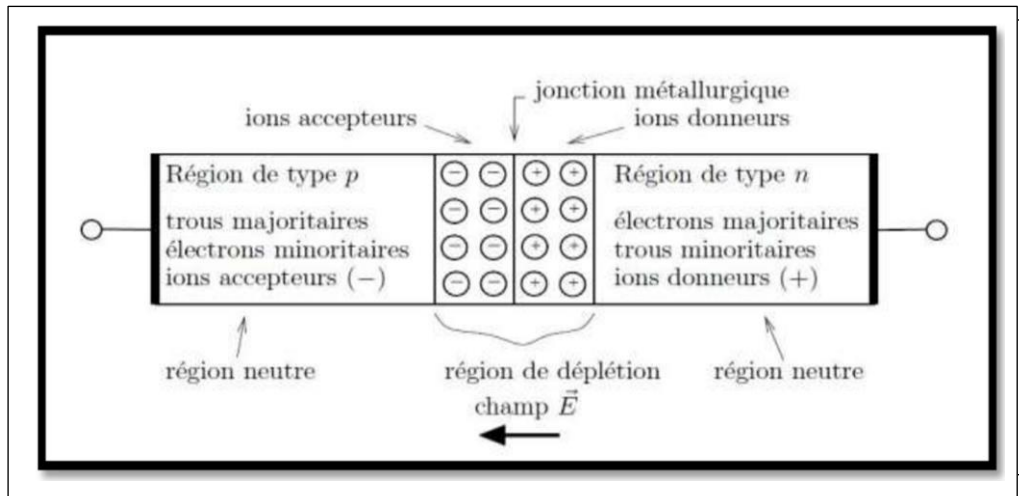
4-2. الوصلة الثنائية p-n عند الاستقرار:

عند تشكيل ثنائي الوصلة p-n يكون تركيز كل من الإلكترونات الفجوات على جانبي الوصلة كما في الشكل (10-1) ونتيجة هذا الاختلاف في التركيز على جانبي الوصلة فإن الشحنات سوف تنتشر من الوسط الأكثر تركيزاً إلى الوسط الأقل تركيزاً. حيث تنتشر الإلكترونات من المنطقة n إلى المنطقة p، كما تنتشر الفجوات من المنطقة p إلى المنطقة n. [4]



الشكل (10-1) ثنائي الوصلة عند الاستقرار [4]

ونتيجة لعملية الانتشار والاتحاد هذه ، نجد أن المنطقة القريبة من الوصلة أصبحت لا تحتوي على إلكترونات أو الفجوات حرة، كما أن الشحنة في هذه المنطقة أصبحت غير متعادلة لأن الإلكترون الذي يعبر إلى المنطقة p يترك ذرته على شكل أيون موجب كما أن الفجوة التي تعبر من المنطقة p إلى المنطقة n تبقى ذرتها على شكل أيون سالب. وهكذا تتكون شحنة فراغية على جانبي الوصلة ويطلق على هذه المنطقة شحنة الفضاء (space-charge) التي تكونت فيها الشحنة الفراغية منطقة الاستنزاف أو منطقة الانتقال (transition region) الشكل (11-1) يبين منطقة الانتقال: [4]



الشكل (11-1) منطقة الشحنة الفراغية في الوصلة N-P. [4]

3- الخلايا الشمسية

3-1- تعريف الخلايا الشمسية:

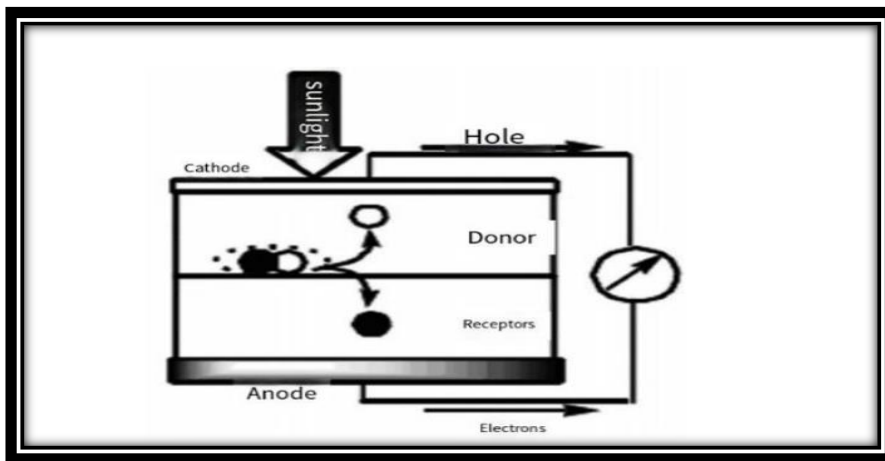
تعرف بالخلايا الضوئية أو الكهروضوئية (الفولتوضوئية). إن أصل مصطلح (photovoltaic) من اليونانية (phōs) ويعني الضوء ومن إسم فولتا وهو فيزيائي إيطالي، وبذا أصبح المصطلح (photovoltaic) باللغة الإنجليزية منذ عام 1849 ويعني الضوء. [2]

الخلية الشمسية هي جهاز يحول طاقة ضوء الشمس مباشرة إلى كهرباء عن طريق التأثير الكهروضوئي. بتحرير إلكترونات عند تسليط حزمة من إشعاع (فوتونات تمتلك طاقة كافية). [5].

3-2. آلية عمل الخلايا الشمسية:

عند تعرض الخلية للضوء إذا كانت طاقة الفوتون كافية فإنها تعمل على تحفيز الإلكترونات في الخلية الشمسية مما يولد جهدا كافيا لدفع هذه الإلكترونات في دوائر الحمل، أي أن عند سقوط ضوء الشمس على الخلية يمر هذا الضوء من خلال سطح الخلية ويمتص منه جزء بواسطة الطبقة الأولى للخلية وهي طبقة السليكون والمحتوية على الفوسفور (أي النوع n) أما غالبية الضوء الساقط على هذه الخلية فيقوم بامتصاصه الجزء الخاص بذلك أي طبقة السليكون المحتوية على البور (أي النوع p).

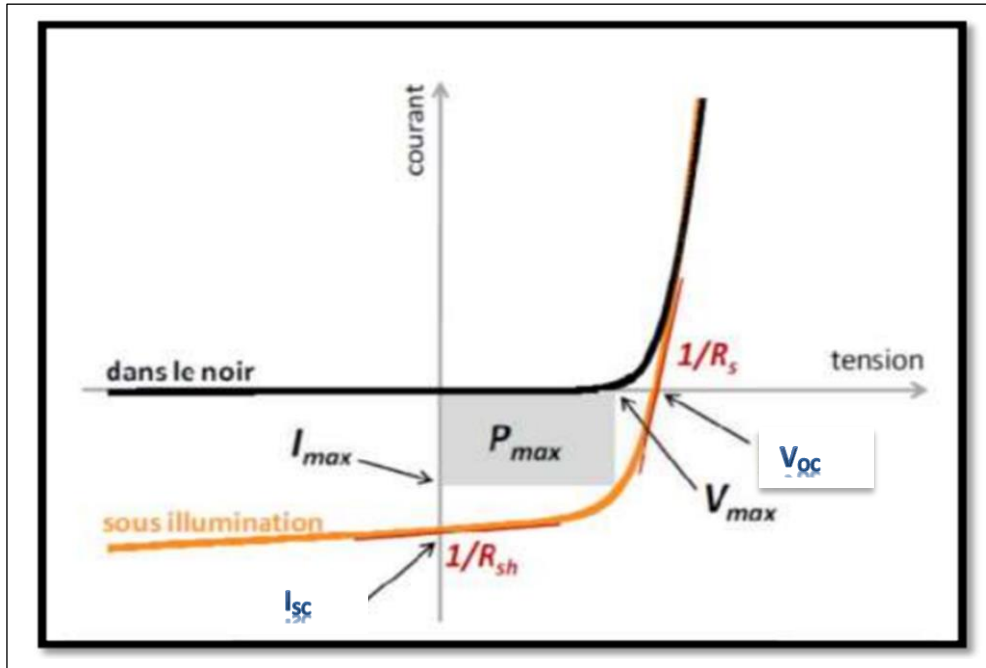
خلال هذه العملية تتحرر الإلكترونات حيث يمكنها السريان (حركة) خلال الموصل المتصل في أطراف الخلية بتشكيل تيار كهربائي مستمر، وعند توصيل حمل كهربائي بين طرفي الخلية الشمسية يتم الاستفادة من حركة الإلكترونات الناتجة من سقوط ضوء الشمس على الخلية، ويوضح الشكل (1-12) فكرة عمل الخلية الشمسية (الفوتوفولطية). [3].



الشكل (1-12) فكرة عمل الخلية الشمسية. [6]

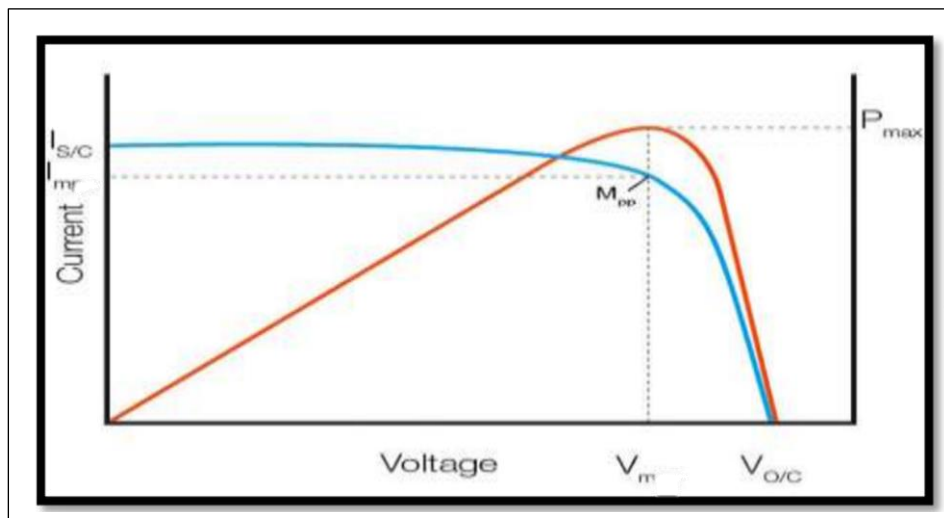
3-3. الخصائص الكهربائية للخلاية الشمسية:

1-3-3. المنحنى المميز تيار جهد (IV)



الشكل (13-1) المنحنى المميز تيار - جهد للخلاية الشمسية في الظلام والضوء. [3]

- يمثل المنحنى الأزرق في الشكل (14-1) المجموعات المحتملة من التيار والجهد الخارجة من الخلية الشمسية، حيث أنه في لحظة تنتج الخلية الشمسية قيمة محددة من التيار والجهد تقع على منحنى التيار - جهد.
- يمثل المنحنى الأحمر في الشكل (14-1) منحنى الاستطاعة للخلاية الشمسية، حيث يوضح هذا المنحنى الاستطاعة المنتجة عند أي نقطة تشغيل على المنحنى تيار - جهد، وهي ببساطة حاصل ضرب الفولطية والتيار في هذه النقطة [3].



الشكل (14-1) منحنى المميز للخصائص الكهربائية تيار- جهد والإستطاعة الكهربائية. [3]

2-3-3. جهد الدارة المفتوحة Voc:

هو الحد الأقصى للجهد الذي تبلغه الخلية وهو الجهد المقاس عند طرفي الخلية الشمسية عندما لا يمر في الدارة أي تيار وتكون المقاومة كبيرة بشكل لا نهائي، وتكون الاستطاعة المنتجة صفراً لأن قيمة التيار في هذه الحالة صفر [3].

$$[3] \quad V_{OC} = V_{th} \cdot \ln\left(\frac{I_{ph}}{I_s} + 1\right) \quad (11-1)$$

$$V_{th} = \frac{n \cdot k \cdot T_c}{q}$$

V_{th} : الجهد الترموديناميكي

K : ثابت بولتزمان ويساوي 1.38×10^{-23} جول/كلفن.

n: معامل المثالية ويساوي 1 أو 2 .

T_c : درجة حرارة الخلية بكالفن (K)

3-3-3- تيار الدارة القصيرة I_{sc}

وهو أقصى تيار تنتجه الخلية يتم قياسه عندما لا يكون هناك مقاومة في الدارة ، أي يتم الحصول عليه عند قصر الدارة، وتكون الاستطاعة المنتجة معدومة لأن قيمة الجهد في هذه الحالة صفر [3].

$$[3] \quad I_{sc} = \frac{I_{ph}}{1 + \frac{R_s}{R_{sh}}} \quad (12-1)$$

3-3-4- الاستطاعة الأعظمية P_{max}

تعرف الاستطاعة الأعظمية (القدرة الكهربائية) بأنها الناتج الأعلى من حاصل الضرب بين الجهد (V) والتيار (I) عند نقطة التشغيل تعطى بالعلاقة التالية: [3]

$$P_{max} = I_m \times V_m \quad (13-1)$$

بالنسبة لخلية شمسية مثالية فإن الاستطاعة تعطى بالعلاقة التالية: [3]

$$P_{ideale} = I_{sc} \times V_{oc} \quad (14-1)$$

3-3-5- معامل الشكل FF:

هو معامل يعبر عن جودة الخلية الشمسية وهو النسبة بين الاستطاعة القصوى والمنتجة ويعطى بالعلاقة التالية: [3]

$$FF = \frac{P_{max}}{P_{ideale}} = \frac{I_m \times V_m}{I_{sc} \times V_{co}} \quad (15-1)$$

3-3-6- كفاءة الخلية الشمسية:

تعرف على أنها النسبة بين الاستطاعة القصوى التي تنتجها الخلية وقوة الإشعاع الشمسي الذي يصل إلى الخلية، ويتم قياس هذه الكفاءة في الشروط النظامية التالية:

$$H=1000(w/m^2) \quad \checkmark \text{ شدة الإشعاع الشمسي}$$

$$T= 25^\circ C \quad \checkmark \text{ حرارة الخلية}$$

$$A_m=1.5 \text{ kg} \quad \checkmark \text{ كتلة الهواء}$$

وبالتالي فإن مردود الطاقة يكتب بالعلاقة التالية: [3]

$$\eta = \frac{P_{max}}{P_{in}} \quad (16-1)$$

$$P_{max} = FF \times I_{sc} \times V_{oc} \quad P_{in} = H_{ins} \times S$$

تصبح العلاقة: [3]

$$\eta = \frac{FF \times I_{sc} \times V_{oc}}{H_{ins} \times S} \quad (17-1)$$

حيث أن: S هو سطح الخلية ب (m²).

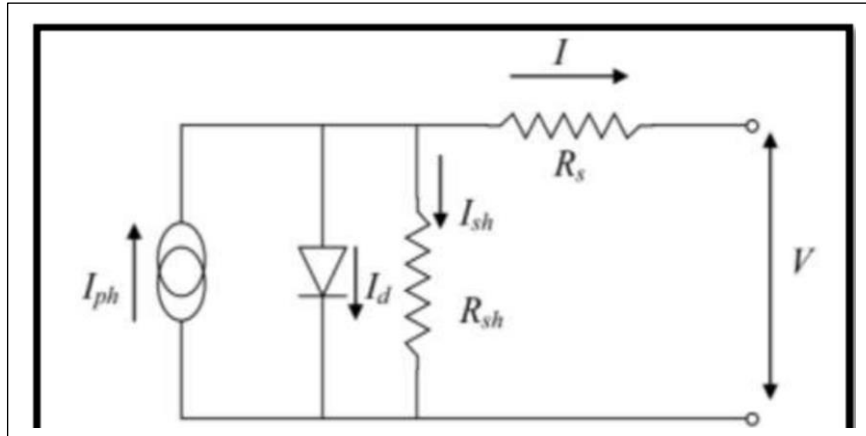
H_{ins} شدة الإشعاع (w/m²)

P_{in}: الاستطاعة الواردة (w).

3-4- الدارة المكافئة للخلية الكهروضوئية:

3-4-1- محاكاة خلية شمسية بدارة تحوي ديود واحد أو صمام ثنائي:

إن عمل الخلية الشمسية يوافق ويكافئ دارة كهربائية بديود واحد كما يبين الشكل (15-1) تواجه حاملات الشحنة في مواد الخلية الشمسية وفي الأسلاك الناقلة مقاومة كهربائية تمثل بالمقاومة التسلسلية وتمثل العيوب الموجودة في المواد المكونة للخلية الشمسية بالمقاومة التفرعية. عمليا يكون لهاتين المقاومتين قيمة معينة تتعلق بالمواد المستعملة وبطريقة التصنيع. [3]



الشكل (15-1) الدارة المكافئة للخلية الشمسية. [3]

نعتبر عن التيار المار داخل الخلية بالعلاقة التالية: [3]

$$I = I_{PH} - I_d - I_{sh} \quad (18-1)$$

حيث:

$$[3] \quad I = I_{ph} - I_s \left[\exp \left(\left(\frac{q(V+I.R_s)}{nkT} \right) - 1 \right) - \frac{V+I.R_s}{R_{sh}} \right] \quad (19-1)$$

R_{SH} : مقاومة تفرعية تفسر التيار الضائع داخل الخلية بسبب العيوب.

R_S : مقاومة المواد وأسلاك التوصيل التسلسلية

I_{ph} : التيار الضوئي

I : التيار المار في المقاومة التسلسلية

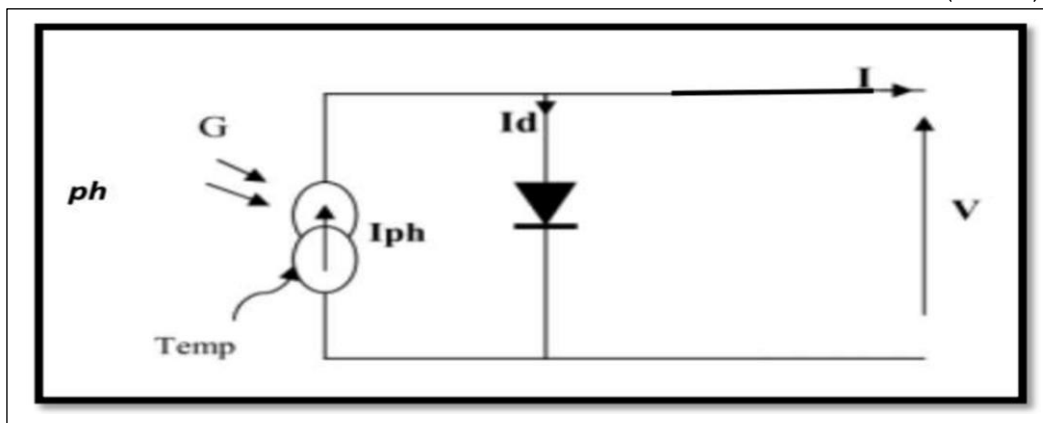
I_d : التيار المار في الديود

I_{sh} : التيار المار في المقاومة التفرعية.

3-4-2- الدارة المثالية المكافئة للخلية الشمسية:

تتكون الدارة المثالية المكافئة للخلية الشمسية من ديود واحد بإهمال المقاومتين كما هو موضح في

الشكل (16-1). [3]

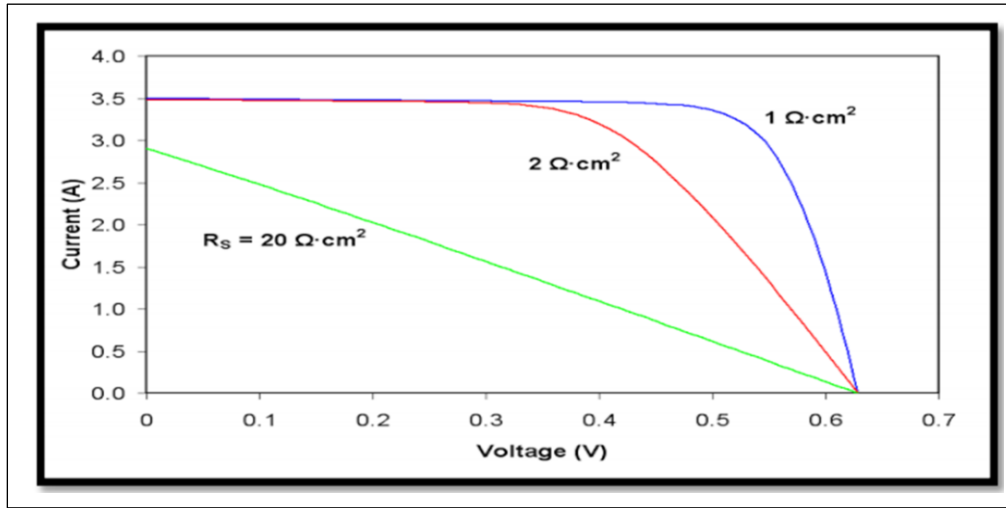


الشكل (16-1) الدارة المثالية المكافئة للخلية الشمسية

حيث نعبر عن تيار الإستقطاب المباشر للخلية بالعلاقة التالية: [2]

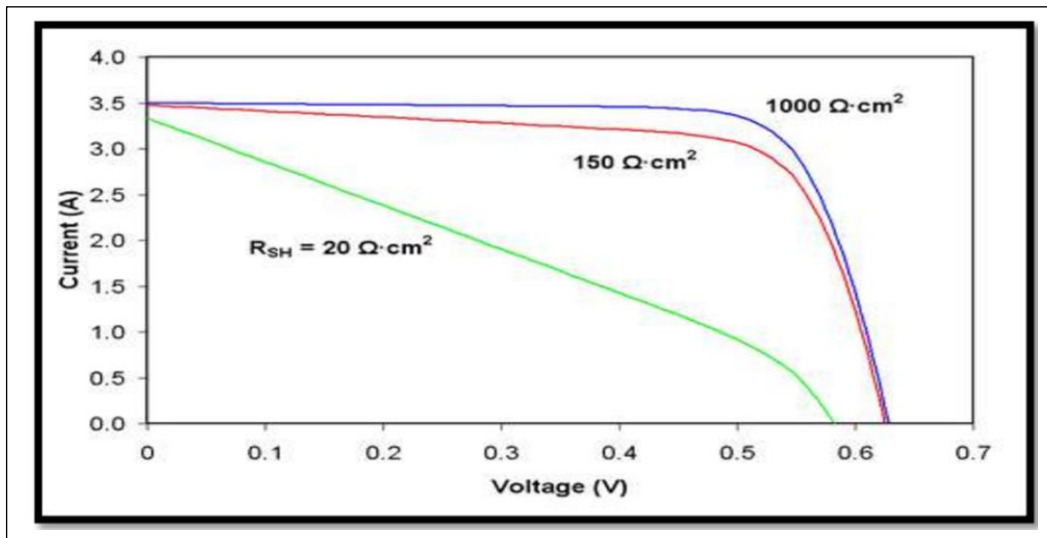
$$I = I_{ph} - I_d \quad (20-1)$$

يوضح الشكل (17-1) أثر المقاومة التسلسلية على المنحنى المميز للخلية الشمسية. نلاحظ أن المقاومة RS ليس لها تأثير على كمون الدارة المفتوحة V_{oc} ، لكنها تقلل من تيار الدارة القصيرة I_{sc} . [3]



الشكل (17-1) أثر المقاومة التسلسلية RS على المنحنى المميز تيار- جهد لخلية شمسية. [3]

ويوضح الشكل (18-1) أثر المقاومة التفرعية على المنحنى المميز للخلية الشمسية حيث نلاحظ أن المقاومة التفرعية R_{sh} لها تأثير تناسبي على كل من تيار الدارة القصيرة I_{sc} و كمون الدارة المفتوحة V_{oc} . [3]

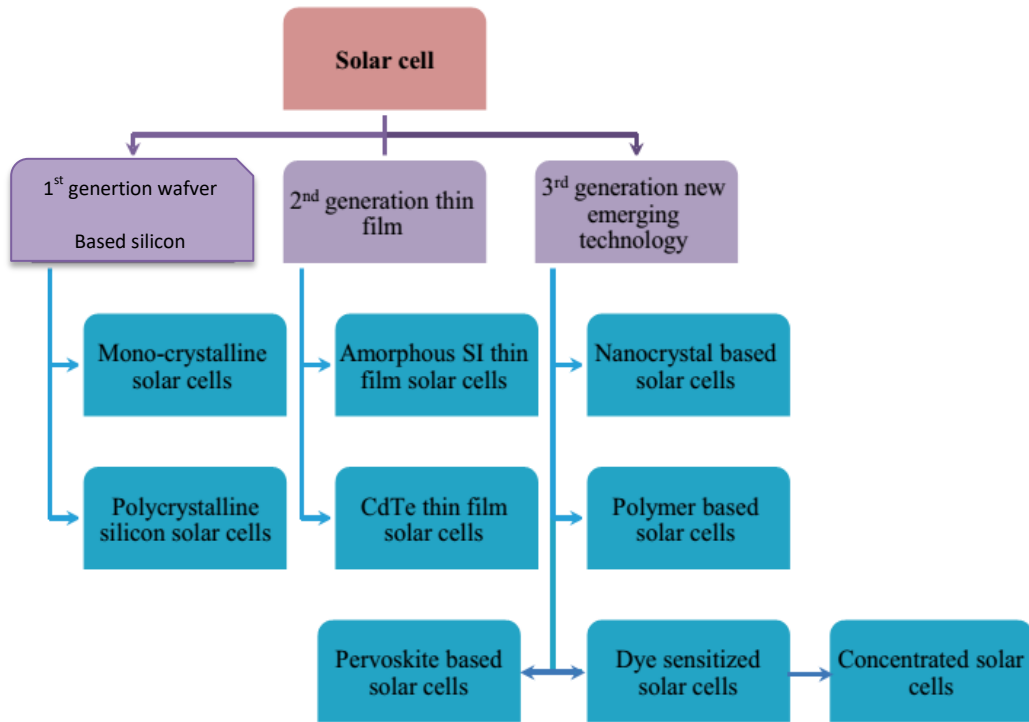


الشكل (18-1) أثر المقاومة التفرعية R_{sh} على المنحنى المميز تيار- جهد لخلية شمسية. [3]

3-5- أنواع الخلايا الشمسية:

تم تصنيع خلايا شمسية من مواد مختلفة إلا أن مادة السيليكون تترجع على عرش هذه المواد بسبب أن توفر عنصر السيليكون في الطبيعة علاوة على أن العلماء والباحثين تمكنوا من دراسة هذا العنصر دراسة مستفيضة وتعرفوا على خواصه المختلفة وملاءمته لصناعة الخلايا الشمسية المتبلورة والغير متبلورة بينما أغلب المواد الأخرى نادرة الوجود بالطبيعة أو لها خواص سامة ملوثة للبيئة أو معقدة التصنيع وباهضة التكاليف وبعضها لا يزال تحت الدراسة والبحث وعليه فقد تركز الإهتمام على تصنيع الخلايا الشمسية السليكونية.[3]

يمكن تقسيم أنواع الخلايا الشمسية حسب التطور الزمني إلى ثلاث أجيال ، كما هو موضح في المخطط أدناه :

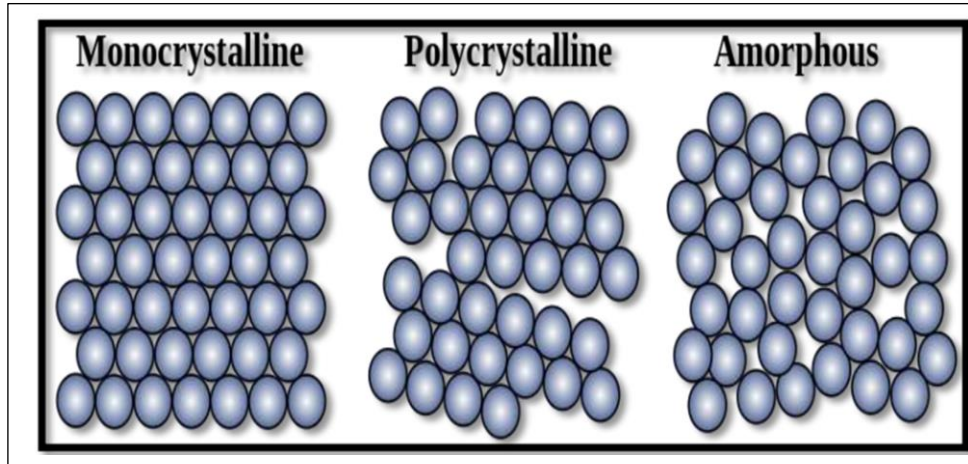


الشكل (1-19) مخطط أجيال الخلايا الشمسية [7]

3-5-1- الجيل الأول الخلايا الشمسية للسيليكون المتبلور:

تسمى أيضا الخلايا السميكة، وهي أقدم الأنواع وأكثرها هيمنة على السوق العالمية بنسبة تتجاوز 80% ، وذلك راجع إلى مردودها الجيد مقارنة مع الأنواع الأخرى ، وكذلك مايميز به السيليكون من إستقرار كيميائي و نطاق ممنوع مثالي كما أنه غير سام و صديق للبيئة.[8]

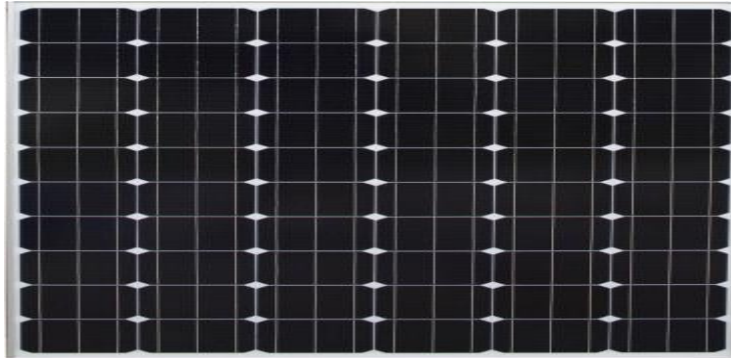
هناك نوعين من السليكون المتبلور بالاعتماد على درجة النقاوة واتجاه التبلور وهما أحادي التبلور mono crystalline و متعدد التبلور polycrystalline :



الشكل (1-20) بنية السليكون أحادية التبلور ومتعددة التبلور وغير المتبلورة. [3]

3-5-1-1- الخلايا الشمسية للسليكون أحادي التبلور Monocrystalline:

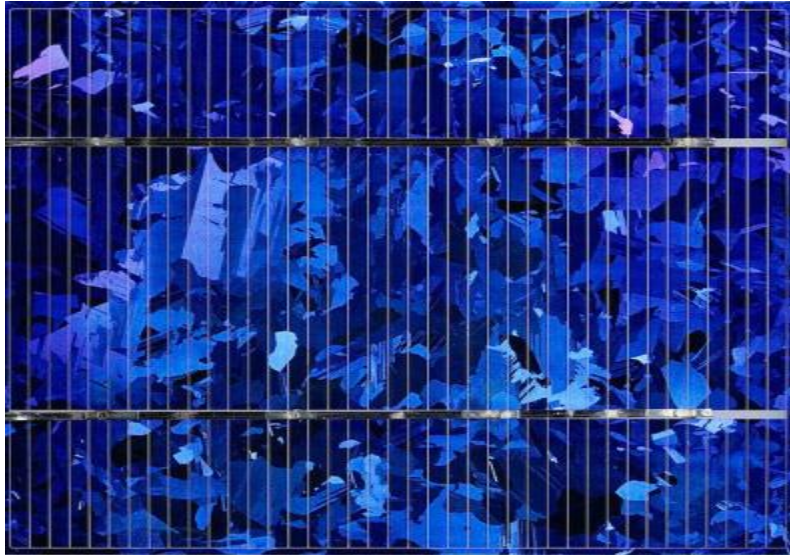
تكون بلورات السليكون ذات إتجاه واحد، وبنقاوة أعلى وهي أغلى ثمنا، يعتبر هذا النوع من أكثر البنيات البلورية انتظاما، ، وتتراوح كفاءة الخلية الشمسية أحادية التبلور التجارية من (17% إلى 18%). [8] ، أما التجريبية فقد إقتربت من حدها النظري بكفاءة 24.7% [9].



الشكل (1-21):صورة خلية شمسية من السليكون أحادي التبلور. [10]

3-5-1-2- الخلايا الشمسية للسليكون متعدد التبلور Poly Crystalline:

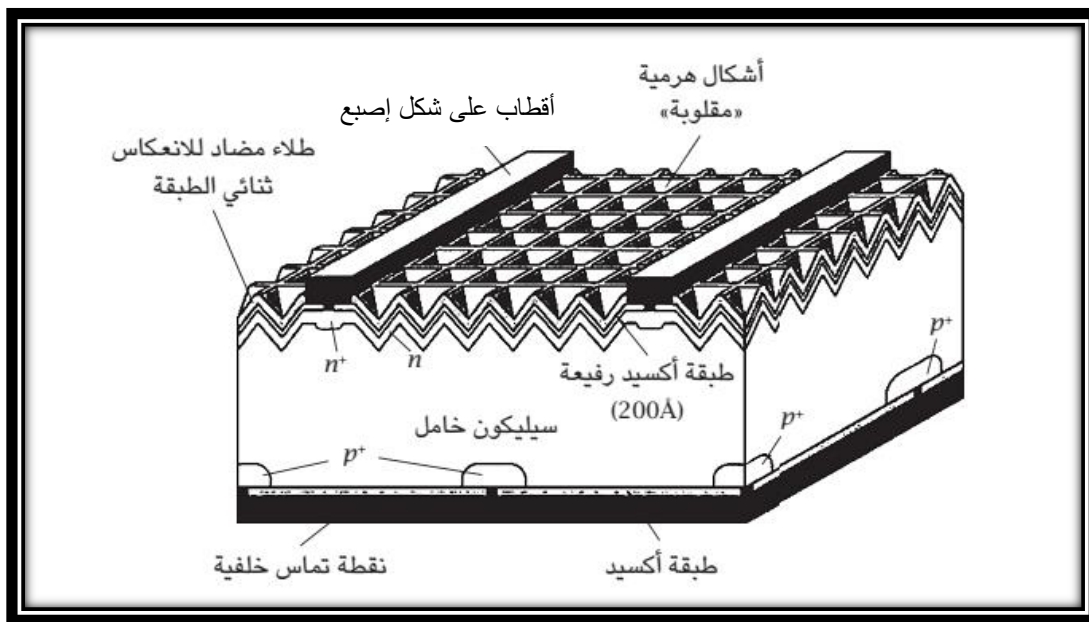
تكون بلورات السليكون بتدرجات مختلفة وكذلك كقطع متكسرة غير منتظمة تعطي عدة تدرجات من اللون الواحد عادة ما تكون بتدرجات مختلفة للون الأزرق إلا أنها كسابقتها من الممكن أن تتوفر بألوان أخرى كالرصاصي، لهذا النوع لمعان خفيف في المظهر الخارجي، وهو أقل كفاءة من سابقه أحادي التبلور حيث تتراوح كفاءة الخلية الشمسية من (12% إلى 14%). [7]



الشكل (1-22) : صورة خلية شمسية لسيليكون متعدد التبلور. [10].

3-1-5-3- تصميم الخلايا السميكة :

هناك تصاميم عديدة من الخلايا الشمسية المصنوعة من السيليكون البلوري. سنعرض هنا تصميم خاص بجامعة "نيو ساوث ويلز الأسترالية" الخلايا ذات الباعث المخمل والسطح الخلفي المنتشر محلياً "PERL" الذي حقق كفاءة تصل إلى 24.7% في ظل الطيف الشمسي القياسي والتي أستخدم فيها سيليكون أحادي البلور عالي النقاوة بسمك يتراوح بين $370\mu\text{m}$ و $400\mu\text{m}$ ، كما هو موضح في الشكل (1-23) : [10]



الشكل (1-23): تصميم الخلية ذات التخميل الأمامي والسطح الخلفي المنتشر محلياً PERL

[10].

تتميز هذه الخلية بسمات تزيد من كفاءتها نذكر منها :

- الجانب الأمامي لشريحة مصمم بحيث تلتقط الضوء. ويُستخدم غشاء مضاد للانعكاس ثنائية الطبقة ، وللتقليل من عرض نقاط التوصيل الأمامي المعدني تحدث إشابة فوسفورية لتكوين منطقة n^+ .
- الجانب الخلفي لشريحة يُحمل باستخدام ثاني أكسيد السيليكون لتقليل الإلتحامات السطحية. وتكون نقاط التماس الخلفية من خلال مناطق p^+ عالية الإشابة من أجل تقليل مقاومة التوصيل الخلفي. [10].

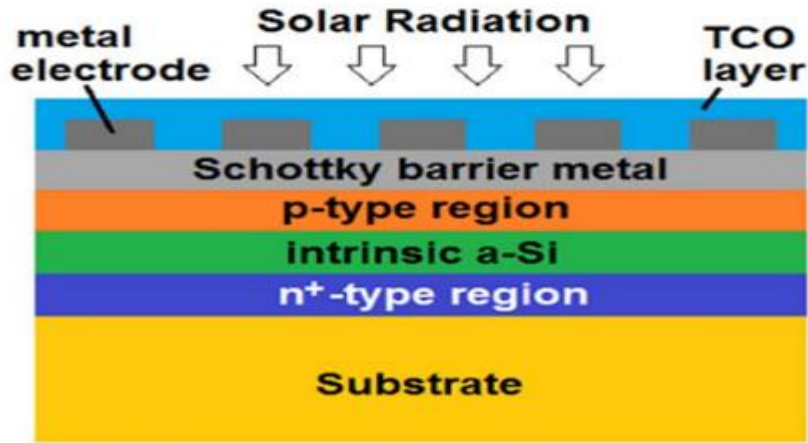
3-5-2- الجيل الثاني: الخلايا الشمسية من الشرائح الرقيقة Thin Film

تعد أقل سماكة من نظيرتها السليكونية (من رتبة المايكرومتر) لذلك هي أقل تكلفة لعدم إستهلاكها للكثير من المواد لكن في المقابل مزالت كفاءتها متدنية مقارنة بالجيل الأول، وهناك الكثير من الأنواع نذكر منها :

3-5-2-1- الخلايا الشمسية الرقيقة للسيليكون اللايلوري (a-Si) :

هي أحد أنواع الخلايا التي تجذب اهتمام واسعاً من قبل المصممين بسبب قابليتها على التشكل، حيث من الممكن أن تتوفر بأشكال صلبة (غير قابلة لطّي) كباقي الأنواع أو خلايا بهيئة رقائق متعددة الطبقات Thin Film خفيفة يتم ترسيبها عند التصنيع بطبقات رقيقة وبسمك لا يتجاوز بعض الميكرونات، ومن مواصفات الخلايا الشمسية من هذا النوع أنها مرنة وقابلة لطّي وخفيفة الوزن ومن الممكن استخدامها على الأسطح الأفقية والمنحنية كما أن تكلفة إنتاجها منخفضة مقارنة بتكلفة إنتاج الأغشية الرقيقة الأخرى. [10].

بسبب معامل الإمتصاص المتدني لمادة السيليكون تشاب بالذرات الهيدروجين من أجل رفع معامل الإمتصاص حتى 10^5 cm^{-1} مع تغير في النطاق الممنوع من 1.1eV حتى 1.75eV ويرمز للسيليكون المهدرج بالرمز a-Si:H ، لكن في المقابل تزداد العيوب بسبب الإشابة بذرات الهيدروجين ما يزيد من الإلتحامات لهذا تتراوح كفاءة هذه الخلايا بين 5% و 10% ، والشكل (1-24) يوضح بنية الخلية a-Si: [10].



الشكل (1-24): بنية الخلية (a-Si (amorphous silicon) . [7]

3-5-2-2- خلايا تيلوريد الكاديوم CdTe :

قام Bonnet و Rabnehorst ببناء أول خلية CdTe تجريبية كبيرة في عام 1972، والتي بلغت كفاءتها 6% [8]، ومنذ ذلك الوقت جرت عليها عدة تعديلات لرفع كفاءتها لتصل إلى 16.5% [11] أما الخلايا التجارية فتتراوح كفاءتها ما بين (9% و 11%) في الوقت الراهن وتعد أكثر أنواع الخلايا الرقيقة إنتشارا في السوق، لكن تسمية مادة الكاديوم Cd تعد أهم التحديات لهذا النوع. [7]

سهولة تطعيم CdTe بالنوع p ومعامل إمتصاصه الجيد ، جعله يتوافق مع كبريتيد الكاديوم الذي يطعم بالنوع n والذي له فجوة نطاق 2.4 eV ما يجعله شفاف لمعظم الإشعاع الشمسي [10]، والشكل (1-25) يوضح هذه البنية :



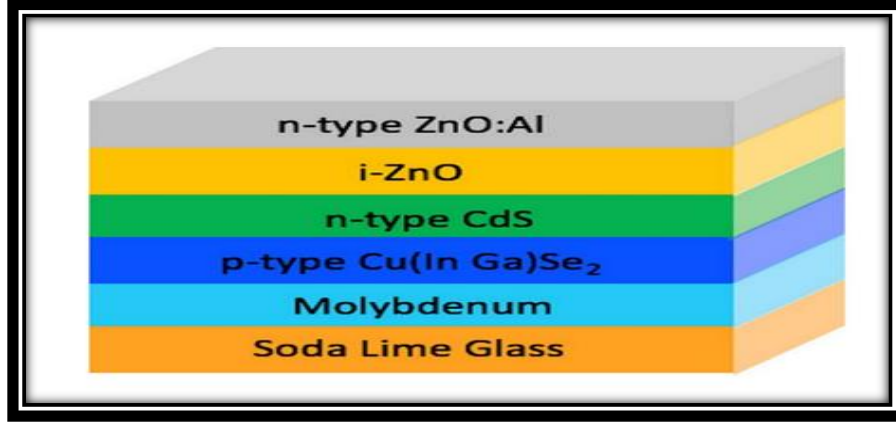
الشكل (1-25): بنية خلية CdTe . [7]

3-5-2-3- خلايا سيلينيد جاليوم إنديوم النحاس CIGS :

يعد سيلينيد جاليوم إنديوم النحاس ذو معامل إمتصاص عال (أكبر 100 مرة من معامل إمتصاص السيليكون) حيث يمكن لشريحة رقيقة منه بسماك 2 ميكرومتر إمتصاص 90% من الضوء المرئي

والأشعة تحت الحمراء ، ماجعل الخلايا CIGS ذات كفاءة جيدة ، حيث تصل النماذج المخبرية إلى كفاءة قدرها 19.9% [11] أما التجارية فتتراوح كفاءتها بين 10%-15% . [7].

تصميم خلية CIGS مشابه لتصميم خلايا CdTe كما هو موضح في الشكل (1-26) :



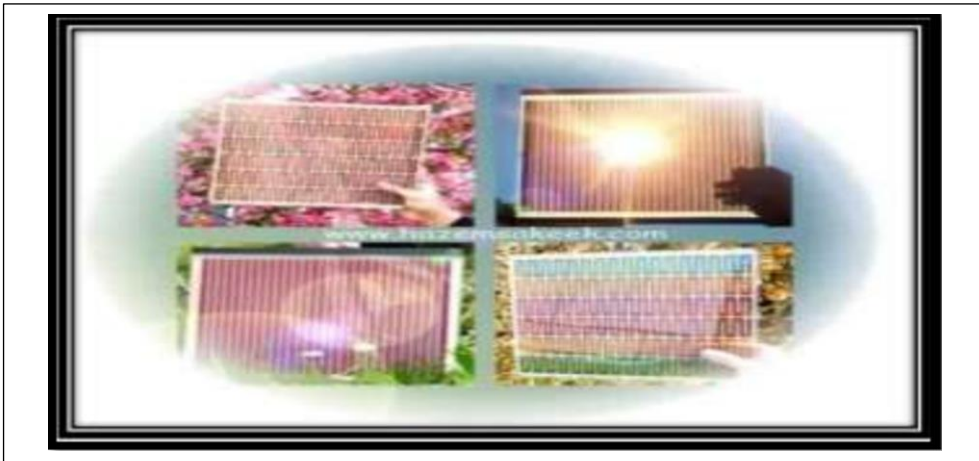
الشكل (1-26) : بنية خلية CIGS [7]

3-5-3- الجبل الثالث :

3-5-3-1- الخلايا الشمسية العضوية (OPV):

تعتبر الخلايا الشمسية العضوية مجالا واعدا للإنتاج خلايا شمسية غير سيليكونية رغم أن كفاءتها منخفضة جدا في حدود 3%-10% وكذا هشاشتها وعدم تحملها للإجهادات الميكانيكية وعمرها المحدود [6] مقارنة بالخلايا السيليكونية ، إلا أن مميزات مثل الخفة والشفافية والمرونة وقلة التكلفة والوفرة وإمكانية تغير تصميمها جعلها محط إهتمام الباحثين والمطورين . [6]

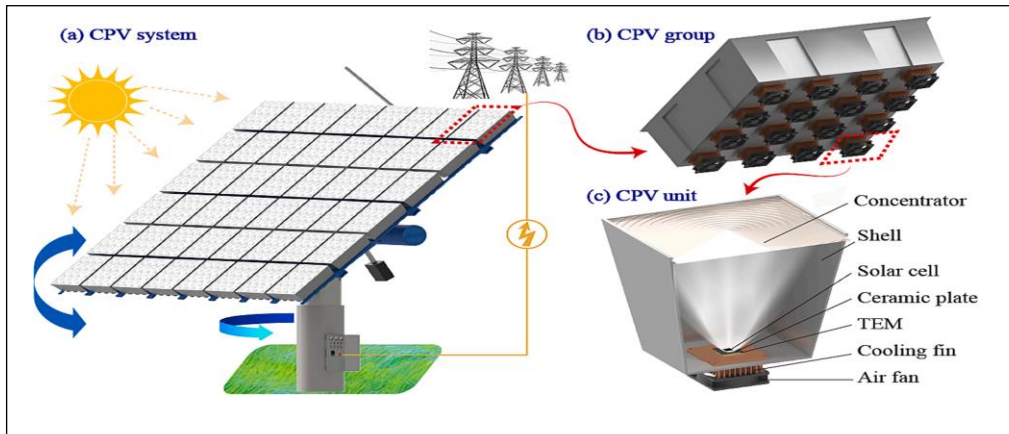
كما أن الخلايا الشمسية الصبغية تزداد كفاءتها في حالة ارتفاع درجة الحرارة في حين أن الخلايا الشمسية المعتمدة على أشباه الموصلات فإن كفاءتها تقل بزيادة درجة الحرارة، كما أن تصميم الخلايا الصبغية يجعلها قادرة على تبديد الحرارة الداخلية بشكل أفضل مما يساهم في أن تعمل في درجات حرارة منخفضة. [2].



الشكل (1-27) مجموعة من الخلايا الشمسية بتقنية الصبغات العضوية. [2]

3-5-3-2- الخلايا الشمسية الكهروضوئية المركزة (CPV):

على عكس الأنظمة الكهروضوئية التقليدية ، فإنها تستخدم العدسات أو المرايا المنحنية لتركيز ضوء الشمس على الخلايا الشمسية الصغيرة تحتها. بالإضافة إلى ذلك ، غالبًا ما تستخدم الأنظمة الكهروضوئية المركزة متعقبات شمسية بحيث تسقط أشعة الشمس دائمًا عليها عمودية مع اختلاف وجود الشمس في صفحة السماء أثناء النهار، وأحيانًا تعزز بنظام تبريد لزيادة كفاءتها وسجلت الخلايا الشمسية عالية التركيز (HCPV) أعلى كفاءة مقارنة مع الأنواع السابقة للخلايا حيث بلغت 44.4% من أجل خلية ثلاثية الوصلة و 47.1% من أجل خلية سداسية الوصلة.[9]

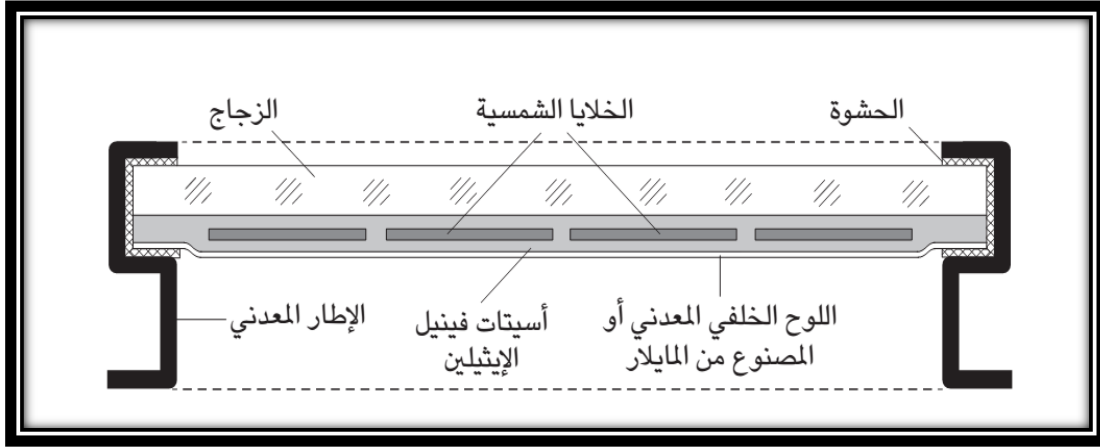


الشكل (1-28) لوح الخلايا الكهروضوئية المركزة (CPV). [9].

3-6- الوحدة الشمسية PV:

تكون الخلايا الشمسية الفردية المصنوعة من السيليكون هشة وقابلة للتأثر بالعناصر، لذا في كل التطبيقات، فهي تُوَظَر وتُحْمَى لكي تصبح وحدات شمسية ، حيث تصف مجموعة من الخلايا المترابط ، على التسلسل أو التفرع أو الربط المختلط ، وتجمع في آلة كبس حراري مع العناصر التالية :

- قطعة من زجاج النوافذ منخفض الحديد يحقق الشفافية ، الصلابة، مقاوم للحرارة و الأشعة فوق البنفسجية كما يمنع ترابط المخلفات العضوية وبالتالي يكون السطح سهل التنظيف .
- طبقة أسيتات فينيل الإيثيلين EVA بسبك قياسي قدره 0.5 mm الهدف منها الإلتصاق الجيد للوحدة، كما يجب أن تكون مقاومة للحرارة.
- لوح خلفي إما غشاء من المايلاز (Aromatic polyAmide) أو لوح من المعدن يجب أن تكون مقاومة للحرارة و تمنع نفوذ الماء والرطوبة.
- تُخَفَّف أسيتات فينيل الإيثيلين عند درجة حرارة تصل تقريبًا لـ 150 درجة مئوية، ثم يُدمج بإحكام مع الخلايا الشمسية والمكونات الأخرى. وفي النهاية، تُوَظَر الوحدة الزجاجية بهيكل معدني مزود بحشوة حماية.[10]



الشكل (1-29): بنية وحدة شمسية PV. [10]

في الغالب تحتوي الوحدة الشمسية على 36 خلية شمسية مربوطة على التسلسل لكل خلية جهد $V_{oc} = 0.6v$ أي أن الجهد الكلي النظري في حدود 21v أما الجهد الأعظمي بين 17v-18v ، والجهد المطلوب للوحدة هو 12v ، لذا يستغل الجهد الإضافي في تعويض الضياعات والباقي يخزن. [10]

4- ايجابيات وسلبيات الخلايا الشمسية:

إن استعمال الخلايا الشمسية له العديد من السمات الإيجابية منها: [3]

- ✓ ليس لها ضوضاء عند العمل.
- ✓ تحتاج إلى صيانة قليلة.
- ✓ تدوم لفترات طويلة حيث تبقى فعاليتها لمدة عشرين إلى ثلاثين سنة.
- ومثال العديد من مصادر الطاقة المتجددة فإنها تواجه معوقات منها: [3]:
- ✓ لا يمكنها إنتاج طاقة في الليل.
- ✓ لا يمكنها إنتاج الطاقة عند انعدام الأشعة الشمسية في حالات المطر وسقوط الثلوج.
- ✓ تصبح بمرور الوقت أقل كفاءة.

الفصل الثاني :

خلايا كبريتيد الموليبدينوم MoS_2

تمهيد:

في سبيل البحث عن بدائل للسيليكون ،طور الباحثون عدة خلايا شمسية مصنوعة من مواد مختلفة قد ذكرنا بعضها في الفصل الأول ، و أحد أهم المواد التي جذبت إهتمام الباحثين في العقدین الأخيرين هي ثنائي كالكوجينات المعادن الإنتقالية، مايرمز لها بالرمز TMDs ، لما توفره من خصائص مهمة مثل البنية الإلكترونية الفريدة والمتنوعة كما أن تطور تقنية الترسيب ثنائية البعد التي أكتشفت سنة 2004م بعد عزل الغرافين لأول مرة فتح المجال واسعا لدراسة كالكوجينات المعادن الإنتقالية [11]، لكننا سنركز في هذا الفصل عن أحد أنواع خلايا كالكوجينات المعادن الإنتقالية وهي خلايا كبريتيد الموليبدنيوم MoS₂ والتي تفوقت على نظيرتها من TMDs بسبب خصائصها الفريدة من إمكانية التحكم في نطاقها الممنوع ومعامل إمتصاصها العالي وسهولة توضعها خلال عملية الترسيب ماجعلها تستخدم في كثير من التطبيقات لتطوير أجهزة عالية الأداء مثل الخلايا الشمسية والترانستور والكواشف الضوئية.

1-تعريفات :

1-1-المواد ثنائية البعد 2D :

هي مواد بلورية ذات سمك صغير جدا بحجم بعض الذرات ، ويطلق عليها أيضا إسم المواد أحادية الطبقة ، كان الغرافين أول بلورة ثنائية الطبقة تم عزلها على الإطلاق سنة 2004م ، ومنذ ذلك الحين زاد الإهتمام بالمواد ثنائية الطبقة وتشمل العديد من الأنواع تقسم إلى 3 عائلات هي : الغرافينات و الكالكوجينات (مثل كالكوجينات المواد الإنتقالية) والأكسيدات . [11]

Graphene family	Graphene	hBN 'white graphene'	BCN	Fluorographene	Graphene oxide
2D chalcogenides	MoS ₂ , WS ₂ , MoSe ₂ , WSe ₂	Semiconducting dichalcogenides: MoTe ₂ , WTe ₂ , ZrS ₂ , ZrSe ₂ and so on		Metallic dichalcogenides: NbSe ₂ , NbS ₂ , TaS ₂ , TiS ₂ , NiSe ₂ and so on	
				Layered semiconductors: GaSe, GaTe, InSe, Bi ₂ Se ₃ and so on	
2D oxides	Micas, BSCCO	MoO ₃ , WO ₃	Perovskite-type: LaNb ₂ O ₇ , (Ca,Sr) ₂ Nb ₃ O ₁₀ , Bi ₄ Ti ₃ O ₁₂ , Ca ₂ Ta ₂ TiO ₁₀ and so on	Hydroxides: Ni(OH) ₂ , Eu(OH) ₂ and so on	
	Layered Cu oxides	TiO ₂ , MnO ₂ , V ₂ O ₅ , TaO ₃ , RuO ₂ and so on		Others	

الجدول (1-2) : المواد ثنائية البعد المصنعة حتى اليوم وتصنيفها . [12]

المواد في الخانات الزرقاء تتميز بإستقرار في الظروف الإعتيادية ، أما المواد في الخانات الخضراء فهي شبه مستقرة أما الخانات الحمراء فهي مواد غير مستقرة إلا في بيئة غازية لغاز حامل ،أما الخانات الرمادي فهي مواد سميكة يمكن نقشيرها ميكانيكيا للحصول على مواد ثنائية البعد . [12]

1-2-الكالكوجينات:

أصل التسمية لاتيني مشتق من كلمة (χαλκός) (chalcos) وتعني تكون ركام المعادن ، الكالكوجينات هي عناصر المجموعة السادس عشر في الجدول الدوري للعناصر كما تعرف أيضا بعائلة الأكسجين وتتكون من العناصر التالية: الأكسجين O ، الكبريت S ، التيلوريوم Te ، البولونيوم Po ، ليفرموريوم Lv. [13]

تحتوي جميع عناصر هذه المجموعة على ستة إلكترونات تكافؤ (ns²,np⁴ أو ns²(n-1)d¹⁰np⁴) ما يجعلها تكتسب إلكترونين إثنين أو تكوين رابطيتين تساهميتين للحصول على طبقة مشبعة ، كما أن رقم التأكسد للكالكوغينات في الغالب هو -2 كما يكمن أن يكون من -1 إلى +6 وهذا الأخير هو أقصى حد تملكه الكبريتات SO₄ والسيلينات SeO₄. [13]

1-3-المعادن الإنتقالية (transition metals):

يمكن تعريفها على أنها تلك العناصر (او أيوناتها) التي تحتوي على غلاف d غير ممتلئ ، و يمكن حصرها في الجدول الدوري من العمود الثالث إلى العمود الثاني عشر، كما هو موضح في الجدول (2-2) :

Group	الدورة الرابعة	الدورة الخامسة	الدورة السادسة	الدورة السابعة
3 (III B)	21Sc	39Y	71Lu	103Lr
4 (IV B)	22Ti	40Zr	72Hf	104Rf
5 (V B)	23V	41Nb	73Ta	105Db
6 (VI B)	24Cr	42Mo	74W	106Sg
7 (VII B)	25Mn	43Tc	75Re	107Bh
8 (VIII B)	26Fe	44Ru	76Os	108Hs
9 (VIII B)	27Co	45Rh	77Ir	109Mt
10 (VIII B)	28Ni	46Pd	78Pt	110Ds
11 (I B)	29Cu	47Ag	79Au	111Rg
12 (II B)	30 Zn	8 Cd	80Hg	112Cn

الجدول (2-2) : العناصر الإنتقالية [12] [14]

تتميز المعادن الإنتقالية بـ : [14]

- توصيل جيد للكهرباء.
- الصلابة الفائقة في درجات الحرارة العادية.
- مظهر لامع.
- نقاط غليان وانصهار عالية.
- لها خواص مغناطيسية.

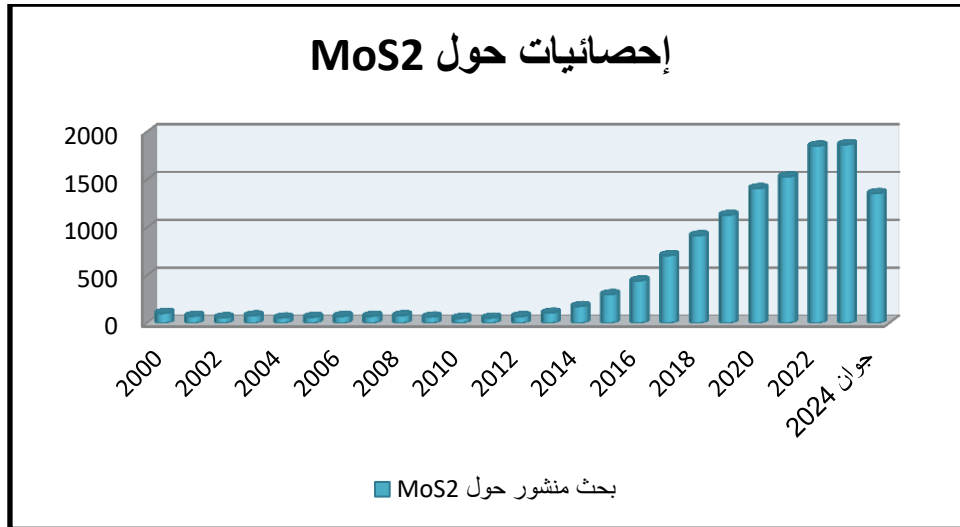
2-كبريتيد الموليبدنيوم MoS_2 :

كبريتيد الموليبدنيوم أو الموليبدنيت هو مادة غير عضوية ، تتواجد في شكلها الخام على شكل حجارة لها لون فضي براق ، كما هو موضح في الصورة في الشكل (1-2) :



الشكل (1-2) : كبريتيد الموليبدنيوم في شكله الخام .[14]

برز كبريتيد الموليبدنيوم (أو الموليبدنيت) كأحد أهم أنواع الكوجينات المعادن الإنتقالية ، حيث إزدادت الأبحاث المتعلقة بخواصه وتطبيقاته الكثيرة والمتعددة ، ويعد " L. Pauling و R. G. Dickenson " أول من نشر ورقة بحثية حول كبريتيد الموليبدنيوم سنة 1923م أما كبريتيد الموليبدنيوم أحادي الطبقة فكان " P. Joensen " وآخرون أول من درس الخواص البنوية عن طريق حيود الأشعة السينية X لطبقة أحادية ناتجة عن عملية التقشير الكيميائي سنة 1986م ، لكن الطفرة النوعية في تكنولوجيا المواد الثنائية التي حدثت بعد تقشير أول طبقة أحادية من الغرافين سنة 2004م هي التي جذبت أنظار الباحثين إلى الكوجينات المعادن الإنتقالية وبالأخص كبريتيد الموليبدنيوم لما تميز به من خواص فريدة ، والمنحى في الشكل (2-2) يوضح الزيادة الهائلة للدراسات المنشورة حول كبريتيد الموليبدنيوم في السنوات الأخيرة .[12]

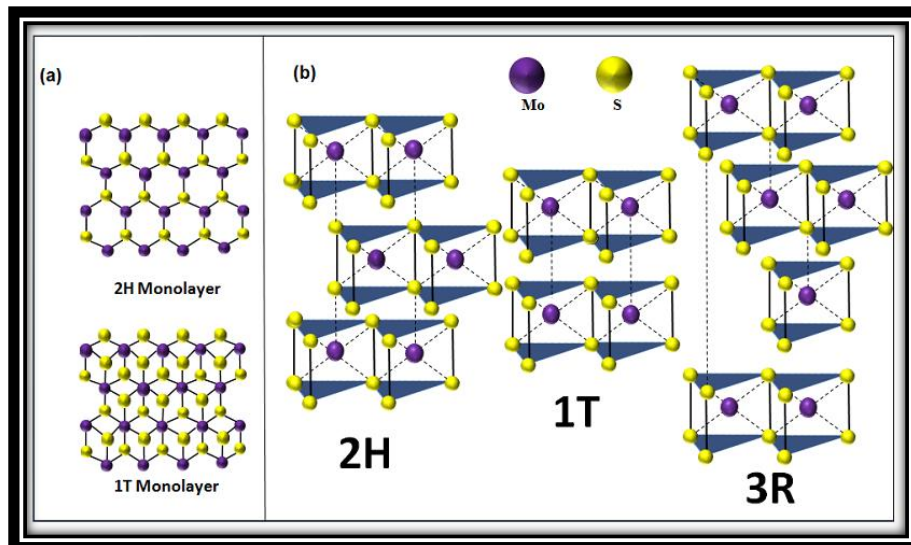


الشكل (2-2): مخطط يوضح تطور عدد الدراسات المنشورة حول MoS_2 خلال السنوات 2000-2024 حسب قاعدة بيانات موقع Science Direct .

2-1- البنية البلورية لكبريتيد الموليبدنيوم MoS_2 :

ينتمي كبريتيد الموليبدنيوم أو الموليبدنيت إلى فئة الكوجينات المعادن الإنتقالية ، التي تكتب بالصيغة التالية MX_2 ، حيث M يمثل معدن الإنتقالي (معدن الموليبدنيوم Mo) و X هو الكالكوجين (الكبريت S).

في البنية ثنائية البعد 2D يكون سمك الطبقة ثلاث ذرات متوضعة على الشكل S-Mo-S حيث يكون رقم أكسدة Mo (+4) أما S (+2) ، وتحيط بكل ذرة Mo ست ذرات كبريت ، وبشكل عام تتوضع الطبقات ثنائية الأبعاد لكبريتيد الموليبدنيوم في 3 بنيات أساسية هم السداسية (2H) والرابعة (1T) ومعينة السطوح (3R) [12]، كما هو موضح في الشكل (2-3):



الشكل (2-3): الأطوار الثلاثة للبنية البلورية ل MoS_2 [11]

- **الطور السداسي (2H):** يعتبر الأكثر شيوعاً في الطبيعة ، والأكثر إستقراراً مقارنة بالطورين الرباعي ومعيني الوجوه ، يحتوي على طبقتين لكل وحدة خلية موجهة بشكل سداسي التماثل.
- **الطور معين السطوح (3R):** يظهر في MoS_2 المعد صناعياً ، ويعتبر هذا الطور غير مستقر حيث يمكن تحويله بسهولة إلى الطور السداسي (2H) عن طريق التسخين ، يحتوي على 3 طبقات لكل وحدة خلية متماثلة بشكل معين الوجوه.
- **الطور الرباعي (1T):** يسمى أيضاً الطور المعدني ، ويتميز بناقلية جيدة للكهرباء ، تتميز بالتناظر الثلاثي Mo-Mo ، ويتم الحصول على البنية 1T-MoS_2 عن طريق تطعيم البنية 2H-MoS_2 بذرات معادن قلوية (Li, Na, K, ...) ويعتبر هذا الطور شبه مستقر حيث يمكن تحويله إلى الطور 2H-MoS_2 عن طريق تعريضه لأشعة الميكروويف. [15]

الجدول (2-3) يوضح ثوابت الشبكة لكل طور :

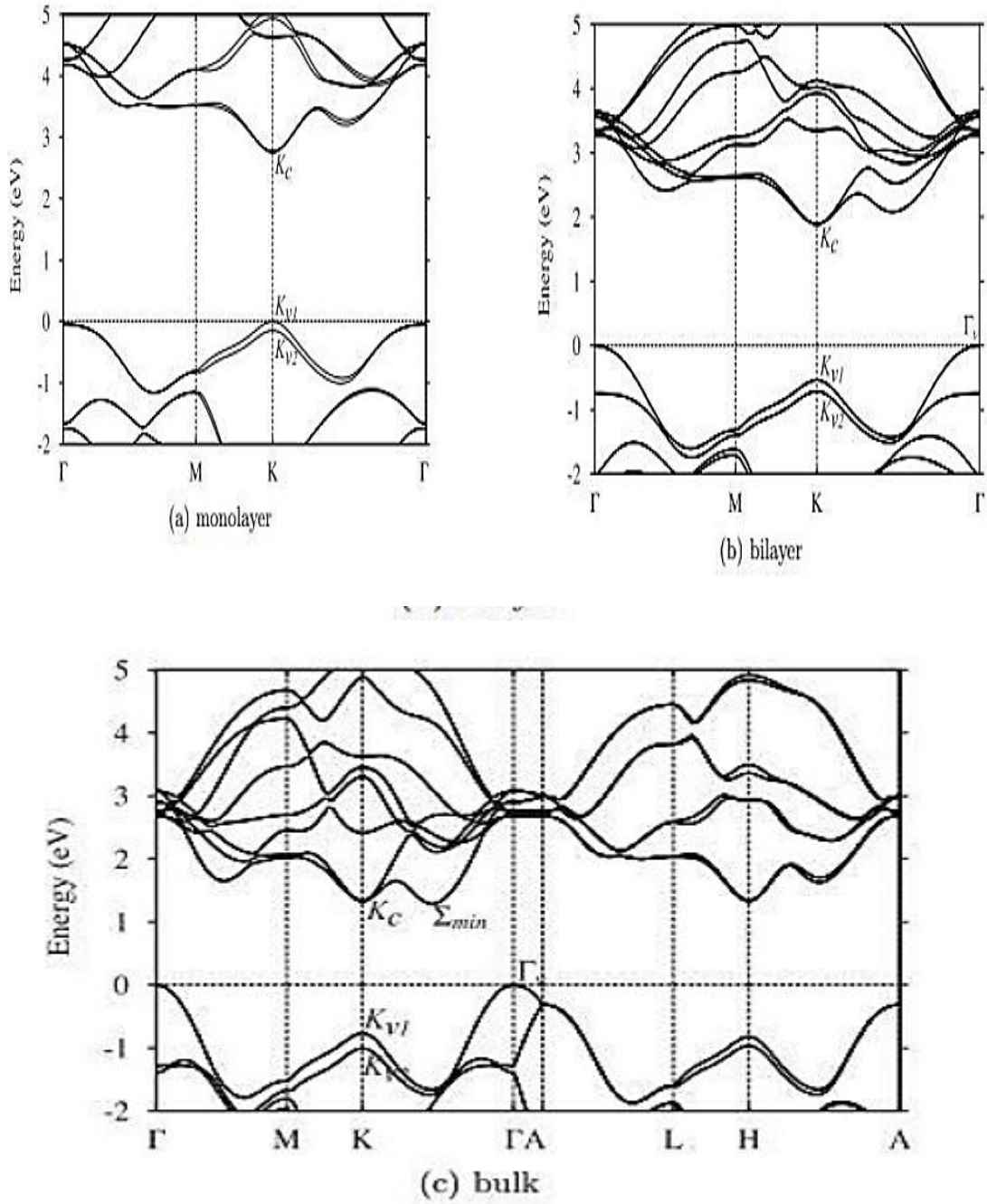
Polymorphic Structure	Lattice Parameter	Point Group	Electronic Behavior
1T	$a = 5.60 \text{ \AA}, c = 5.99 \text{ \AA}$	D_{6d}	Metal
2H	$a = 3.15 \text{ \AA}, c = 12.30 \text{ \AA}$	D_{6h}	Semiconductor
3R	$a = 3.17 \text{ \AA}, c = 18.38 \text{ \AA}$	C_{3v}	Semiconductor

الجدول (2-3): ثوابت الشبكة للأطوار 1T, 2H, 3R لكبريتيد الموليبدنيوم MoS_2 . [11].

في جميع الأطوار السابقة تكون الروابط بين ذرات الموليبدنيوم Mo والكبريت S قوية لأنها تساهمية، على العكس من ذلك ترتبط الطبقات المتجاورة في البنية بقوى فان ديرفالز الضعيفة، هذه الميزة تستغل في عملية توضع الطبقات ثنائية البعد ، وكذا التحكم في النطاق الطاقى لهذه المواد. [11]

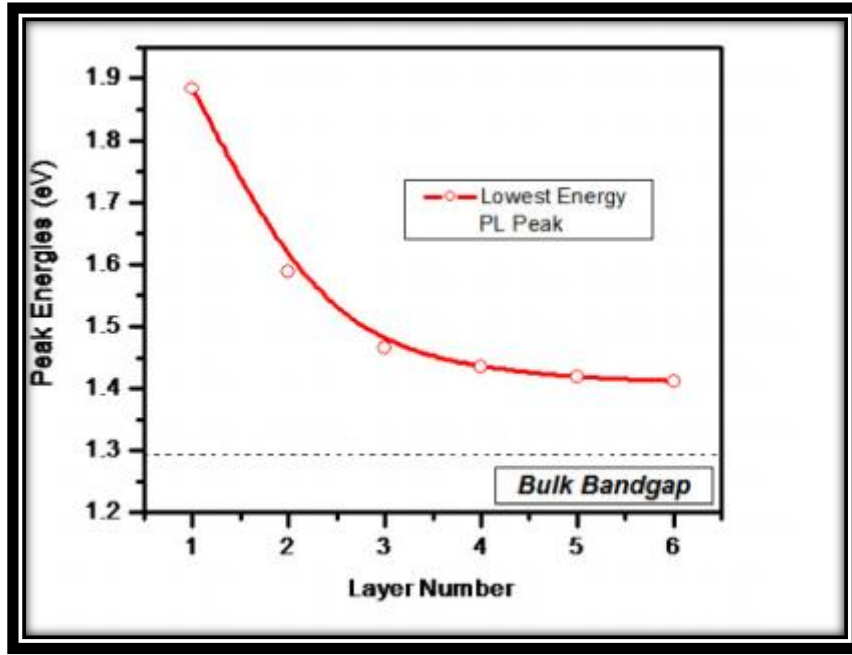
2-2-بنية عصابات الطاقة :

يمتلك كبريتيد الموليبدنيوم على غرار كالكوجينات المعادن الإنتقالية TMDC والغرافين القدرة على الإنتقال من الفاصل الطاقى غير مباشر إلى المباشر ، هذا التغير يصاحبه تغير في قيمة النطاق الممنوع E_g ، حيث الفاصل الطاقى لـ 2D-MoS_2 مباشر وعند زيادة الطبقات يتحول بصورة مضطربة إلى النطاق الغير مباشر ، كما هو موضح في الشكل (2-4): [11] [12] [14] [16]



الشكل (2-4): بنية العصابات الطاقة ل MoS_2 في سمك مختلف (a) أحادي الطبقة (b) ثنائي الطبقة (c) شريحة سميكة . [16]

كما نلاحظ في الشكل (2-5) أن هناك علاقة عكسية بين سمك العينة وقيمة النطاق الممنوع حيث يسجل أقل قيمة له عند الشرائح السميكة 1.2 eV وأعلى قيمة له عند الشرائح أحادية الطبقة 2.4 eV كما يوضحه الشكل (2-5) الذي يوضح تأثير عدد الطبقات على قيمة النطاق الممنوع: [11]



الشكل (2-5): تأثير عدد الطبقات على النطاق الممنوع ل MoS₂. [11]

يوضح الجدول (2-4): أن تغير البنية البلورية لكبريتيد الموليبدنيوم يصاحبه تغير في النطاق الممنوع

البنية البلورية	1T	2H	3R
Eg(ev)	1.8-2.1	1.2-1.3	1.416

الجدول (2-4): قيم النطاق الممنوع للأطوار الثلاثة للبنية البلورية ل MoS₂. [17].

2-3- التركيز الجوهري والتطعيم:

كبريتيد الموليبدنيوم في حالته الجوهريّة هو شبه ناقل نوع n وذلك بسبب العيوب الناتجة عن عملية التصنيع ، حيث أظهرت دراسة العيوب في كبريتيد الموليبدنيوم أحادي الطبقة و متعدد الطبقات أن هناك روابط شاغرة لذرات الكبريت S في البنية ، ما جعل قطبية MoS₂ تكون في الغالب من النوع n ، و لهذا في غالب الأحيان تسمى الشرائح المصنعة غير المطعمة لكبريتيد الموليبدنيوم بالشرائح البكر (pristine MoS₂) بدل الجوهريّة (intrinsic) ، ويبلغ التركيز الجوهري للمواد السميكة من MoS₂ ما بين 2×10^{13} - 7.5×10^{18} - $1.6 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ ، أما المواد أحادية الطبقة فيتراوح التركيز الجوهري بين 2×10^{13} - $2.3 \times 10^{15} \text{ cm}^{-2}$ [17]، ويمكن زيادة هذه القطبية عن طريق التطعيم بواسطة المانحات ، كما يمكن جعل القطبية نوع P وذلك بواسطة التطعيم بواسطة الآخذات ، وقد تعددت طرق التطعيم لشرائح كبريتيد الموليبدنيوم الثنائية من التطعيم السطحي إلى التطعيم عن طريق حقن ذرات وكلا النوعين يكون في وسط جاف أو رطب.

الجدول (2-5) يوضح أهم الطرق المتبعة لتطعيم كبريتيد الموليبدينوم أحادي الطبقة والذرات والجزيئات المستعملة لكل طريق من أجل تطعيم نوع n وتطعيم نوع p: [12]

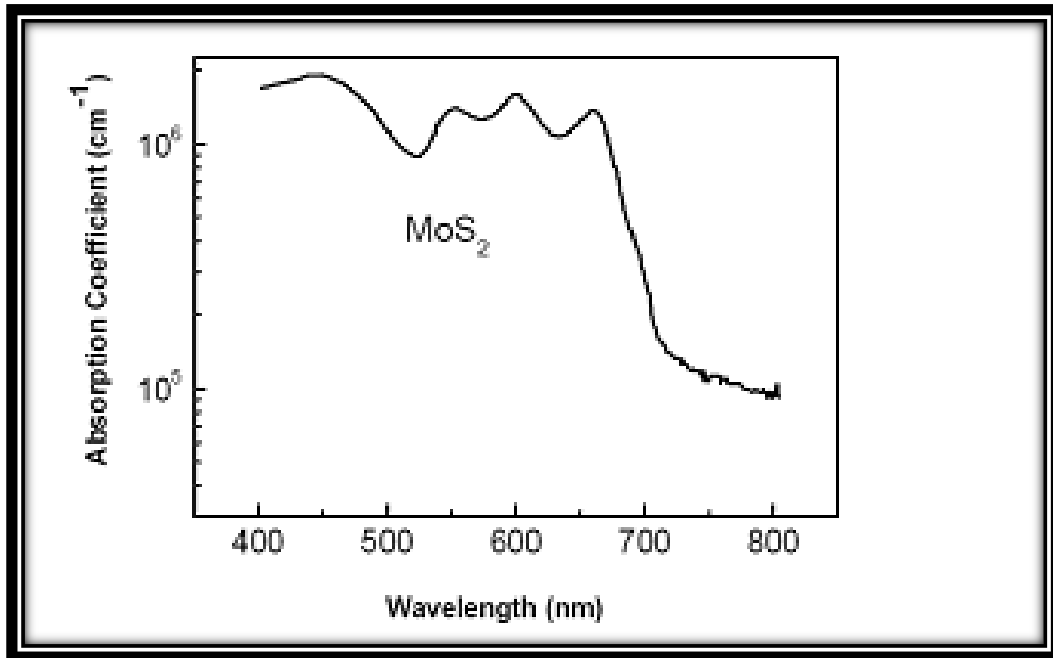
طبيعة التطعيم	طريقة التطعيم	الكيفية	النوع n	النوع p
التطعيم الرطب	تطعيم كيميائي Chemical Doping	تتقع الشرائح في المحلول المناسب ويستغل ظاهرة الإدمصاص يحدث تبادل إلكترونات	/benzyl viologen/ (TTF) /(2-Fc-DMBI) ₂ (PTSA) dichloroethane(DCE) (NADH)	/ (TCNQ)/ AuCl ₃ (Ag NPs)/(Au NPs) /(F4-TCNQ) polyethylene imine (PEI) (TCNE)
	التطعيم بالحمض الربيبي DNA Doping	تقنية ثورية تجمع بين التكنولوجيا الحيوية وتقنية النانو	DNA الحمض الربيبي منقوص الأوكسجين	MDNA الحمض الربيبي المعدل بواسطة أيونات معادن (Cu ²⁺ , Zn ²⁺ , Ni ²⁺)
	التطعيم بواسطة سائل أيوني	باستخدام محلول أيوني وأنود وكاثود	NH ₄ ⁺	BF ₄ ⁻
التطعيم الجاف	الإقحام الأيوني	تتقع الشريحة في محلول مع شروط حرارة مناسبة	Li ⁺ ,	P
	التطعيم الذاتي بالنيتروجين	من خلال غاز الأزوت في عملية الترسيب CVD	N	-
	التطعيم بالجزيئات العطرية	تشبع سطح الشريحة بالجزيئات العطرية وكلها تعطي النوع P	-	salicylic acid, aniline, phenol, methyl salicylate, nitrobenzene (dissolved in ethanol),
التطعيم الجاف	التطعيم بالترسيب بالأبخرة الكيميائية (CVD)	من خلال عملية CVD يتم تطعيم ذرات على الشريحة	Ti /Graphene Cr, Cu, Sc	graphene /quantum dots (GQDs) Ni,Zn
	التطعيم بالبلازما	نقل ذري في وسط بلازما	-	O ₂ , SF ₆ , CHF ₃ , CF ₄ , Ar
	التطعيم بنقل الأبخرة الكيميائية (CVT)	نقل ذري في الفراغ	Cs ₂ CO ₃ Au, Mn	Au , Se, P, PSG, Re, Co, Ni, Fe, Nb

الجدول(2-5) : طرق تطعيم كبريتيد الموليبدينوم المتبعة. [12]

4-2- خصائص كبريتيد الموليبدنيوم:

2-4-1- الخصائص الضوئية:

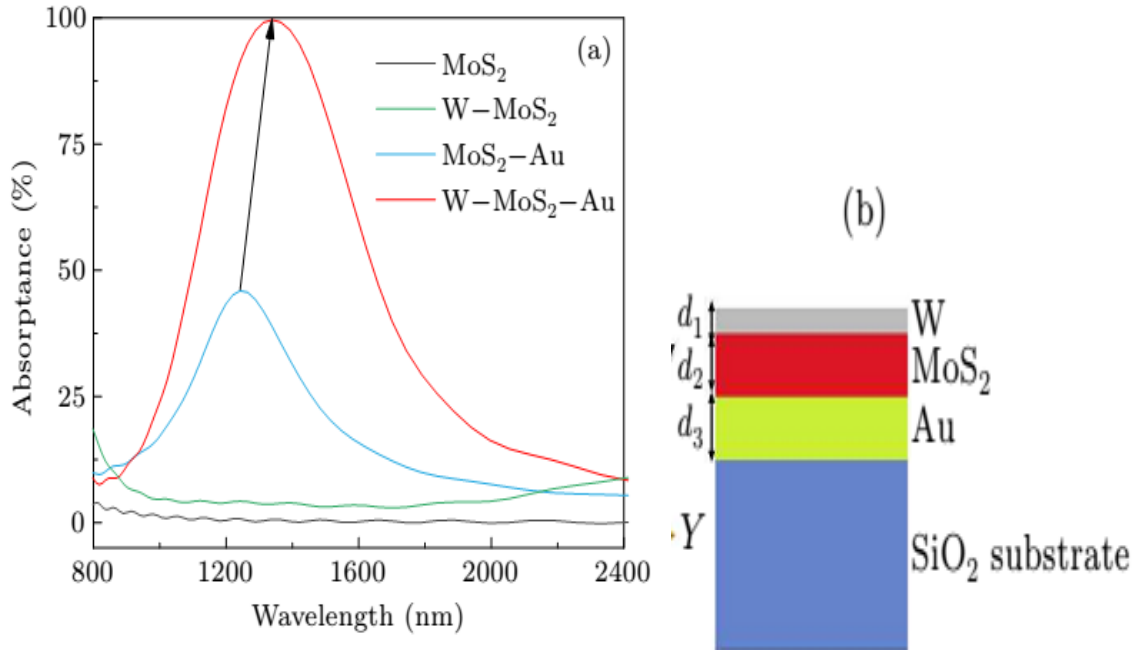
يمتلك كبريتيد الموليبدنيوم خواص بنيوية وكهربائية مميزة لكن في المقابل تمثل خواصه الضوئية أكبر تحدي للمطورين ،حيث له معامل إمتصاص منخفض في مجال الأشعة تحت الحمراء ولا تتعدى نسبة إمتصاصه في أقصى الحالات النسبة بين 08%-10% لذلك يعتبر شفاف في طيف الأشعة تحت الحمراء و هذا يعتبر غير مفيد لتطبيقات الكواشف الضوئية وغيرها ، حيث بلغت الإستجابة الطيفية 880A/W لعينة أحادية الطبقة ذات نطاق ممنوع 1.8eV عند الطول الموجي 561nm ، وذروة الإمتصاص للضوء تقع في المجال بين 400nm و 680nm. [17]، كما هو موضح في الشكل (2-6):



الشكل (2-6) : منحنى معامل الإمتصاص بدلالة الطول الموجي. [18]

من أجل تحسين إمتصاص الضوء في شرائح 2D-MoS₂ إقترح Hao Yu وآخرون سنة 2023 [17] ، بنية شريحة لكاشف ضوئي تعتمد على فكرة حبس الضوء في مطيافية فابري-بيرو (Fabry-Perot) ومنها أخذ إسمه " the MoS₂-based sandwich Fabry-Perot" [19].

يتكون هذا الكاشف من طبقة من التنغستين W بسمك $d_1 = 10\text{nm}$ و أخرى من كبريتيد الموليبدنيوم بسمك $d_2 = 60\text{nm}$ وتوصيل خلفي من الذهب Au بسمك $d_3 = 100\text{nm}$ على مسند من الزجاج مكنت هذه البنية حسب Hao Yu من تحقيق إمتصاص مثالي للأشعة تحت الحمراء بنسبة 100%، والشكل (2-7) يوضح بنية الكاشف ومنحنى نسبة الإمتصاص بدلالة الطول الموجي له [19].



الشكل (7-2): (a) منحني نسبة الإمتصاص بدلالة الطول الموجي ، (b) بنية الكاشف MoS₂ فابري-بيرو. [19].

2-4-2- الخصائص الحرارية:

تنتقل الطاقة الحرارية في المواد عن طريق الفونونات أو الإلكترونات وذلك عند وجود تدرج في درجات الحرارة داخل الجسم ، تبلغ الموصلية الحرارية ل MoS₂ متعدد الطبقات ($52 \text{ Wm}^{-1}\text{K}^{-1}$) [17] وهي أقل بكثير من تلك للجرافيت ($1000 \text{ Wm}^{-1}\text{K}^{-1}$) [17] ما يجعل كبريتيد الموليبدنيوم جيد لإستعماله في العزل الحراري ، كما لوحظ أنه كلما قل عدد لطبقات ضعفت الموصلية الحرارية وذلك بسبب زيادة نسبة تشتت الفونونات، وتبلغ الموصلية الحرارية لكبريتيد الموليبدنيوم أحادي الطبقة $6 \text{ Wm}^{-1}\text{K}^{-1}$. [16].

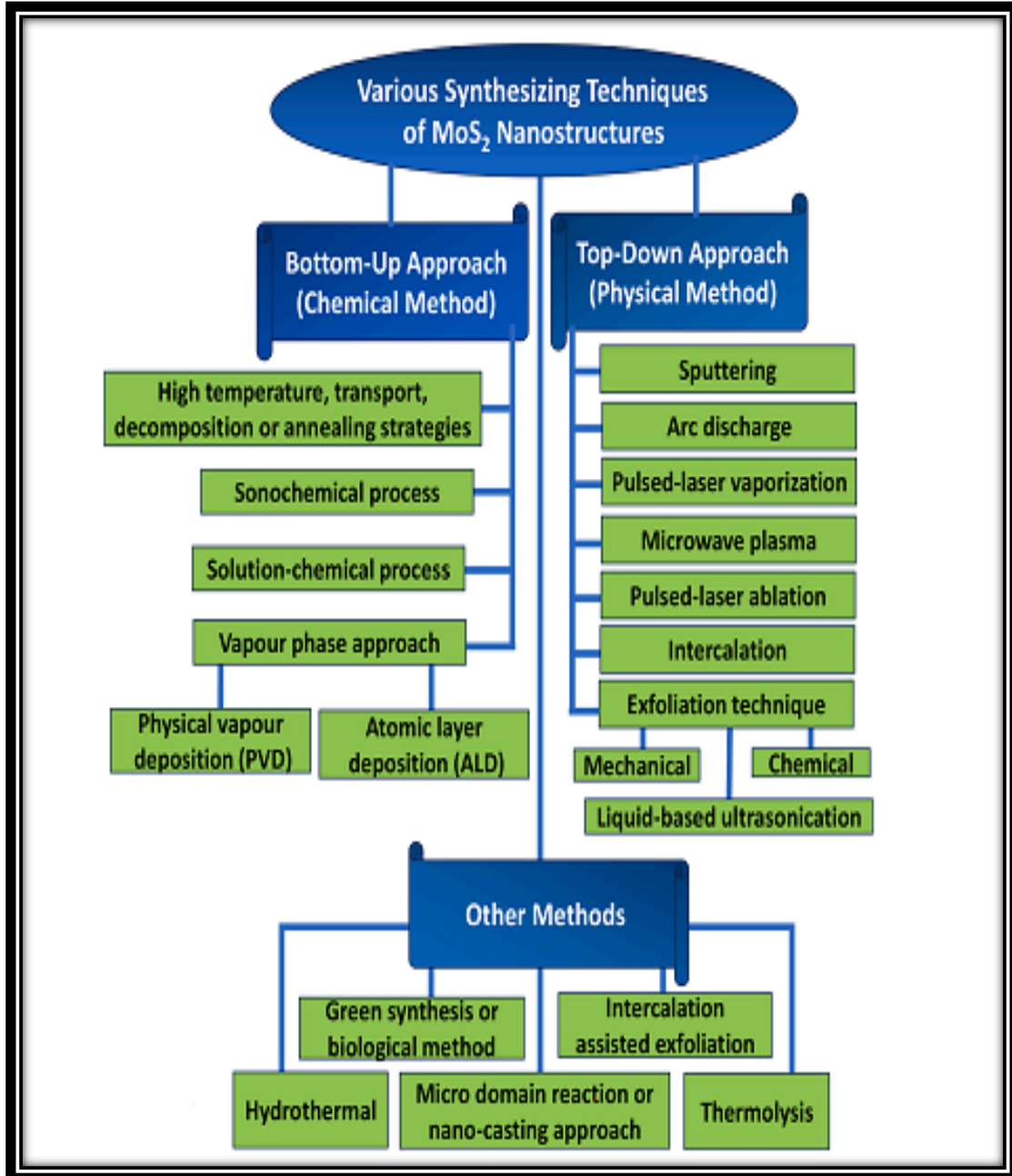
بسبب هذه الخواص المذكورة، MoS₂ مرشح جيد للتطبيقات في الخلايا الشمسية والأجهزة الدقيقة حيث يمثل العزل الحراري عامل مهم للحفاظ على أداء الأجهزة وكفاءتها .

2-3-4-2- الخصائص الميكانيكية:

عند تصميم الهياكل للمواد تلعب الخواص الميكانيكية دورا مهما ، حيث يمتلك كبريتيد الموليبدنيوم خواص ميكانيكية مذهلة ، له معامل صلابة أكثر من الفولاذ وقابلية إنحناء أكثر من البوليميرات ما يجعله ممتاز للتطبيقات المرنة ، حيث يتحمل 25% من التشوه المرن قبل أن يتمزق [17] ، يبلغ معامل يونغ لطبقة أحادية من كبريتيد الموليبدنيوم مرسبة بتقنية CVD (139.5 N/m^2) [17] هذا ما يجعل المركبات الإلكترونية المعتمدة على MoS₂ مرنة ، قابلة للطي ، ذات متانة ، قابلة للإنضغاط وتحمل الإجهادات الميكانيكية.

3- طرق الترسيب:

هناك طرق متعددة لترسيب شرائح رقيقة لكبريتيد الموليبدونيوم كل طريقة تعتمد على تقنيات مختلفة ولكن في الغالب تنقسم إلى عائلتين طرق كيميائية (من الأسفل إلى الأعلى) وطرق فيزيائية (من الأعلى إلى الأسفل) ، والشكل (2-8) يوضح مخطط طرق المعتمدة لترسيب MoS_2 والعائلة المنتمية لها :



الشكل (2-8) : مخطط طرق ترسيب MoS_2 المعتمدة والعائلة المنتمية إليها. [17]

نظرا لتعدد طرق الترسيب وكثرتها سنتطرق في هذا الفصل لأهم الطرق المعتمدة وأكثرها تطبيقا وهي :

3-1-1- التفسير "Exfoliation" :

3-1-1-3- التفسير الميكانيكي "Mechanical exfoliation" :

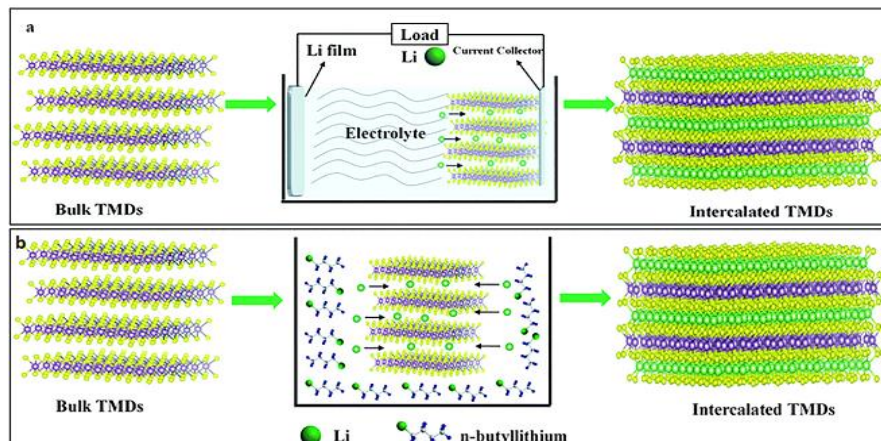
تعد أول الطرق المستخدمة للحصول على مواد ثنائية البعد ، حيث أستخدمت لتصنيع أول بنية ثنائية البعد وهي الغرافين ، تسمى أيضا أيضا الإنقسام الميكانيكي الدقيق "micromechanical cleavage" ، تشبه هذه الطريقة عملية تقشير بشرة الوجه المستعملة في صالونات الحلاقة حيث يمرر شريط أو طبقة لاصقة على الجلد ثم تسحب لإزالة قشور الجلد الميت للوجه ، بنفس المبدأ تستخدم مادة كبريتيد المولبيدينيوم عالية النقاوة وبشكل سائب (مماثل للوجه في المثال المذكور) ويمرر عليه شريط توتر سطحي من أجل كسر الروابط الضعيفة (قوى فاندرفالس) بين طبقات MoS_2 ، نتحصل على طبقة أحادية من MoS_2 ، يمكن إرفاق الأشرطة المستخدمة في العملية بركائز زجاجية للحصول على طبقات مستوية.

تتميز هذه الطريقة بالبساطة و انخفاض التكلفة بسبب عدم تطلبها لتقنيات التفريغ الهوائي أو التسخين الباهضة الثمن ، كما أنها تنتج رقائق أحادية أو قليلة الطبقات من MoS_2 ذات جودة عالية . في المقابل الرقائق المنتجة بهذه التقنية محدودة الانتشار لانتجاوز بضع عشرات الميكرومتر ما يجعل تطبيقاتها محدودة في تقنيات الإستشعار ، كما أن هذه التقنية لا تمكن من التحكم في تناسق الطبقات المنتجة أو توحيد السمك لذا فهي غير مجدية لتطبيقات المساحات الكبيرة والإنتاجية العالية.[15]

3-1-2- التفسير الكيميائي Chemical Exfoliations :

من أجل التغلب على تحديات التفسير الميكانيكي ، قام الباحثون بتطوير تقنية التفسير الكيميائي التي تعتمد على إقحام أيونات ذرات المعادن القلوية مثل الليثيوم Li^+ في بنية MoS_2 ما يضعف قوى فاندر فالس بين الطبقات ويجعل عملية التفسير تنتج رقائق أحادية الطبقة بمساحات أكبر .[15]

الشكل (2-9) يوضح عملية الإقحام الذري لأيونات Li^+ داخل طبقات سميكة من MoS_2 بطريقتين هما الإقحام الكهروكيميائية والكيميائي :

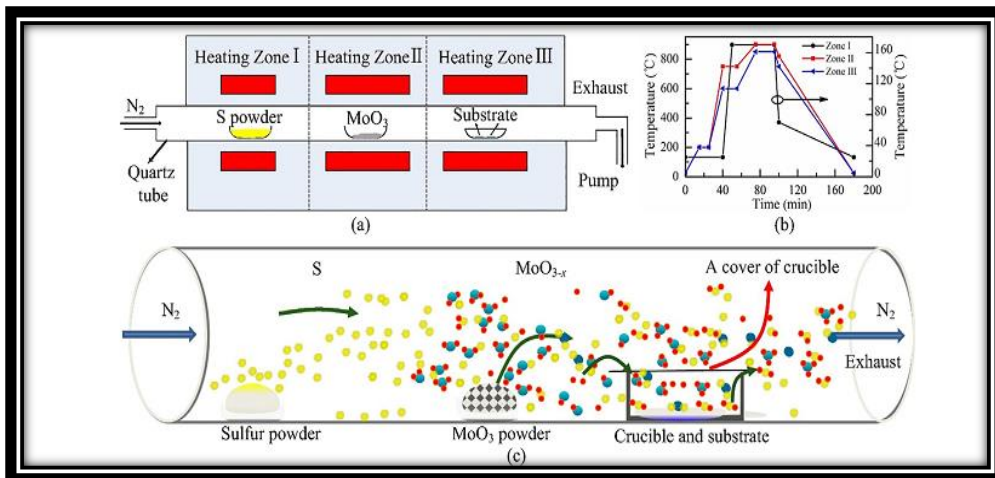


الشكل (2-9): (a) الإقحام الكهروكيميائي (b) الإقحام الكيميائي.[15]

- في الإقحام الكهروكيميائي يستخدم مصعد (anode) مانح لأيونات Li^+ ومهبط (cathode) من طبقة سميكة من MoS_2 في محلول مناسب .
 - في الإقحام الذري الكيميائي يستعمل محلول (بيتال الليثيوم-n) ذو الصيغة الكيميائية $LiCH_2-CH_2-CH_3$ كمحلول مانح لأيونات Li^+ وطبقة سميكة من MoS_2 كمضيف لهذه الأيونات .
- تمكن طريقة التقشير الكيميائي من إنتاج شرائح ثنائية البعد في مساحات أكبر (بين 50nm و 200nm) كما يمكن التحكم في توحيد السمك و وتناسق السطح ، لكن في المقابل تنتج شرائح منخفضة الكفاءة بسبب التغييرات التي تطرأ على الشبكة البلورية لكبريتيد المولبيدينيوم نتيجة الإقحام الذري للأيونات ، وفي حالات قصوى قد يؤدي الإقحام الذري لأيونات الليثيوم إلى فقدان نصف الناقل لخواصه وتحوله إلى معدن (بنية بلورية 1T). [15]

3-2- الترسيب بالأبخرة الكيميائية (CVD) Chemical vapor deposition :

لقد برز الترسيب بالأبخرة الكيميائية كواحدة من أفضل تقنيات التصنيع أجهزة TMD ذات جودة بلورية كافية وحجم قابل للضبط وسمك وخصائص إلكترونية ممتازة. في تقنية الترسيب بالأبخرة الكيميائية (CVD) يتم تسخين المصادر (وهي مواد صلبة عبارة عن مركبات تحتوي الذرات المطلوب ترسيبها) في درجات حرارة بين 700 و 1000 درجة مئوية ، في أغلب الأحيان يستعمل مسحوق الكبريت S و مسحوق ثلاثي أكسيد المولبيدينيوم MoO_3 كمصادر للكبريت والمولبيدينيوم على الترتيب ، مع استخدام مسند Si/SiO_2 ويقوم غاز الأزوت بدور الناقل للغازات المتطايرة من عملية التسخين حيث ينقل ذرات الكبريت المتطايرة إلى الغرفة الثانية أين يتواجد ثلاثي أكسيد المولبيدينيوم ويتفاعل معه مشكلا MoS_2 و SO_2 اللذان ينقلان بدورهما إلى الغرفة الثالثة أين يوجد المسند حيث تتوضع جزيئات MoS_2 على المسند المسخن لزيادة قوة الإلتصاق بينما يطرد غاز SO_2 خارجا بواسطة غاز النيتروجين N_2 ، تخضع كل هذه العمليات إلى تحكم دقيق لعملية التسخين كما هو موضح في الشكل (2-10) :



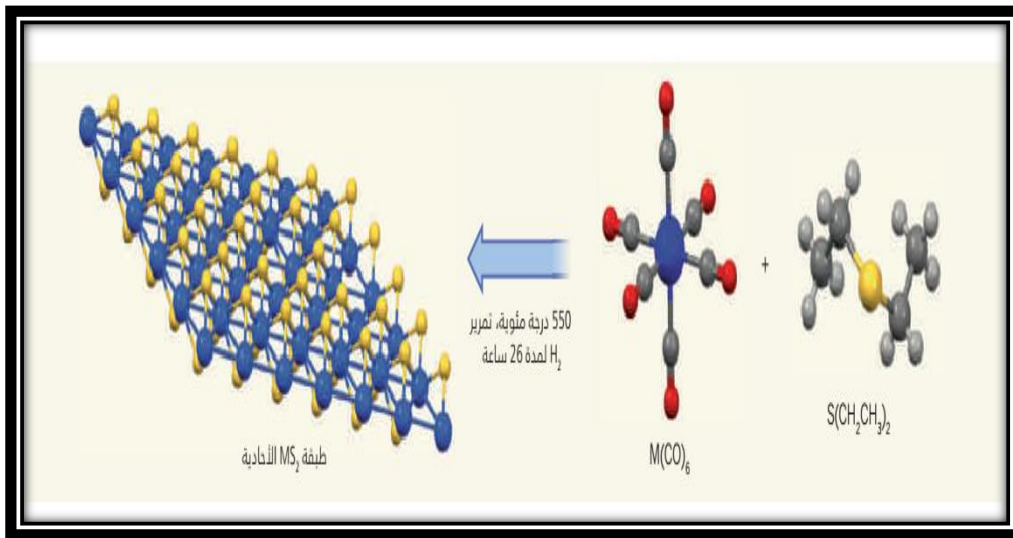
الشكل (2-10): (a) مقطع طولي للغرفة الثلاثة في تقنية (CVD) ، (b) مخطط لنظام التسخين المتبع لترسيب MoS_2 ، (c) رسم توضيحي لطريقة نمو طبقة MoS_2 على مسند من الياقوت. [15]

- يمكن إستخدام مصادر متعددة لترسيب طبقة MoS_2 ثنائية البعد مثل كلوريد المولبيديوم $MoCl_5$ وغاز كبريتيد الهيدروجين H_2S ، كما يمكن إختيار مسند من الغرافين أو الياقوت أو السيليكا.
- تعتبر تقنية (CVD) فعالة للإنتاج الواسع للشرائح ثنائية البعد ل MoS_2 للتطبيقات الذكية ، لكن في المقابل تبقى بعض المواد المستخدمة ملوثة وسامة. [11] [15]

3-3- الترسيب بالأبخرة الكيميائية المعدنية العضوية (MOCVD) metal-organic –chemical vapor deposition

عملية ترسيب الأبخرة الكيميائية المعدنية العضوية تستخدم مركبات سداسي كربونيل المعدن مثل $Mo(CO)_6$ المتوفرة في السوق و المتطايرة والأمنة كمركبات أولية للمولبيديوم ، و أيضا تستخدم كبريتيد ثنائي الإيثيل $(S(CH_2CH_3)_2)$ كمركب أولي للكبريت كما أضاف الباحثون غاز الهيدروجين إلى تيار المركبات الأولية لإزالة الرواسب الكربونية التي تتشكل خلال عملية التمدد. [20]

بهذه الطريقة، تعد طبقات MoS_2 الأحادية على مساحات بالسنتيمترات المربعة، . ويواصل الباحثون إثبات أن السيليكا يمكن ترسيبها على الطبقة الاحادية من معادن الكالكوجينيدات الثنائية الانتقالية، وهذا بعد إجراء أولاً خطوة تمدد في مساحة ترسيب الابخرة الكيميائية المعدنية العضوية أولاً . كما أوضحوا أيضا أن عملية ترسيب الابخرة الكيميائية المعدنية العضوية يمكن تكرارها بعد ذلك، ممأ ينتج عنه طبقات متعددة رقيقة السمك بالمقياس الذري من معادن الكالكوجينيدات الثنائية الانتقالية المعزولة كهربيا. ومن هنا يمكن صناعة هياكل إلكترونية ثلاثية الابعاد، مما يغري بتصنيع دوائر كهربية فائقة الكثافة، وهو ما كان مستحيلا باستخدام إلكترونيات السيليكون التقليدية. [20]



الشكل (2-11): معادلة التحول التي تصف ترسيب طبقة أحادية ل MoS_2 وفق تقنية MOCVD. [20]

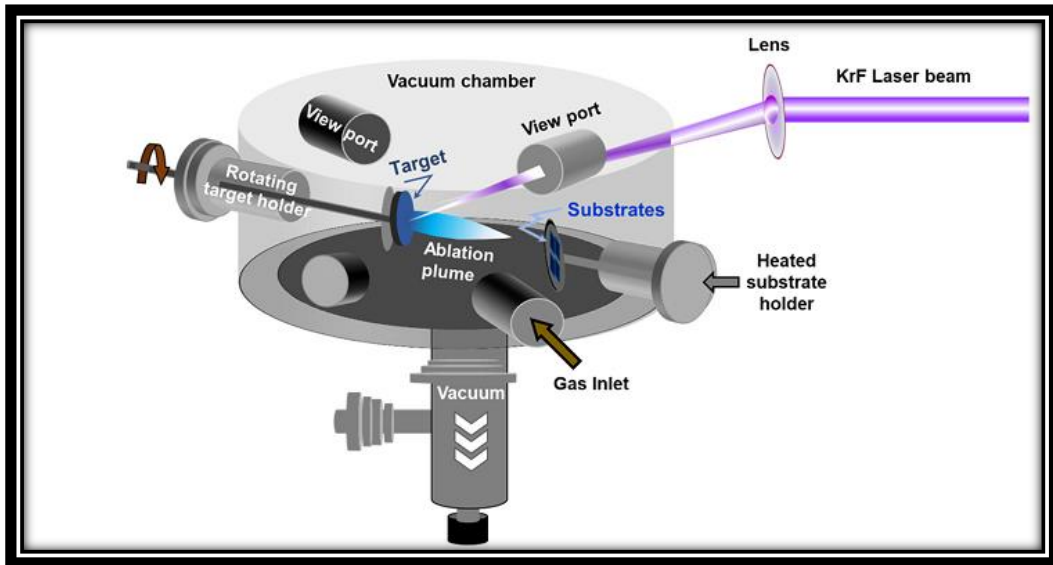
تعد المواد المستخدمة في هذه التقنية آمنة وغير سامة ، كما توفر رقائق بمساحات كبيرة (cm^2) وذات تجانس في السمك ولكن في المقابل ظروف التمدد المثالية تتطلب الحفاظ على درجة حرارة قدرها 550 درجة مئوية على مدار 26 ساعة ، ما يجعل استخدام طبقات سفلية مرنة مثل البلاستيك غير ممكن. [20]

3-4- الترسيب بالليزر النبضي (PLD):

قد برز ترسيب الليزر النبضي (PLD) كواحد من أكثر الوسائل الفيزيائية الواعدة لترسيب الأغشية الرقيقة MoS_2 .

بروتوكول PLD يتمثل في تسليط شعاع ليزر عالي الطاقة مركّز على سطح هدف صلب يتم إستئصالها وترسبها كفيلم على الركيزة، ويؤدي إلى إمتصاص نبضات ليزر قصيرة جدًا (15-20 نانوثانية) وعالية الطاقة بواسطة الهدف وتشكيل عمود البلازما التوجيهي مما يؤدي إلى نمو طبقة رقيقة أحادية. [11]

في عام 2014، تم استخدام PLD بنجاح لتنمية طبقة واحدة إلى عدة طبقات من MoS_2 على طبقات مختلفة ركائز معدنية وأشباه الموصلات والياقوت [11] ، حيث يستعمل طبقات سميكة من MoS_2 شديدة النقاوة كهدف للليزر النبضي ، داخل بوتقة مفرغة من الهواء ، بعد تعرض الهدف لليزر تتشكل البلازما على شكل عمود منعكس على المسند المحضر مسبقا داخل البوتقة المفرغة ، لتنمو طبقة من MoS_2 على المسند ، و يتم التحكم في عملية النمو عن طريق ضبط معلومات الترسيب بواسطة الأنظمة الحاسوبية (طاقة الليزر ، درجة الحرارة ، ضغط البوتقة ، عدد الطبقات ،...) كما هو موضح في الشكل (2-11) .



الشكل (2-11): رسم توضيحي لتقنية الترسيب بالليزر النبضي (PLD). [11]

تمكن هذه التقنية من الحصول على شرائح عالية الجودة للتطبيقات عالية الأداء و بمساحات كبيرة مع الحفاظ على البنية البلورية للطبقة حتى مع إستعمال هدف متعدد العناصر، كما تتميز هذه التقنية بسرعة ترسيب الطبقة حيث تعد الأسرع من بين التقنيات حتى الآن. [11]

يجدر الذكر أنه يمكن إستعمال مواد مختلفة كأهداف للحصول على طبقة أحادية من MoS_2 مع مساند مختلفة مثل: - مسحوق ($MoS_2 + S$) لمساند الغرافين أو ألياقوت أو ثلاثي أكسيد الألمنيوم .
 Al_2O_3

- ($MoS_2 + poly(vinyl chloride)PVC$) لمساند n-Si و p-Si و التنجستين [11].W

5-3-المقارنة بين طرق ترسيب MoS_2 المتبعة:

عرجنا في العناوين السابقة على أهم الطرق المتبعة لترسيب طبقات أحادية ل MoS_2 ، لكن لا يمكن الجزم أيها أفضل وذلك بسبب مزايا وعيوب كل طريقة ،يفضل Driss Mouloua وآخرون [12] تقنية CVD باعتبارها تمكن من الحصول على شرائح أحادية الطبقة بتكلفة مقبولة مقارنة بالجودة العالية ، و لذا نستطيع تلخيص كل ذلك في الجدول التالي :

التحديات	المزايا	التقنية	
-وقت المعالجة طويل بين 8 و84 ساعة. -لا يمكن التنبؤ بالنتائج لصعوبة السيطرة عليها .	-جودة عالية للبلورات -درجة نقاوة عالية -تكلفة منخفضة وبساطة التقنية	التقشير الميكانيكي	الترسيب بالتقشير
- إمكانية فقدان شبه الموصل لخصائصه بسبب الإقحام الأيوني	- إمكانية تنمية طبقات أحادية بمساحات كبيرة.	التقشير الكيميائي	
- سُمية المواد المستعملة - تتطلب درجة حرارة عالية مايزيد التكلفة. - لا يوجد تجانس جانبي - إختلاط الطورين 2H و 1T.	- جودة عالية للطبقة - نمو على مساحات بالسنتمترات - التحكم الجيد في الشكل	الترسيب بالأبخرة الكيميائية CVD	
- تكلفة عالية - وجود بعض بعض الجزيئات على السطح	- نقل عالي الجودة وصادق لعناصر الشريحة - سيطرة على عمليات الترسيب - ترسيب في درجة حرارة الغرفة. - التحكم في مستوى النانومتر للسلك. - شرائح للإلكترونيات الدقيقة.	الترسيب بالليزر النبضي PLD	

الجدول(2-6):المقارنة بين طرق ترسيب MoS_2 المعتمدة. [11] [15] [20]

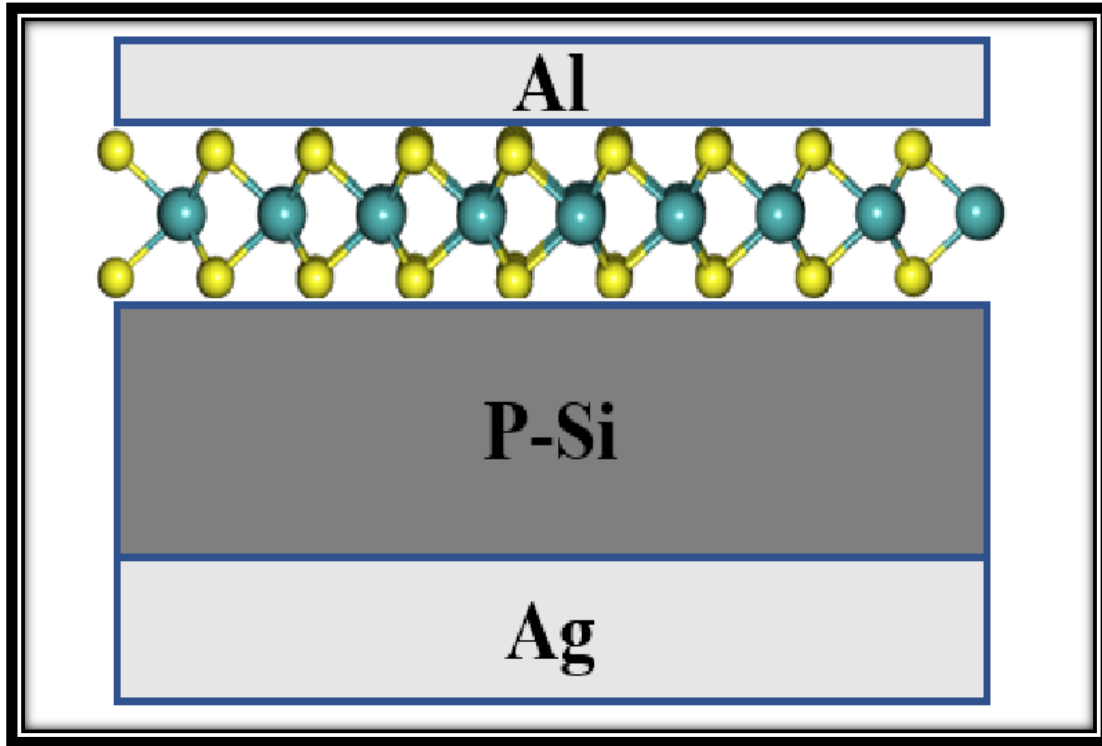
4-تطبيقات شرائح كبريتيد الموليبدنيوم

1-4-تحسين الخلايا الشمسية:

ظهرت شرائح كبريتيد الموليبدنيوم في الآونة الأخيرة كمواد واعدة لتحسين كفاءة الخلية الشمسية وذلك لسببين رئيسيين هما :

- القدرة الفريدة على التحكم في قيمة النطاق الطاقى المباشر من 1.12eV إلى 1.9eV [11] . كما يمكن جعل نطاق الطاقة مباشر أو غير مباشر .
- معامل الإمتصاص العالي الذي يصل إلى 10^5cm^{-1} في جميع الأطياف الشمسية المرئية و القريبة من فوق البنفسجية [11] .

بسبب هاتين الخاصيتين أصبح MoS_2 مغري جدا لصناعة خلايا شمسية بكفاءة أكبر ، وقد تعددت تصميمات الخلايا التي إستخدمت كبريتيد الموليبدنيوم، ولذلك سنعرض أبسط التصاميم كما هو موضح في الشكل (2-13) :

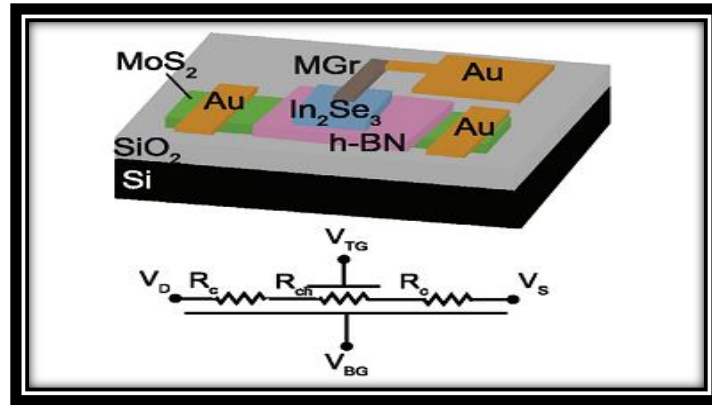


الشكل(2-13): خلية شمسية $n\text{-MoS}_2/p\text{-Si}$ [11].

تمثل طبقة MoS_2 المنطقة n بينما الطبقة Si المنطقة p، وسجلت هذه الخلية كفاءة قدرها 19.82% وكثافة تيار دارة قصيرة $J_{sc}=36.76\text{ mA/cm}^2$ وجهد دارة مفتوحة مرتفع $V_{oc}=0.64\text{V}$ [12] حيث تتعبر هذه الخواص مغرية جدا بالنسبة لطبقة بسمك 0.33 nm من MoS_2 ، مع الوفرة للمواد (الموليبدنيوم والكبريت) [11].

2-4- الإلكترونيات الدقيقة:

بسبب النحافة الفائقة لشرائح MoS_2 وإمكانية تمددها إلى عشرات السنتيمترات إستطاع المصنعون الحصول على دوائر إلكترونية صغيرة بكفاءة عالية تفوق تلك التقليدية من حيث سرعة في المعالجة وتخزين المعلومات وإمكانية تقليل أبعاد الأجهزة لمواجهة التحسن الهائل في تكنولوجيا المعلومات، يجب أن تتمتع بنية الحواسيب في المستقبل بإمكانية توسيع استثنائية وأن تتضمن قدرات متعددة الأوجه مثل المنطق والذاكرة والاستشعار، القائم على المواد ثنائية الأبعاد ، وفي هذا الصدد برزت ترانزستورات ذات التأثير الحثلي (FET) ل MoS_2 لما تتميز من نحافة فائقة وحساسية عالية للمجالات الخارجية حتى عند بوابة ذات طول 1 نانومتر، هناك عدة تصاميم لترنستور ذو التأثير الحثلي ثنائي البوابة " (DGFET) double-gate field-effect transistors " و الشكل (14-2) يوضح أحد هذه التصاميم حيث يمثل $In_2 Se_3$ بوابة علوية أما الركيزة Si بمثابة بوابة خلفية مشتركة: [21] [22]



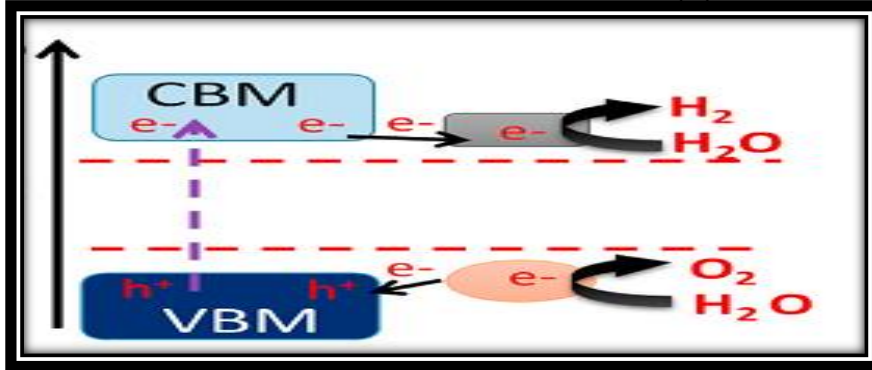
الشكل (14-2) : تصميم لصمام ثنائي البوابة DGFET. [21]

3-4- MoS_2 كمحفز ضوئي:

❖ التحليل الكهروضوئي " photoelectrochemical (PEC) " للماء :

في السنوات الأخيرة إزداد الطلب على غازي الهيدروجين والأكسجين وذلك بسبب التوجه البيئي نحو الوقود الأخضر، لذا فكر الباحثون في طرق جديدة إقتصادية وغير ملوثة لإنتاج الغازين ومن هنا برزت أنصاف النواقل حيث تتميز أنصاف النواقل بقدرتها على تحويل الفوتونات الضوئية إلى زوج إلكترون-ثقب (المعادلة 1) ،إذن يمكن إستغلال ذلك من أجل تحليل الماء إلى غازي الأكسجين O_2 والهيدروجين H_2 ،حيث تعمل الثقوب في المنطقة p على إرجاع لجزيئات الماء منتجة غاز الأكسجين(المعادلة2) ، في المقابل تعمل الإلكترونات في المنطقة n على أكسدة الماء لإنتاج غاز الهيدروجين(المعادلة 3) وتسمى هذه العملية التحليل الكهروضوئي للماء (PEC). [15].





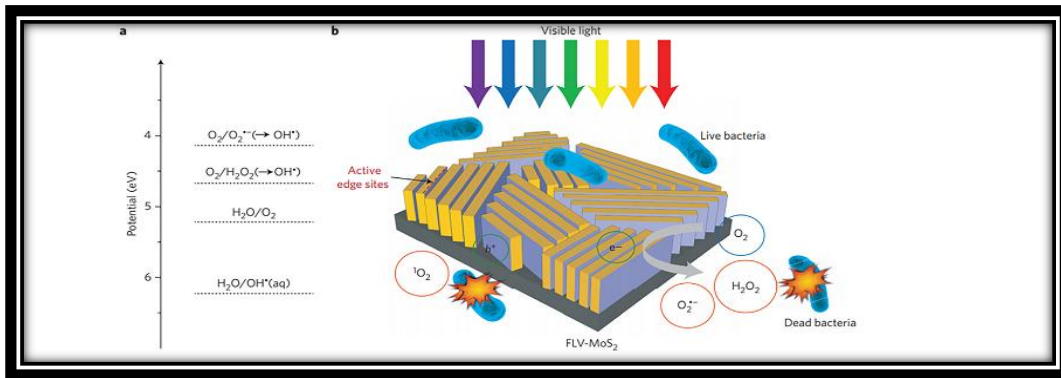
الشكل (2-15): عملية التحليل الكهروضوئي للماء PEC [15].

- تستعمل في هذه العملية شرائح MoS_2 على شكل أوراق نانوية أو يمكن جعلها على شكل أنابيب نانوية من خلال ترسيبها على ألياف الغرافين النانوية وذلك لزيادة مساحة التفاعل.
- بنفس مبدأ العمل السابق يمكن إنتاج غازات وأيونات مختلفة وذلك بإختيار المحلول المناسب .

❖ MoS_2 كمرشح للماء :

يمكن لأنصاف النواقل تطهير الماء من البكتيريا والملوثات العضوية وذلك بتحليلها عن طريق الأكسجين المنار (التفاعلي) الذي يرمز له بالرمز O_2^- ، والذي يهاجم البكتيريا والملوثات العضوية ويقوم بتحليلها والتخلص منها ، يتميز كبريتيد الموليبدنيوم بخواص بنيوية تمكنه أخذ شكل مسامي أو هرمي وذلك مناسب لأجهز الترشيح ، حيث أثبتت أجهزة الترشيح ل MoS_2 نسبة تطهير بلغت 90.4% في درجة الحرارة الإعتيادية [15].

أثبتت شرائح MoS_2 قدرة عالية على التنظيف الذاتي بسبب المقاومة العالية للاحتكاك والخدش ما يجعل أجهزة الترشيح المعتمدة عليها ذات كفاءة عالية لمدة طويلة . [15]



الشكل (2-16): آلية عمل تطهير الماء بواسطة كبريتيد الموليبدنيوم والتفاعلات الحادثة للحصول على

الأكسجين التفاعلي O_2^- . [15]

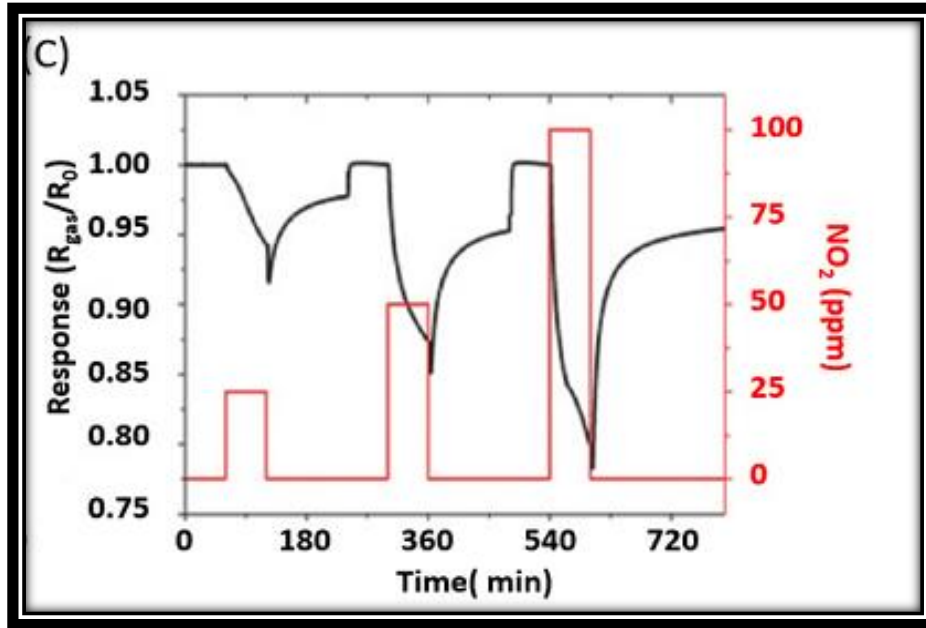
MoS₂-4-4 للكشف عن الغازات:

تتغير الخواص الكهربائية لشرائح MoS₂ عند تعرضها للغازات حيث يمكن إستشعار ذلك عن طريق قياس مقاومتها ، باعتبار R_a مقاومة الشريحة في الهواء الطبيعي ، و R_g هي مقاومة الشريحة بعد تعرضها لغاز معين يمكن حساب S حساسية جهاز كشف الغاز وفق العلاقة (1-2): [11]

$$(1-2) \quad S = \frac{R_a - R_g}{R_g}$$

حيث أظهرت أظهرت أجهزة الكشف عن الغازات المعتمدة على MoS₂ حساسية عالية للغازات السامة في درجات الحرارة الإعتيادية مثل CH₄, NH₄, NO, NO₂, CO, CO₂ وغيرها ، و بلغت حساسية الأجهزة المعتمدة على الترانزستور ذو التأثير الحثي لغاز أول أكسيد النيتروجين (NO) 0.8ppm (أي 0.8 جزء من المليون) وهي حساسية عالية . [11]

يظهر الشكل (17-2) تغيرات المقاومة نتيجة تعرض الجهاز لغاز ثنائي أكسيد الآزوت NO₂ :



الشكل (17-2): تغيرات المقاومة ومراحل ضخ غاز NO₂. [11].

نظرا للخواص الفريدة والتطبيقات الواعدة لكبريتيد الموليبدنيوم MoS₂ التي ذكرنا أغلبها في هذا الفصل فإن كبريتيد الموليبدنيوم يعد أهم مادة في كالكوجينات المعادن الإنتقالية وقد تغلب على الغرافين في بعض خواصه ، وهو ماجعله المادة الأكثر إهتماما لصناعة المواد ثنائية البعد في السنوات الأخيرة ، ما يجعل آفاق تطبيقاته واسعة وغير مسبوقه مستقبلا ، وبهذا الصدد توجب علينا التعمق أكثر في خواصه عن طريق التجريب المخبري والإفتراضي عن طريق المحاكاة من أجل الإستغلال الأمثل لهذه المادة المميزة.

الفصل الثالث :

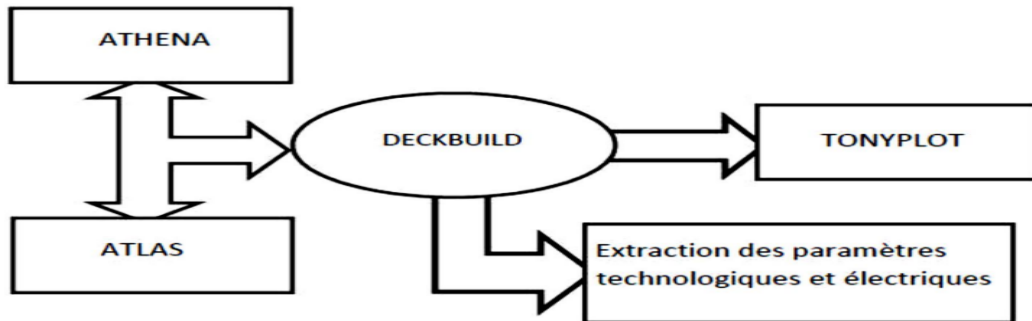
المحاكاة وفق برنامج **Silvaco-Atlas**

1- نظرة عامة حول برنامج Silvaco-TCAD :

برنامج Silvaco هو برنامج لشركة Silvaco International التي مقرها في سنتا كلارا كاليفورنيا، وهي شركة رائدة في البرمجيات تهيمن على سوق أجهزة أتمتة التصميم الإلكتروني (EDA) (Electronic design automation) ولها عدة فروع في أمريكا الشمالية وأوروبا وآسيا. [23]

سنة 1984 قام الدكتور إيفان بيسيتش "Dr. Ivan Pesic" بإنشاء أول إصدار لبرنامج Silvaco-TCAD حيث تعني TCAD تعني التصميم التكنولوجي بمساعدة الكمبيوتر "Technology Computer Aided Design" و SILVACO تعني شركة وادي السليكون "SiliconValley Corporation" وهو عبارة عن مجموعة من الوحدات التي تسمح بالمحاكاة الفيزيائية للمركبات والأنظمة الإلكترونية المكونة من أشباه الموصلات حيث أداة الحساب للبرنامج تحل المعادلات التفاضلية المتعلقة بفيزياء المركب مثل تلك المتعلقة بالانتشار أو النقل في حالة عدم وجود استمرارية هندسية، يمكن لهذا البرنامج أن يصمم ليس فقط السلوك الكهربائي و الخواص البصرية والحرارية للأجهزة، ولكن أيضًا العمليات التكنولوجية للهياكل الإلكترونية مثل الترسيب والتطعيم عن طريق الزرع أو الانتشار وبالتالي فإن عمليات المحاكاة هذه تجعل من الممكن تحسين معلمات التصنيع المختلفة وللتنبؤ بسلوك الأجهزة شبه الموصلة، وخاصة الخلايا الشمسية. [23] [24] [25]

يحتوي البرنامج على عدة وحدات فرعية للمحاكاة الفيزيائية مثل : MERCURY ,ATHENA, ATLAS SSUPREM3,.... إلخ، كل وحدة من هذه الوحدات تحاكي عمليات مختلفة تم تجميعها من خلال بيئة واحدة تدعى DECKBUILD [26]، حيث يمكن توضيح هذا الترابط المعقد في الرسم التوضيحي (1-3)

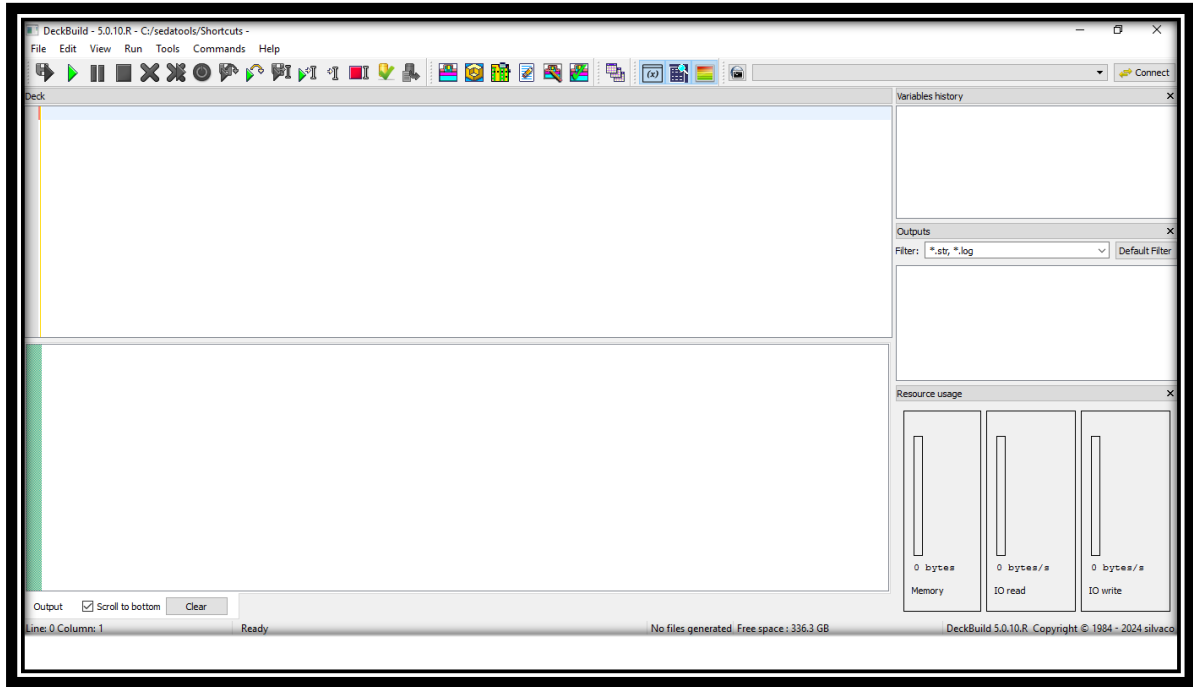


الشكل (1-3): رسم توضيحي للعلاقة بين وحدات برنامج SILVACO. [24]

1-1- وحدات برنامج Silvaco-TCAD:

• DECKBUILD :

هي عبارة عن بيئة تتيح للمستخدم واجهة تفاعلية لكتابة برنامج المحاكاة ، وتعتبر النافذة الرئيسية للبرنامج ، حيث يمكن من خلالها التحكم في جميع الوحدات الفرعية الأخرى



الشكل (3-2) : صورة لنافذة الوحدة DECKBUILD.

تنقسم الوحدة DECKBUILD أساسا من نافذتين هما : [24]

- ✓ نافذة الأوامر (Deck Window) : لأدخال الأوامر .
- ✓ نافذة النتائج (output Window) : لإظهار النتائج .

• الوحدة أثينا ATHENA :

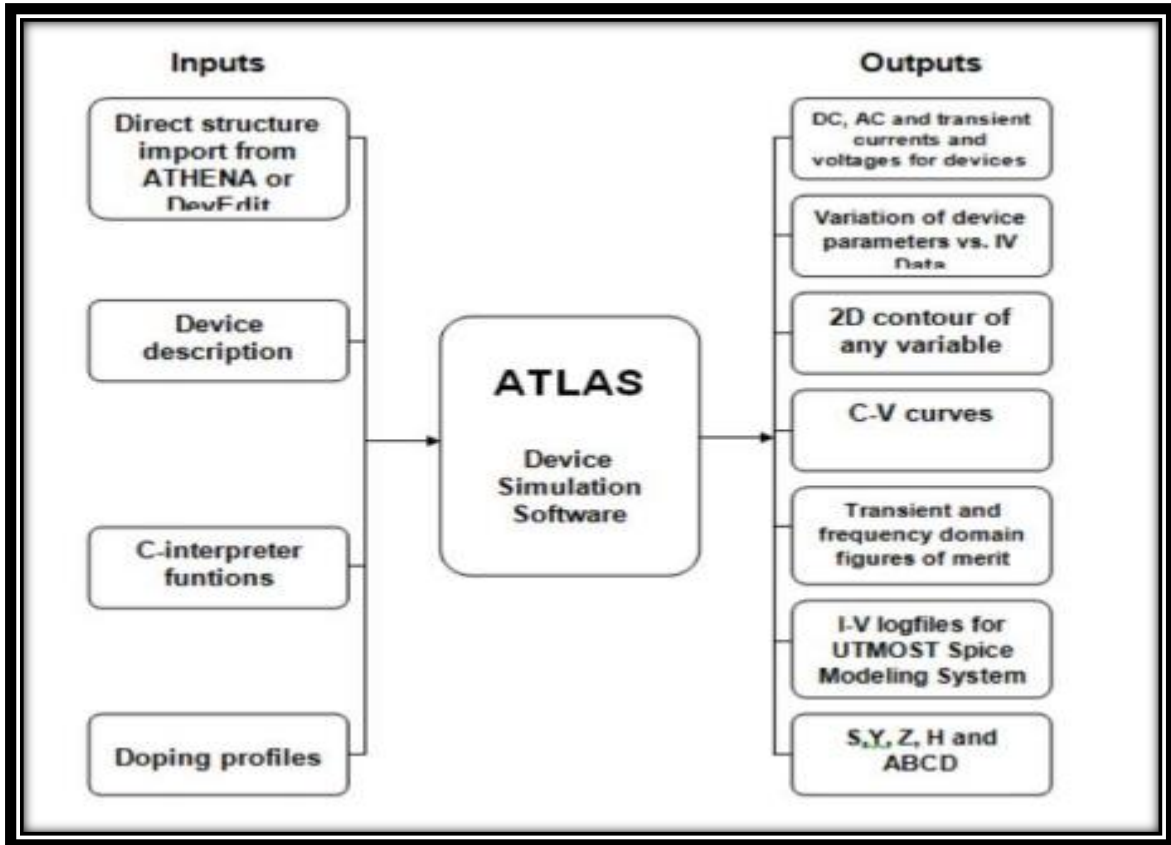
يوفر برنامج محاكاة ATHENA إمكانيات عامة لمحاكاة الطرق المستخدمة في صناعة أشباه الموصلات مثل: الانتشار، الأكسدة، زرع الأيونات، الحفر، وطرق الترسيب. كما يسمح بإجراء عمليات محاكاة سريعة ودقيقة لجميع خطوات التصنيع المستخدمة في التكنولوجيا CMOS، ثنائي القطب Bipolar، SOI، MEMS، والالكترونيك البصريات، كما يوفر معلومات هامة عن تصميم وتحسين الطرق التكنولوجية مثل: تركيز حاملات الشحنة، عمق الوصلة وغيرها مما يوفر تكلفة محاولات التصنيع المكلفة جدا. [23] [24] [25]

يجدر الذكر أن برنامج أثينا صمم وطور بالإعتماد على برنامج SUPREM الخاص بجامعة ستانفورد والذي يعتبر من أوئل البرامج لمحاكاة طرق تصنيع مركبات أنصاف النواقل. [26]

• الوحدة أطلس ATLAS :

برنامج المحاكاة ATLAS هو المحاكاة لنموذجة ثنائية أو ثلاثية الأبعاد للمركبات، والتي يمكنها التنبؤ بالخصائص الكهربائية لمعظم المركبات النصف الناقلة في حالة نظام مستمر، متغير، او متكرر، بالإضافة الى السلوك الكهربائي (الخارجي)، حيث يوفر معلومات عن التوزيع الداخلي للمتغيرات مثل تركيز حاملات الشحنة، خطوط التيار، الحقل الكهربائي والجهد الخ، وكذا جميع المعطيات المهمة من اجل تحسين وتطوير الطرق التكنولوجية. و يتحقق ذلك عن طريق حل معادلة بواسون رقميا ومعادلات استمرارية الإلكترونات و الثقوب في عدد محدد من النقاط التي تشكل هيكل البنية المحددة من قبل المستخدم (التقطيع) وهذا يعني أن أطلس يمكنه محاكاة إستجابة أي جهاز قائم على شبه موصل سواء في البعد الثلاثي أو الثنائي مهما كان الإستقطاب المباشر أو غير المباشر. [24] [26]

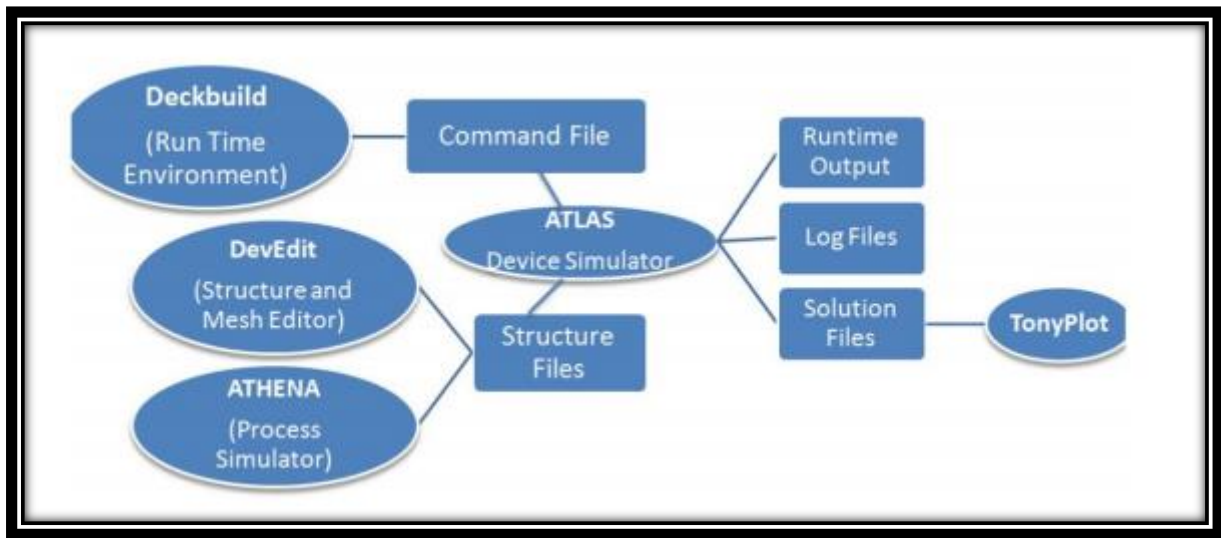
بدوره برنامج أطلس يتطلب مدخلات وهي مجموعة من الأوامر والمعطيات يجب إدخالها عند المحاكاة و يظهره بعد المحاكاة على شكل نتائج مباشرة أو ملفات تدعى المخرجات ، والمخطط في الشكل (3-3) يوضح مدخلات ومخرجات برنامج أطلس :



الشكل (3-3) : رسم توضيحي لمدخلات ومخرجات برنامج أطلس. [23]

خلال عملية المحاكاة يستعمل برنامج أطلس عدة برامج أخرى مثل [24]:

- ✓ DEVEDIT :و يمثل البيئة التي يتم فيها رسم البنية (البعد ، التطعيم ،..). والشبكة.
- ✓ Deckbuild : و يمثل البيئة التي يتم فيها تحديد برنامج المحاكاة البنية والشبكة .
- ✓ TONYPLOT :ويمثل البيئة التي يتم فيها تصور نتائج المحاكاة (بنية المركب ،الخصائص
- ✓ الكهربية..).
- ✓ MASKVIEW :محرر التخطيط.
- ✓ OPTIMIZER : يحسن ثوابت البنية حتى نتحصل في الأخير على قيمة الثوابت المحددة مسبقاً.



الشكل (3-4) : بنية البرامج التي يستخدمها أطلس خلال المحاكاة. [23]

• الوحدة TONYPLOT:

هي أداة رسم لمرحلة ما بعد المعالجة للإستخدام مع جميع محاكيات Silvaco والأدوات التفاعلية مثل DeckBuild أو VWF أو SPDB ، ويوفر TonyPlot قدرات شاملة لعرض وتحليل مخرجات المحاكاة و مجموعة واسعة من الرسوم المدعومة. [24]

بما في ذلك الرسومات ثنائية أو ثلاثية الأبعاد، مع البائانات X-Y ذات المحاور الخطية أو اللوغاريتمية ، والبيانات القطبية أو السطحية ، والمقطع العرضي، بالإضافة إلى ذلك، يمكن تحميل ملفات متعددة وتراكبها في أرضية واحدة للمقارنة. بالإضافة إلى ذلك، فهو يدمج المقطع العرضي D1 للمخططات ثنائية الأبعاد، والمساطر، والمسبارو أدوات التكامل وغيرها من الأدوات. وأخيراً وليس آخراً، يتيح برنامج TonyPlot إمكانية قطع مخططات الهياكل ثنائية الأبعاد بواسطة شريحة D1 متعددة يتم التحكم فيها بشكل مستقل. [26]

1-2-منطق البرمجة:

تتم المحاكاة باستعمال أطلس وفق تسلسل منطقي للأوامر يجب إحترامه وإلا سيظهر لنا البرنامج رسالة تشير إلى وجود خطأ ، ويمكن تقسيم هذه الأوامر إلى خمس مجموعات كما تظهر في الجدول (1-3) :

الأوامر المستعملة	الخطوة	الترتيب
- Mesh - Region - Electrode -Doping	تحديد البنية	1
- Material - Models - Contact -Interface	تحديد المواد والنماذج الفيزيائية المستعملة	2
-Method	تحديد طرق الحل الرقمية	3
- Log - Solve - Load -Save	تخصيص الحلول	4
- Extract -Tonyplot	إظهار النتائج	5

الجدول(1-3) : الترتيب المنطقي لمجموعة الأوامر الأساسية في برنامج أطلس .[26]

2-خطوات المحاكاة:

نهدف في هذه الدراسة إلى محاكاة خلية شمسية n-MoS₂/p-Si ، ومعرفة تأثير السُمك والتطعيم للطبقتين n و p وكذلك تأثير شدة التطعيم على خواص الخلية وعليه تكون الخطوات كالاتي :

1-2-تحديد البنية:

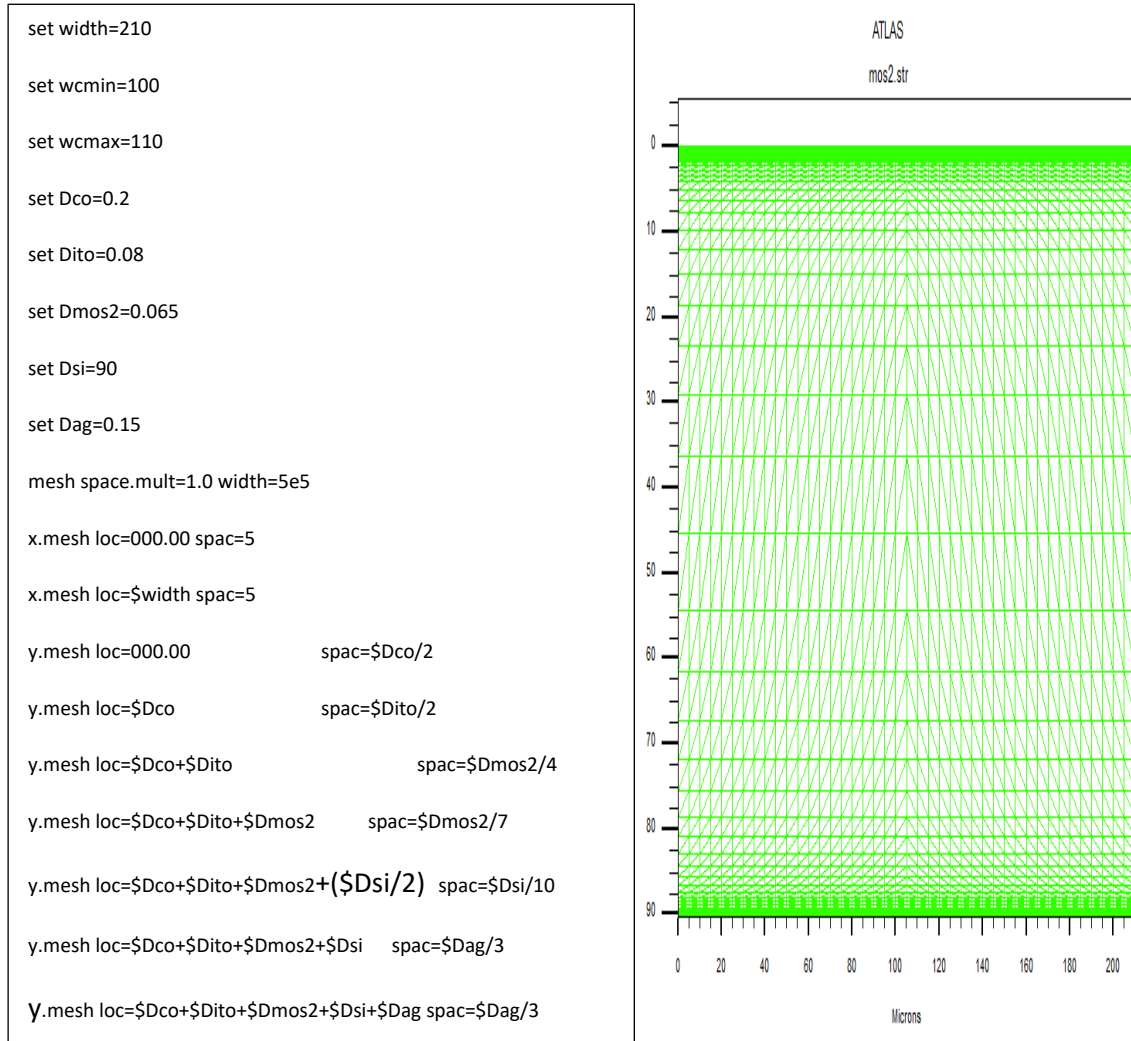
يتم تعريف البنية في برنامج سيلفاكو وفق خطوات محددة وبترتيب محدد كالاتي :[26]

- ✓ يجب تعريف الشبكة أولاً التي تعتبر أساس الحسابات الرقمية .
- ✓ توزيع المواد المتواجدة في البنية حسب كل منطقة.
- ✓ تعريف الإكترودات والمواد المشكلة لها و أماكنها كذلك.
- ✓ نوع التطعيم وتوزيعه في البنية.
- ✓ خصائص المواد.

❖ الشبكة : يجب تحديد ثلاثة معلومات مهمة وهي إتجاه الخطوط (عمودي Y أو أفقي X) و مواقع الخطوط (location) ثم الخطوات بينهما (spacing) والتي توضح المسافة بين الخطوط الثانوية بالميكرو متر .[24]

$x.mesh\ location=<value>\ spacing=<value>$
 $y.mesh\ location=<value>\ spacing=<value>$

تظهر لنا الشبكة بعد التقسيم المناسب على النحو التالي:



الشكل (3-5) : شبكة البنية المحددة للخلية $n-MoS_2/p-Si$.

تعتمد دقة المحاكاة على حالة الشبكة في حالة شبكة متباعدة العقد تنتج محاكاة سريعة، ولكن النتائج أقل دقة أما في حالة شبكة متقاربة العقد تنتج محاكاة بطيئة، لكن نتائج أكثر دقة.

يجب مراعاة الحد الأقصى من العقد حيث لا يجب أن يتعدى عددها في المحاكاة ثنائية البعد 100000 عقدة أما في الثلاثية البعد فالحد الأقصى هو 20 مليون عقدة مع عدم تجاوز البعد z 2000 عقدة. [26]

❖ تحديد المناطق:

بعد تعريف الشبكة، من الضروري تعريف المناطق من خلال الأمر Region ثم تحديد (رقم المنطقة ،حدود المنطقة و طبيعة المادة المكونة لها) على النحو التالي:

paramètres > REGION nombre = <integer><material_type>< position de

يمكن تحديد حتى 1000 منطقة كحد أقصى سواء كانت المحاكاة ثنائية البعد أو ثلاثية .

```

region number=1 x.min=0 x.max=$width
y.min=0 y.max=$Dco material=void

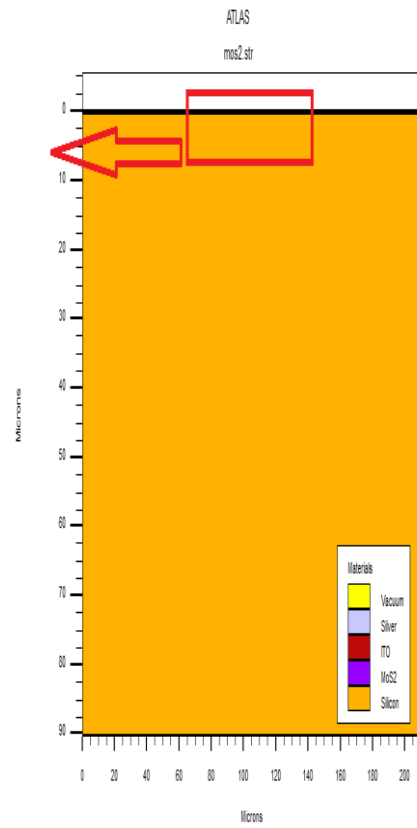
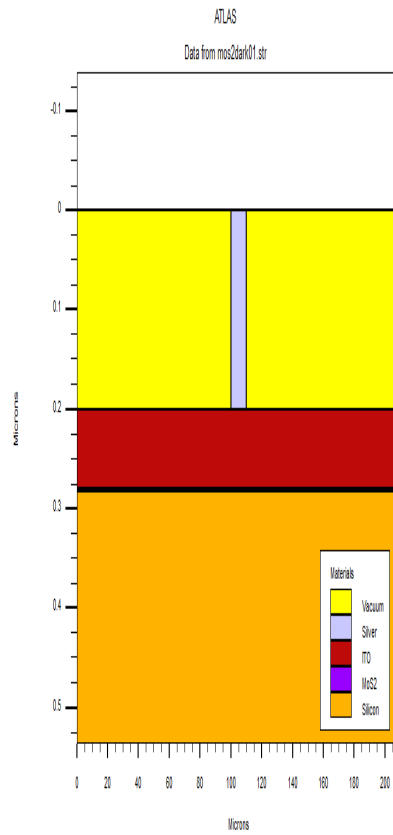
region number=2 x.min=$wcmin
x.max=$wcmax y.min=0 y.max=$Dco
material=silver

region number=3 x.min=0 x.max=$width
y.min=$Dco y.max=$Dco+$Dito
material=ITO

region number=4 x.min=0 x.max=$width
y.min=$Dco+$Dito
y.max=$Dco+$Dito+$Dmos2 name=MoS2
user.material=MoS2

region number=5 x.min=0 x.max=$width
y.min=$Dco+$Dito+$Dmos2
y.max=$Dco+$Dito+$Dmos2+$Dsi
material=Silicon

region number=6 x.min=0 x.max=$width
y.min=$Dco+$Dito+$Dmos2+$Dsi
y.max=$Dco+$Dito+$Dmos2+$Dsi+$Dag
material=silver
    
```



الشكل (3-6): شكل البنية بعد تحديد المناطق .

❖ تحديد الإلكترودات:

هناك نوعان من الإلكترودات يمكن تعريفهما في محاكاة اطلس هما : [26]

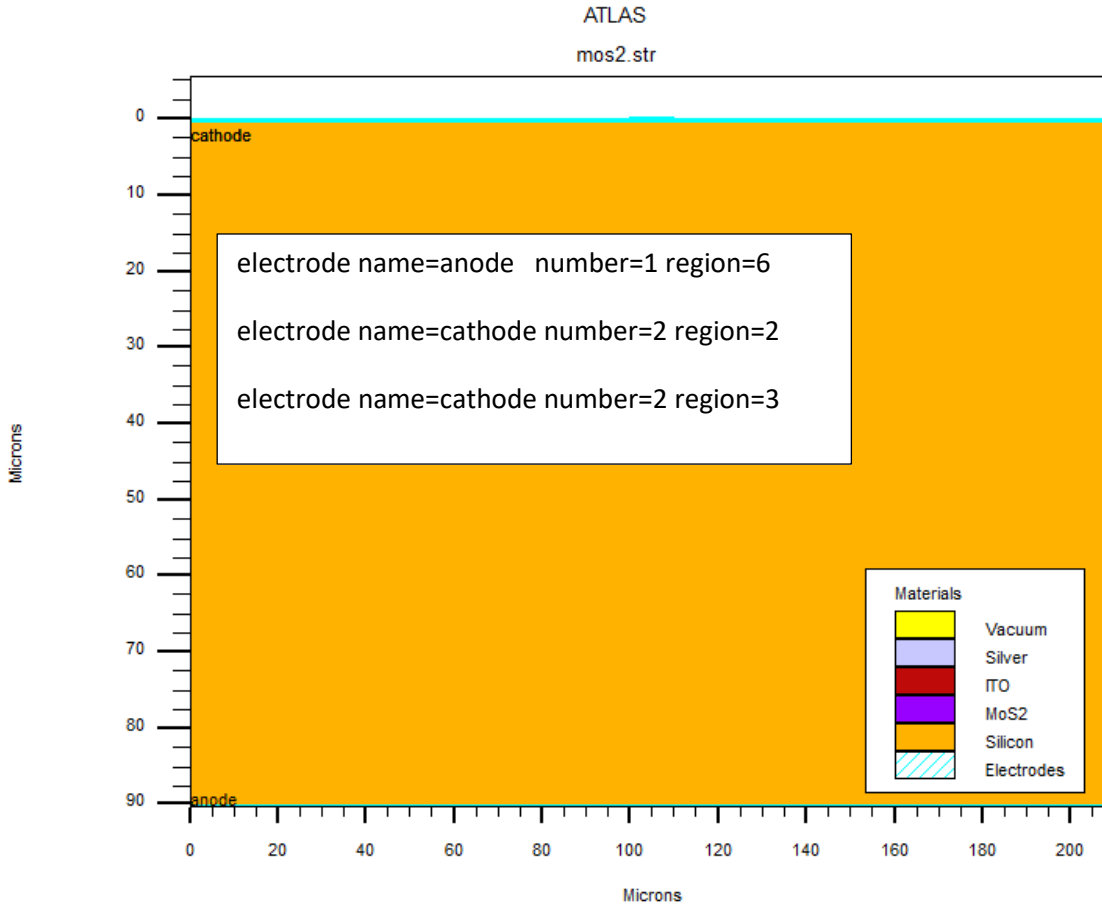
✓ وهمية لا تؤثر على مسار الضوء الساقط على الخلية ولا على شدة امتصاصه ، حيث تعرف على بعد واحد فقط (X) على النحو التالي:

ELECTRODE NAME=<electrode name> <top x.min= x.max= >

✓ حقيقة تؤثر على مسار الضوء الساقط على الخلية وعلى شدة إمتصاصه ، حيث تعرف على بعدين X و Y على النحو التالي :

ELECTRODE NAME=<electrode name> < x.min= x.max= y.min= y.max = >

تظهر بنية الخلية بعد تحديد الإلكتروودات على نافذة TonyPlot كما هو موضح في الشكل (7-3) :



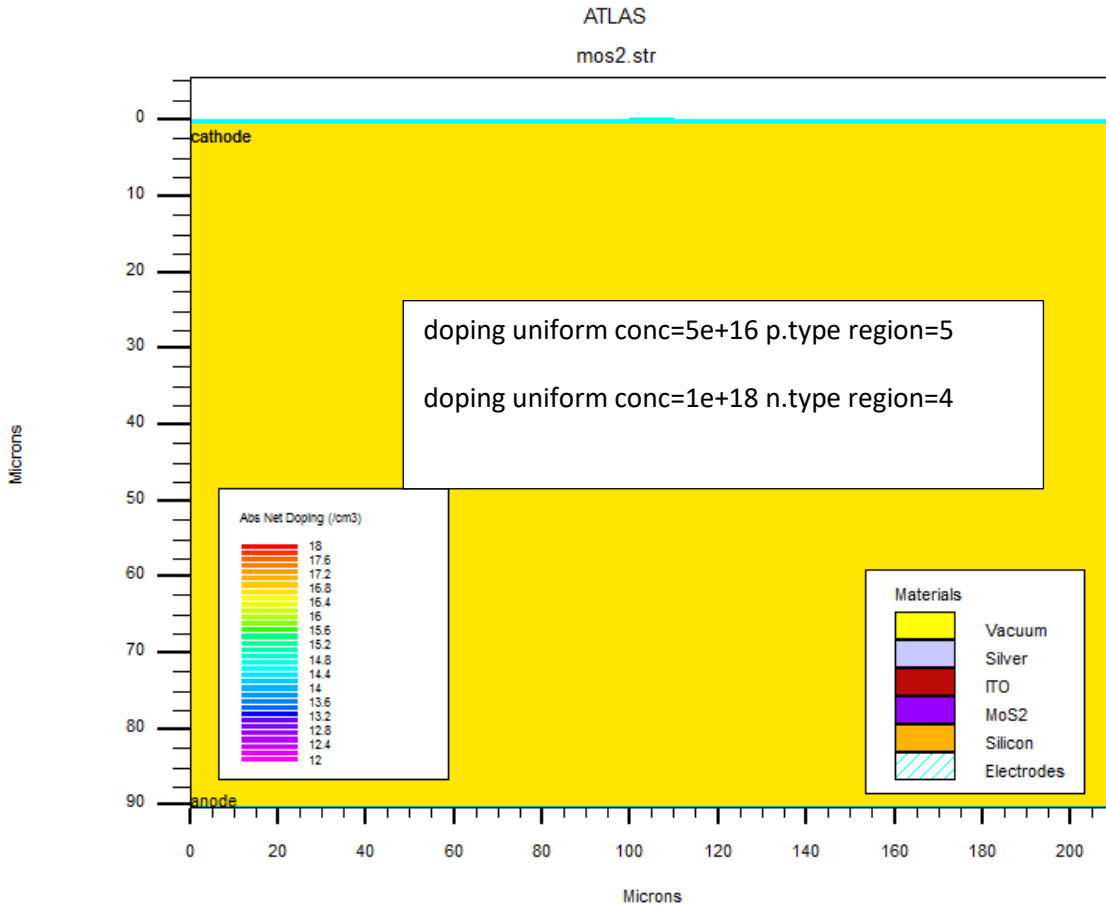
الشكل (7-3) : شكل البنية بعد تحديد الإلكتروودات .

❖ تحديد التطعيم :DOPING

يحدد التطعيم على النحو التالي : [24]

DOPING <distribution type> <dopant type> <position parameters>

يظهر تركيز التطعيم على نافذة Tony Plot على النحو الموضح في الشكل (8-3) :



الشكل (8-3) : توزيع التطعيم في البنية .

2-2- تحديد المواد والنماذج الفيزيائية:

❖ تحديد الوصلات المستعملة :

تحدد الوصلات من خلال الأمر contact وتعرف طبيعتها (أومية بأمر Neutral ، أو يجب تعريف طاقة الإنتزاع (Work function) [26]

❖ تحديد المواد :

يمتلك أطلس قاعدة بيانات كبيرة للمواد ،حيث بمجرد ذكر المادة أثناء تحديد المناطق يعرف خواصها القياسية ، في نفس الوقت يمنحنا الفرصة لتعريف مواد جديدة ، حيث يتم تعريف المواد على النحو التالي :

MATERIAL < localisation >< définition du matériau >

يمكن تعريف عدة ثوابت أخرى بواسطة MATERIAL مثل: نطاق الطاقة " EG300 " ،
السماحية " PERMITIVITY " ، الألفة الإلكترونية " AFFINITY " ، حركية الإلكترونات " MUN " ،
حركية الثقوب (MUP ،) ، كثافة الحالات لحزمة التوصيل E_C NC300 وكثافة الحالات
لحزمة التكافؤ E_V "NV300" [24].

مثال : MoS_2 غير معرف في قاعدة بيانات أطلس وقمنا بتعريفه على النحو التالي :

```
material material=MoS2 index.file=MoS2.nk EG300=1.9 affinity=4.2
NC300=2.2e18 NV300=1.8e19 permittivity=8 mun=150 mup=86
out.index=RMoS2 user.group=semiconductor
```

ملف MoS2.nk المعرف في الصيغة السابقة أنشأ بالاعتماد على بيانات من المصدر [27]

❖ النماذج الفيزيائية :

يتم إختيار النماذج الفيزيائية وفق معايير معقدة تأخذ بعين الاعتبار خواص المواد المستعملة
من أجل الوصول إلى محاكاة واقعية ، كما يجنبنا الاختيار الصحيح للنماذج الفيزيائية الحسابات
الإضافية وبالتالي إقتصاد الوقت والجهد. [26]

نعرف النماذج الفيزيائية في أطلس على النحو التالي: [25]

MODEL< paramètres générales >< paramètres du modèle >

وهناك العديد من النماذج مثل : Bipolar ، CONMOB،SRH FLDMOB ، إلخ

مثال : عرفنا النموذج الفيزيائي كالاتي :

```
models bipolar temperature=300 print
```

2-3- الطرق الرقمية للحل:

هناك ثلاث طرق رقمية للحل في برنامج أطلس هي: [26]

- طريقة **Gummel**: هي أبسط الطرق تعتمد التقارب الخطي ، حيث تحل المعادلات لكل متغير على حدة.

- طريقة **Newton**: تستعمل في المعادلات الأسية ، و يكون التقارب من الدرجة الثانية ، تحل المعادلات لجميع المتغيرات معا ، وتستغرق وقتا أكثر مقارنة مع طريقة Gummel.
- طريقة **Block**: تستعمل في نماذج التسخين ، حيث تحل المعادلات الثلاثة بطريقة Newton ثم تحل معادلة التدفق الحراري على حدة.

يمكن إستعمال أكثر من طريقة معا مثل استعمال طريقتي غامال ونيوتن على النحو التالي :

method newton gummel

2-4- تخصيص الحلول وعرض النتائج:

❖ تخصيص الحل :

يعطى الأمر بالحل من خلال التعليمة Solve ، ويحدد الحل الإبتدائي وفق التعليمة Solve int [26] ، كما يمكن حساب الحل عند مجموعة قيم لفرق الكمون مع تحديد خطوات الحساب كالآتي:

solve vanode=0 vstep=0.05 vfinal=0.25 name=anode

solve vanode=0.26 vstep=0.01 vfinal=0.55 name=anode

❖ إنشاء ملف :

يتم إنشاء ملف لحفظ البيانات المتحصل عليها من الحل بواسطة الأمر Log ، كما توجد مجموعة من التعليمات الأخرى مثل: [24]

- **Load**: هاته التعليمة تسمح باستخراج المعطيات انطلاقا من ملف موجود.
- **SAVE** : تسمح تعليمة SAVE بتسجيل جميع المعلومات التي تم الحصول عليها في ملف.
- **EXTRACT** : هاته التعليمة تستخدم لاستخراج قيم ثوابت جد محددة لملف log و ملف الحل.
- **TONYPLOT** : النتائج والمعلومات التي تم الحصول عليها من المحاكاة يمكن عرضها بياني.

3- النتائج والمناقشة :

3-1- خواص المواد المدروسة :

يمكن تلخيص خواص المواد المستعملة في الجدول التالي :

الخاصية	n-MoS ₂	p-Si
النطاق الممنوع Eg (eV)	1.2-1.9	1.12
السُمك (µm)	0.065-0.0065	100

4.5	4.2	الألفة الإلكترونية (eV)
11.9	10.5	السماحية
2.8E+19	2.2E+18	كثافة الحالات عند E_c (Cm^{-3})
1.04E+19	1.8E+18	كثافة الحالات عند E_v (Cm^{-3})
1500	150	حركية الإلكترونات (Cm^2/Vs)
4500	86	حركية الثقوب (Cm^2/Vs)
0	10^{17}	تركيز المانحات Nd (Cm^{-3})
$5 * 10^{15}$	0	تركيز الآخذات Na (Cm^{-3})
10^7	10^7	السعة الحرارية للثقوب
10^7	10^7	السعة الحرارية للإلكترونات

الجدول (2-3) : خواص المواد المدروسة. [27] [11]

• قمنا أيضا بتحديد تركيز مصائد الثقوب N_t في المنطقة p على ثلاث مستويات هي :

✓ المستوى الأول : عند 0.23 (eV) $N_t=7E+11$ (cm^{-3})

✓ المستوى الثاني : عند 0.33 (eV) $N_t=2.5E+12$ (cm^{-3})

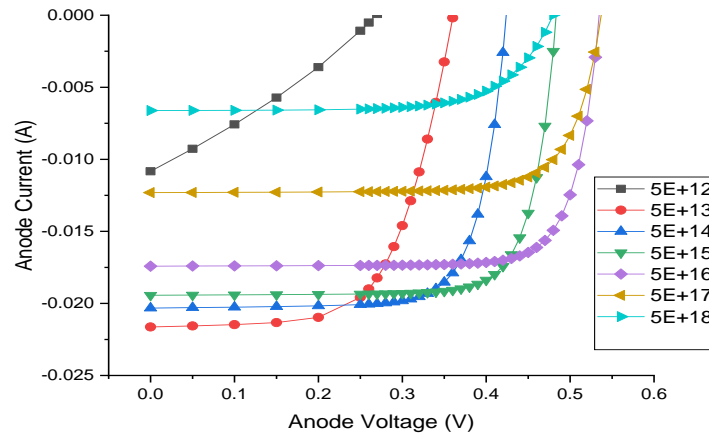
✓ المستوى الثالث : عند 0.41 (eV) $N_t=4.5E+12$ (cm^{-3})

3-2-دراسة تأثير شدة التطعيم على خواص الخلية :

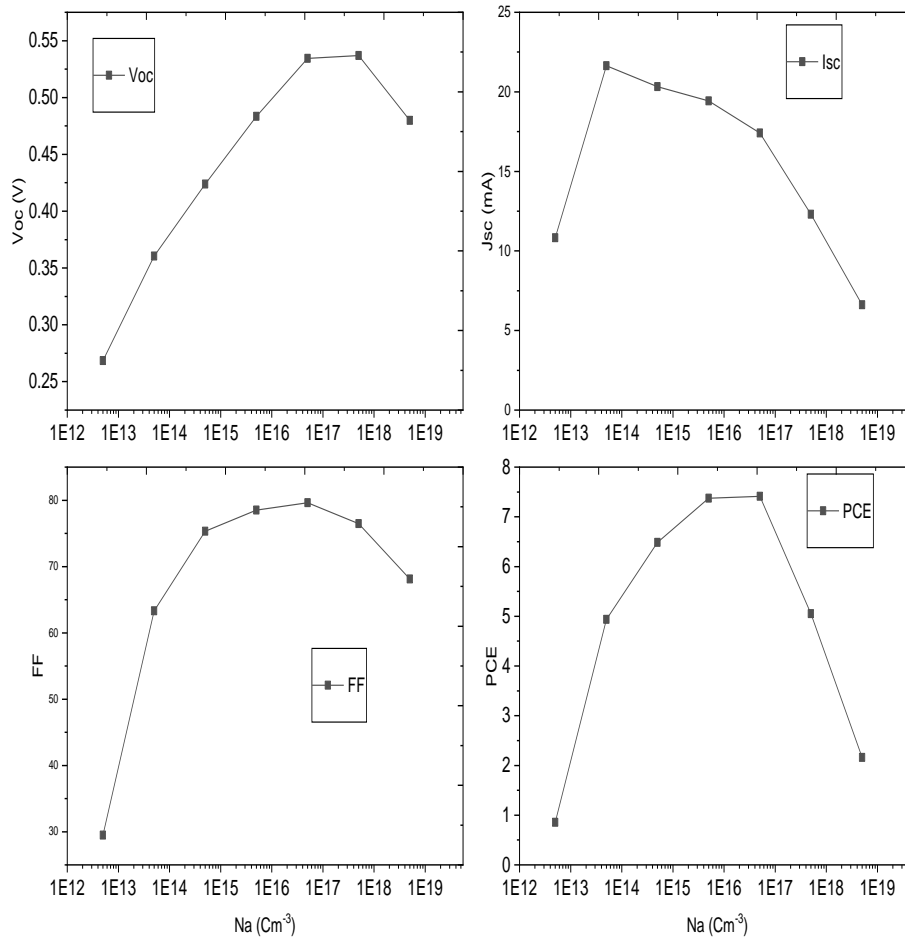
3-2-1- المنطقة p :

قمنا بمحاكاة تأثير تغيير شدة التطعيم في المنطقة p على وسائط الخروج للخلية وذلك بتغيير شدة التطعيم في المجال $(5 * 10^{18} - 5 * 10^{12} \text{Cm}^{-3})$ ، مع الإبقاء على نفس الخواص الأخرى كما هي ، وكانت النتائج كالاتي :

يوضح الشكل (2-9) الخاصية (I-V) للخلية لكل تطعيم قمنا به في المحاكاة ، حيث نلاحظ تغيرات كبيرة على الخاصية (I-V) ، ولفهم أوضح لهذه التغيرات قمنا برسم المنحنيات في الشكل (3-10) التي توضح تأثير تغيير شدة التطعيم في المنطقة p على وسائط الخروج للخلية .



الشكل (3-9) : الخاصية ($I-V$) للخلية بدلالة تغير شدة التطعيم في المنطقة p.



الشكل (3-10) : وسائط الخروج للخلية بدلالة تغير شدة التطعيم في المنطقة p.

- جهد الدارة المفتوحة Voc : نلاحظ تزايد في قيمة جهد الدارة المفتوحة مع تزايد التطعيم ، حيث يؤدي زيادة التطعيم في المنطقة p إلى نقص في حاملات الأقلية ما يؤدي إلى نقص الإلتحامات هذا النقص يؤدي إلى إنخفاض قيمة تيار الإستقطاب المباشر I_f ما يعني نقص تيار التشبع I_s ، وحسب العلاقة (1-19) من الفصل الأول :

$$V_{oc} = V_{th} \cdot \ln\left(\frac{I_{ph}}{I_s} + 1\right) \dots \dots \dots (19-1)$$

فإن نقصان تيار التشبع يؤدي إلى زيادة جهد الدارة المفتوحة Voc.

في المقابل زيادة التطعيم بشكل كبير يؤدي إلى نقص طول إنتشار الحاملات [28] ما يؤدي إلى زيادة الإلتحامات و زيادة تيار التشبع أي نقص في جهد الدارة المفتوحة.

$$I_s = A \times q \times ni^2 \left(\frac{Dn}{L_n \times N_a} + \frac{Dp}{L_p \times N_d} \right) \dots \dots \dots (1-3)$$

حيث :

A: مساحة المقطع الذي يمر من خلاله التيار (m^2).

q : الشحنة العنصرية للإلكترون $1.6 \times 10^{-19} C$

n_i : التركيز الجوهرى (Cm^{-3})

D_n, D_p : معامل إنتشار الإلكترونات والثقوب على الترتيب.

L_p, L_n : طول إنتشار الإلتكترونات والثقوب على الترتيب.

تيار الدارة القصيرة Jsc : نلاحظ تناقص في قيمة تيار الدارة القصيرة مع زيادة التطعيم وهذا بسبب تناقص إمتداد المنطقة الفعالة في الخلية وبالتالي تناقص التيار الضوئي . مع تسجيل نقطة شاذة عند التركيز $5 \times 10^{12} Cm^{-3}$ وذلك سببه أن تركيز مصائد الثقوب أكبر من تركيز التطعيم ما سبب زيادة كبيرة في إلتحامات حاملات الأغلبية .

- معامل الشكل FF : يتأثر معامل التعبئة بالخاصية (I-V) بشكل ملحوظ حيث أن تغير الشكل في الخاصية ، حيث يزداد معامل التعبئة مع تناقص حاملات الأقلية نتيجة التطعيم بداية ثم يتناقص مع تناقص طول إنتشار الحاملات وزيادة الإلتحامات مع زيادة التطعيم بشكل كبير .

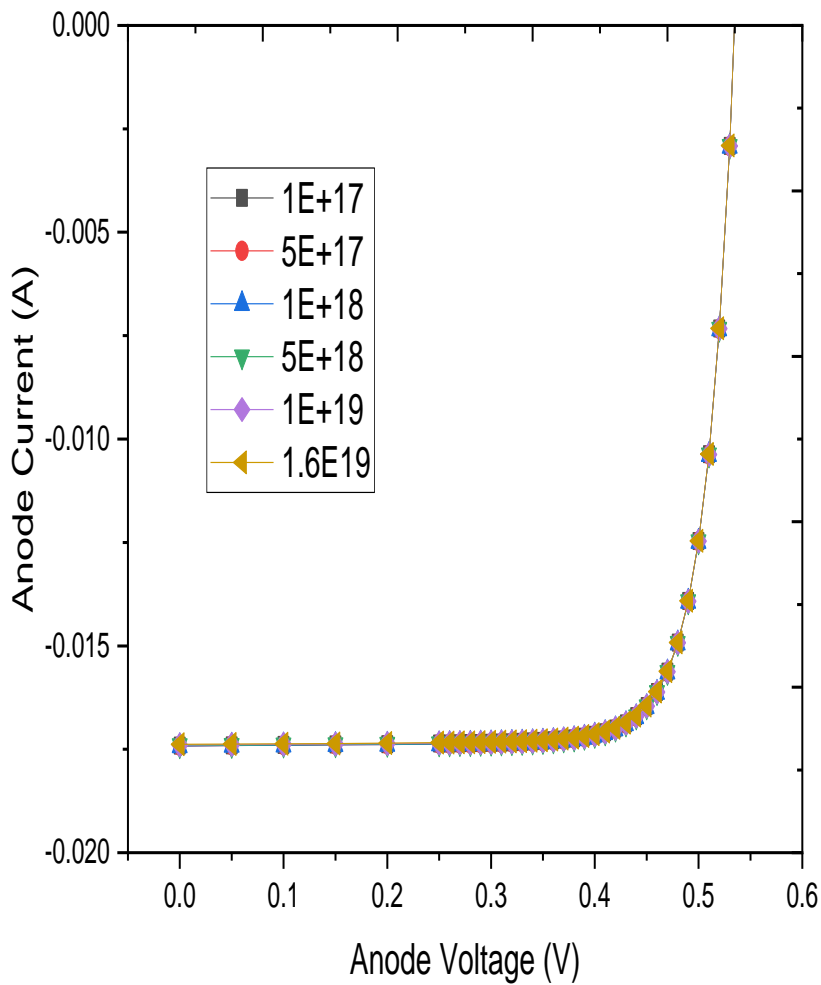
- المردود PCE : نلاحظ تزايد في مردود الخلية حتى يبلغ الذروة بالقيمة 7.41325%

عند التطعيم $5 \times 10^{16} Cm^{-3}$ ثم يتراجع بزيادة التطعيم نتيجة التأثير الخواص السابقة .

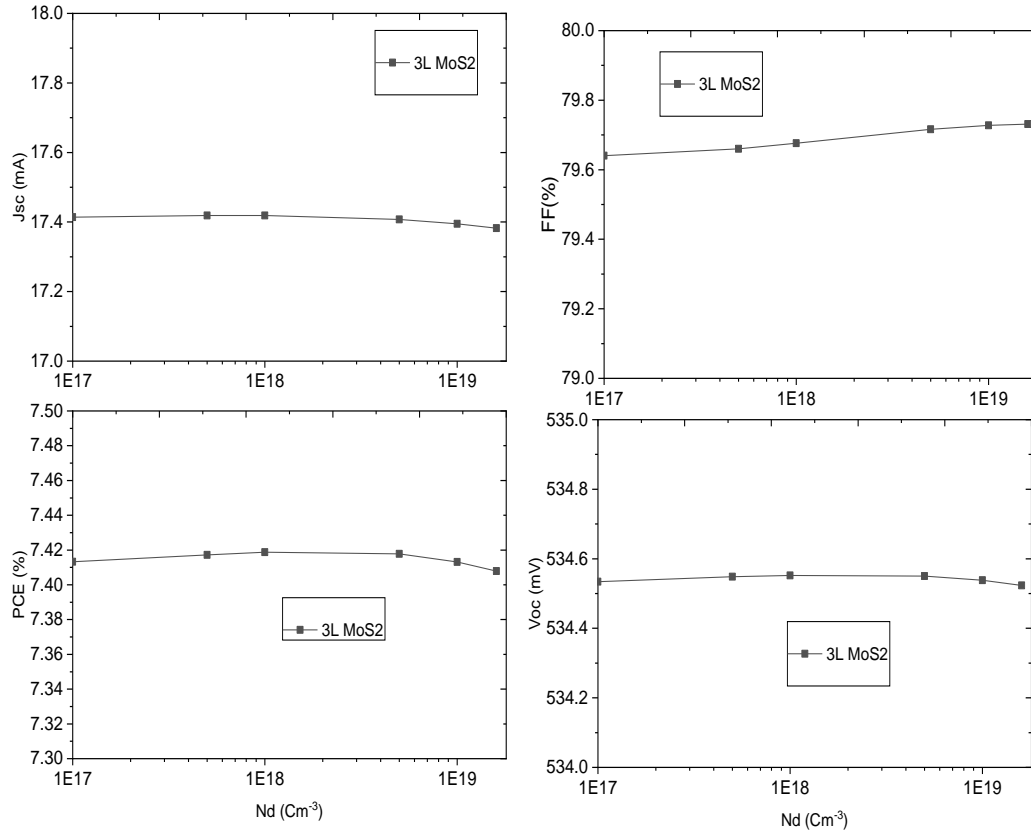
3-2-2- المنطقه n :

قمنا بتغيير تركيز تطعيم المنطقة n في المجال بين $10^{17}-1.6*10^{19}Cm^{-3}$ مع الإبقاء على الخواص السابقة كما هي ، وكانت النتائج كالآتي :

يوضح الشكل (3-11) الخاصية (I-V) للخلية بدلالة تطعيم المنطقة n. نلاحظ عدم تأثر الخاصية (I-V) بتغيير التطعيم في المنطقة n ، ولفهم ذلك أكثر قمنا برسم تغيير قيم وسائط الخروج للخلية بدلالة تغير شدة التطعيم كما هو موضح في الشكل (3-12) :



الشكل (3-11) : الخاصية (I-V) بدلالة تغير شدة التطعيم في المنطقة n .



الشكل (3-12) : تأثير تغير تطعيم المنطقة n على وسائط خروج الخلية .

- نلاحظ من المنحنيات في الشكل (3-12) عدم تأثر وسائط الخروج بتغيير شدة تطعيم المنطقة n حيث تحدث تغيرات طفيفة .

- المردود PCE :يسجل ارتفاعا طفيفا عند التركيز $Na= 10^{18} \text{ Cm}^{-3}$ بقيمة قدرها

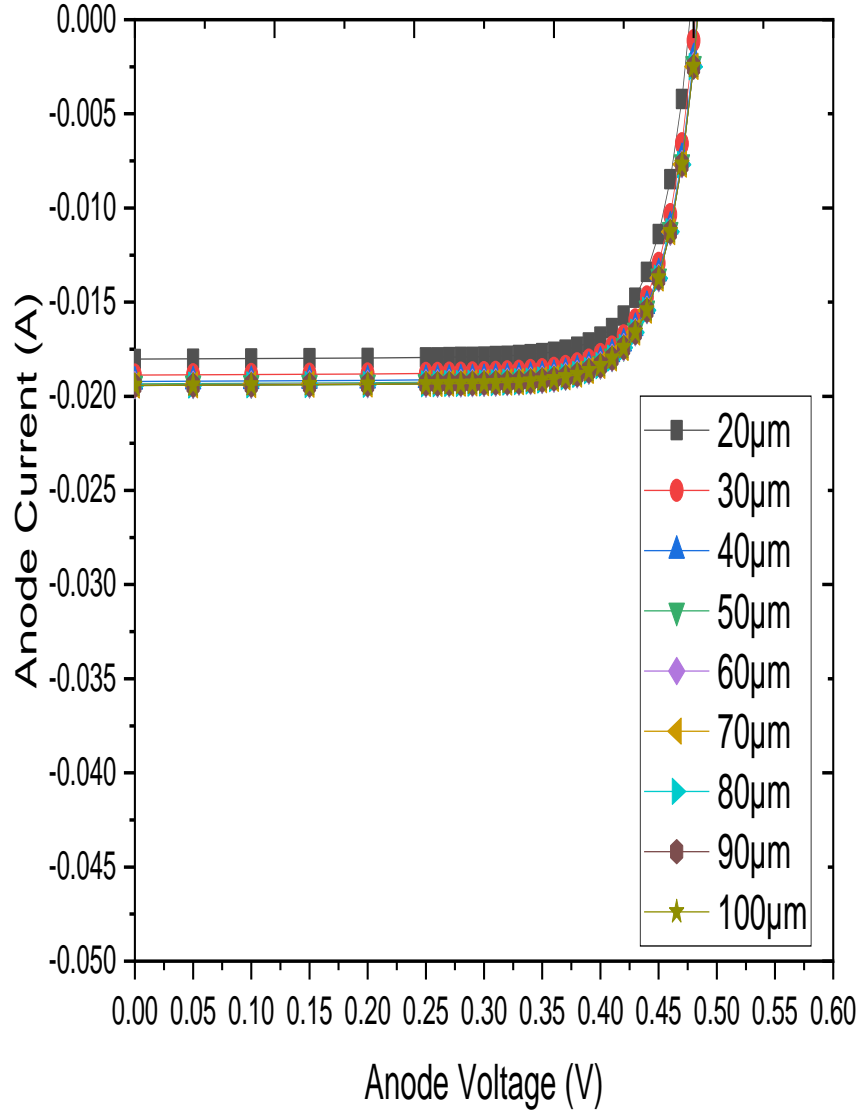
7.41775 %

3-3- تأثير السُمك على خواص الخلية :

3-3-1- تأثير سُمك المنطقة p :

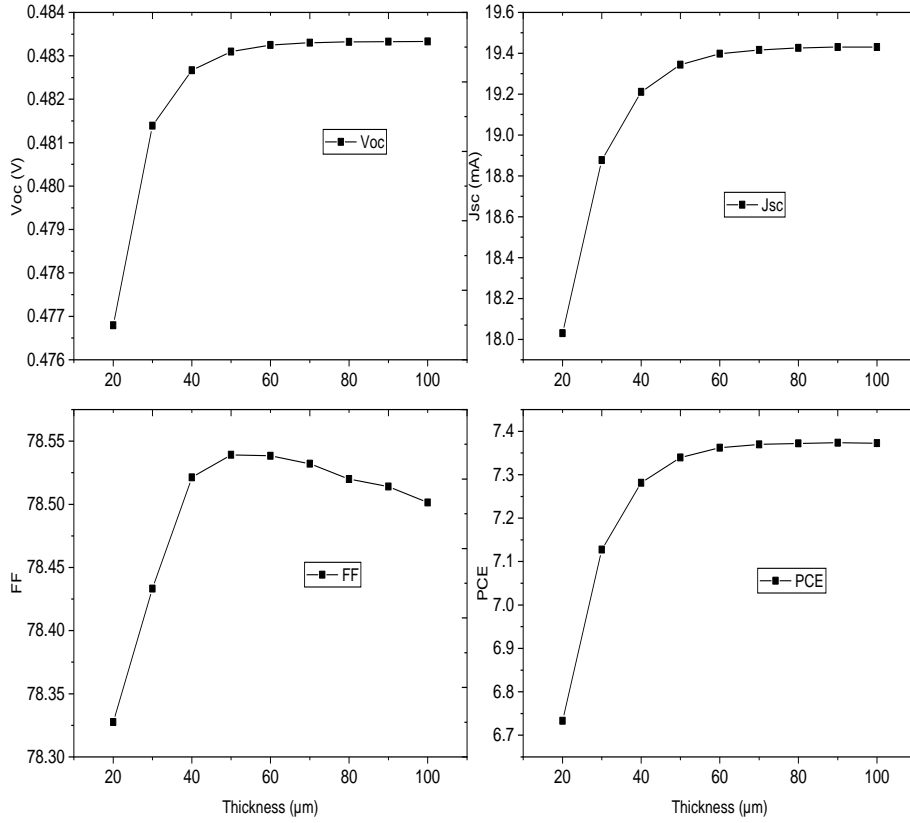
قمنا بمحاكاة تأثير تغير سُمك المنطقة p على خواص الخلية الشمسية المدروسة ، وذلك في المجال بين 20-100 ميكرومتر بخطوة قدرها 10ميكرومتر مع الأخذ بعين الإعتبار نتائج المحاكاة السابقة وذلك بتغيير تركيز التطعيم في المنطقة n إلى القيمة $Na= 10^{18} \text{ Cm}^{-3}$

وإبقاء التركيز في المنطقة p في القيمة $N_d=1.5 \times 10^{16} \text{Cm}^{-3}$ من أجل الحصول على أفضل النتائج الممكنة ، وكانت النتائج كالاتي :



الشكل (3-13) : الخاصية ($I-V$) للخلية بدلالة تغير سمك المنطقة p.

نلاحظ تغير طفيف في الخاصية ($I-V$) يظهر بجوار تيار الدارة القصيرة أكثر منه عند جهد الدارة المفتوحة ، ولفهم هذه التغيرات أكثر قمنا برسم منحنى تغير وسائط الخروج بدلالة تغير سمك المنطقة p بالإعتماد على نتائج المحاكاة ، كما هو موضح في الشكل (3-14) :



الشكل (3-14): تأثير تغيير سُمك المنطقة p على وسائط خروج الخلية .

- تيار الدارة القصيرة ISC : نلاحظ زيادة قيمة ISC مع زيادة السمك تتراوح هذه الزيادة بين القيمتين 0.018 - 0.01943 A وذلك بسبب زيادة المنطقة الفعالة نتيجة زيادة السمك حيث يقترب سمك المنطقة p من حدود المنطقة الفعالة للخلية و تتخامد هذه الزيادة تدريجيا عند الوصول إلى السمك 60ميكرومتر وذلك بسبب إبتعاد حدود المنطقة الفعالة عن التوصيل الخلفي وبالتالي نقص احتمالية وصول الحاملات المتولدة ضوئيا إلى منطقة شحنة الفضاء مع زيادة احتمالية الإلتحامات حاملات الأغلبية .

جهد الدارة المفتوحة Voc: يتأثر جهد الدارة المفتوحة بتغير تيار الدارة القصيرة ويمكن تفسير ذلك من خلال العلاقتين (12-1) و(19-1) في الفصل الأول نستطيع كتابة العلاقة التالية :

$$V_{OC} = V_{th} \cdot \ln\left(\frac{I_{sc}}{I_s} + 1\right) \dots \dots \dots (2-3)$$

- معامل التعبئة FF: نلاحظ زيادة في معامل بسبب زيادة المنطقة الفعالة في الخلية نتيجة زيادة سمك المنطقة p ، ما أدى إلى زيادة الحاملات المتولدة ضوئيا ، لكن في المقابل مع زيادة السمك أكثر من 50ميكرومتر نلاحظ تناقص في FF وذلك بسبب زيادة

الإلتحافات نتيجة إبتعاد الإلكتروود عن حدود المنطقة الفعالة ما أدى إلى زيادة الإلتحافات في حاملات الأغلبية عند المنطقة p.

- المردود PCE: يتأثر المردود بتيار الدارة القصيرة وجهد الدارة المفتوحة ، حسب العلاقة

$$\eta = \frac{FF \times I_{sc} \times V_{oc}}{H_{ins} \times S} \quad (17-1) \text{ في الفصل الأول}$$

حيث تسجل الخلية أعلى مردود عند السُمك 90ميكرومتر %7.37354 .

3-3-2- تأثير سُمك المنطقة n :

قمنا بمحاكاة تغيير سمك المنطقة n على أربع مراحل هي :

- باعتبار المنطقة n ثنائية البعد أي تتكون من طبقة واحدة 1L .
- باعتبار المنطقة n تتكون من طبقتين 2L .
- باعتبار المنطقة n تتكون من 3 طبقات 3L .
- باعتبار المنطقة n تتكون من 100 طبقة أي سميكة (Bulk) .

الجدول (3-3) يوضح خواص كل طبقة التي أخذت بعين الإعتبار أثناء المحاكاة.

Bulk	3L	2L	1L	
0.065	0.00195	0.00130	0.00065	السُمك (μm)
1.2	1.46	1.6	1.9	النطاق الممنوع Eg (eV)

الجدول (3-3) : خواص MoS₂ حسب عدد الطبقات. [29]

كما أخذنا بعين الإعتبار كذلك نتائج المحاكاة السابقة حيث أخذنا القيم التي حققت أعلى مردود للخلية وهي :

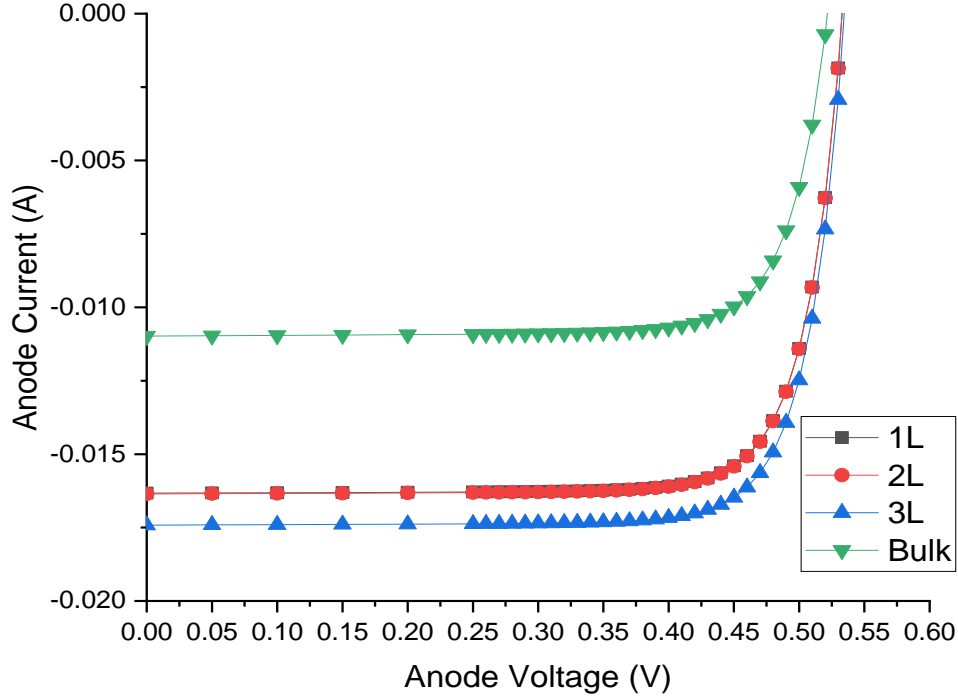
✓ سمك المنطقة p هو 90 μm .

✓ تطعيم المنطقة p هو $Na=5 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$.

✓ تطعيم المنطقة n هو $Nd=10^{18} \text{ cm}^{-3}$.

يوضح الشكل (3-15) الخاصية (I-V) للخلية حيث يظهر جليا التغير في الخاصية (I-V) خاصة بجوار Jsc وهذا راجع إلى التغيرات الكبيرة في خواص إمتصاص الضوء عند تغيير سمك المنطقة n حيث يتغير النطاق الممنوع ومعامل إمتصاص في كل مرة ، حيث أن زيادة سمك المنطقة n تؤثر بشكل

كبير على معامل الإمتصاص و بالتالي عدد الثنائيات المتولدة ضوئيا في امنطقة الفعالة وهذا واضح جدا في العينة السميكة (Bulk) باللون الأخضر التي شهدت تدهور في قيمة J_{SC} بشكل واضح .



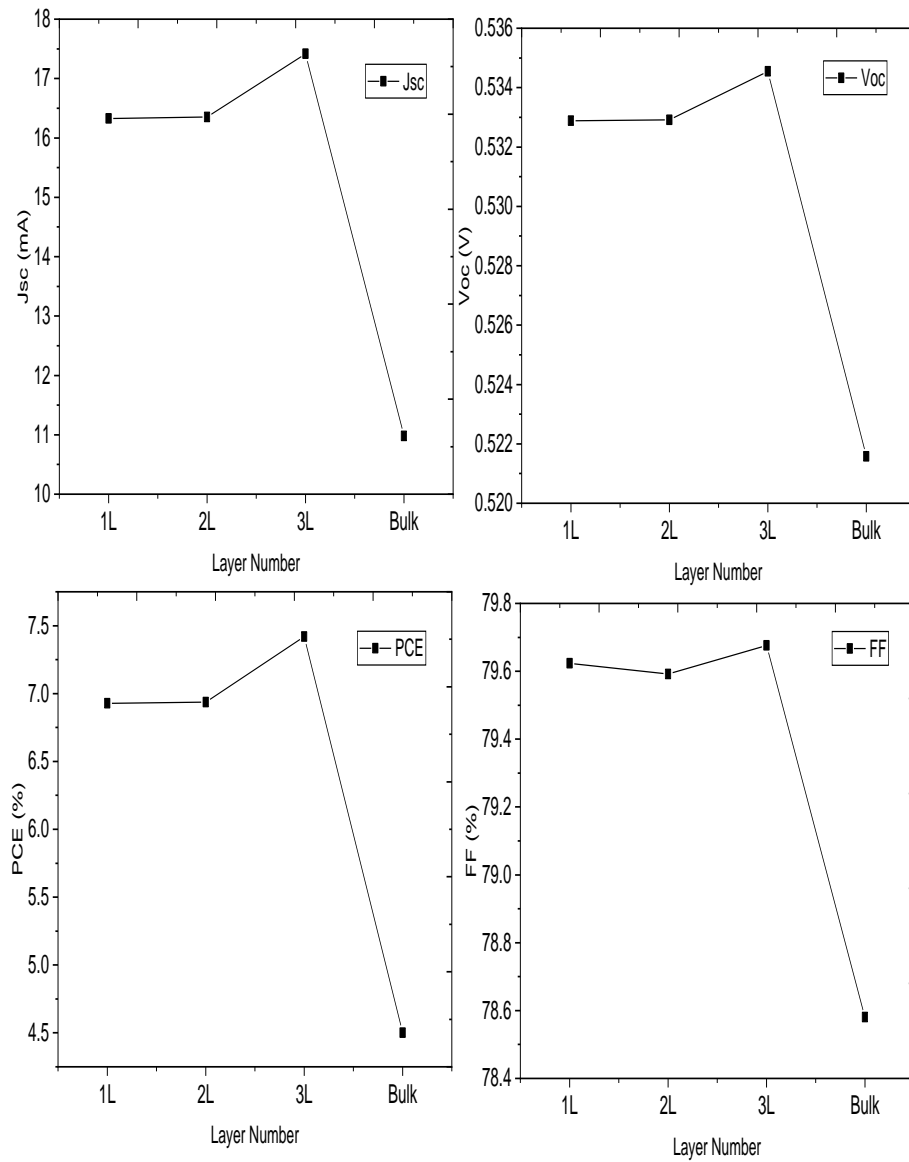
الشكل (3-15): تأثير سمك المنطقة n على الخاصية ($I-V$) للخلية .

تسجل العينة ثلاثية الطبقات (3L) أعلى قيمة ل J_{SC} فيما تتقارب جدا الخاصية ($I-V$) للعينتين أحادية الطبقة (1L) و ثنائية الطبقة (2L) .

عند مقارنة الخاصية ($I-V$) للعينتين ثلاثية الطبقة والسميكة نجد أن طول المسار الضوئي الناتج عن زيادة السمك في المنطقة n لا يؤثر على الإمتصاص بقدر التغيرات في الخواص الضوئية نتيجة تغيير سمك MoS_2 .

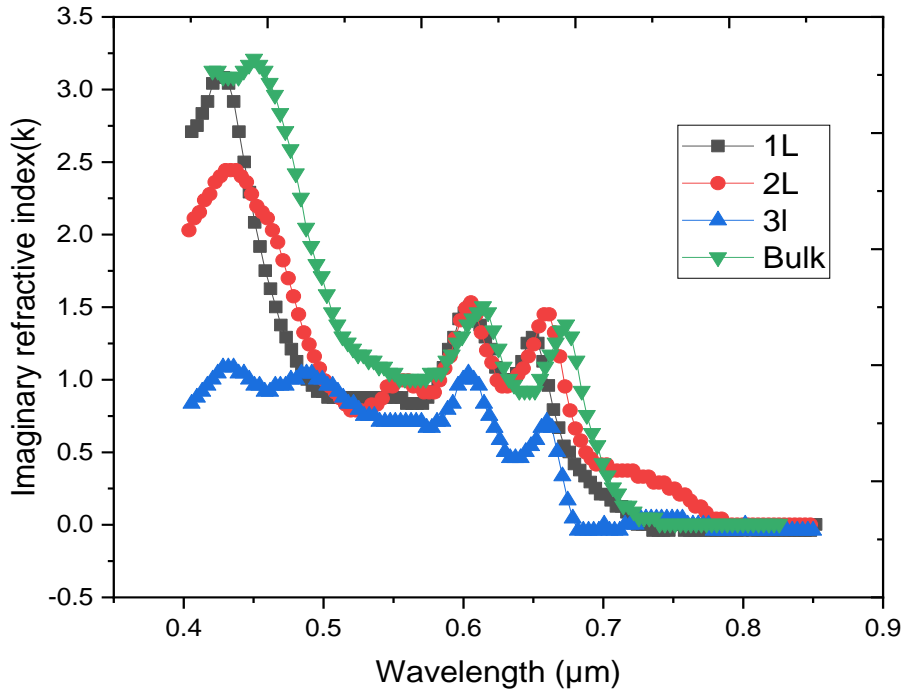
لتوضيح هذه التغيرات نعرض عليكم المنحنيات في الشكل (3-16) التي توضح تأثير تغيير سمك المنطقة n على وسائط خروج الخلية اعتمادا على نتائج المحاكاة السابقة .

يسجل MoS_2 ثلاثي الطبقة أعلى قيمة لوسائط الخروج للخلية ، بينما تسجل العينة السميكة أدنى مستوى حيث يظهر جليا تدهور وسائط خروج الخلية عندما يتعدى سمك المنطقة n الثلاث طبقات و هذا ما يتوافق مع نتائج الدراسة التجريبية في المرجع [27].



الشكل (3-16) : تأثير سمك المنطقة n على وسائط خروج الخلية.

لفهم هذا التأثير نعرض في الشكل (3-17) منحنى يمثل تغير معامل الإنطفاء (الجزء التخيلي لمعامل الإنكسار) K لشرائح كبريتيد الموليبيدينوم مختلفة السمك بدلالة الطول الموجي:



الشكل (3-17) : تغير معامل الإنطفاء K بدلالة الطول الموجي لشرائح MoS₂ أحادية ،ثنائية ، ثلاثية الطبقة والسميكة حسب بيانات المرجع [27].

من المنحنى في الشكل (3-15) والعلاقة التالية (3-3)..... $\alpha = \frac{4\pi k}{\lambda}$

حيث : α - : معامل الإمتصاص.

- K : هو معامل الإنطفاء .

- λ : هو الطول الموجي .

نجد أن 3L-MoS₂ يمتلك أقل معامل إمتصاص مايسمح بمرور أكبر قدر ممكن من الضوء

إلى المنطقة الفعالة وبالتالي تزداد الثنائيات المتولدة ضوئياً ، مايسبب إرتفاع تيار الدارة القصيرة ISC هذا الأخير أثر إيجابا على جميع خواص الخلية الشمسية ،حيث تسجل جميع الخواص قيمة عظمى عند 3L-MoS₂ ، وقيمة دنيا عند الشريحة السميكة بينما تتجاوز الطبقة الثنائية 2L بفارق طفيف الطبقة الاحادية 1L.

خاتمة

قمنا بمحاكاة لدراسة خصائص الخلية $n\text{-MoS}_2/p\text{-Si}$ حيث جرت المحاكاة من أجل معرفة تأثير التطعيم في المنطقتين n و p وتأثير سُمك المنطقتين n و p من أجل تحديد الخواص الأمثل لتحقيق أقصى مردود، وقد خلصت الدراسة إلى النقاط التالية :

1. تأثير التطعيم : خلصت نتائج المحاكاة إلى أن وسائط خروج الخلية الشمسية المدروسة تتأثر بتغير تطعيم المنطقة p بينما لا يحدث تغيير يذكر عند تغيير تطعيم المنطقة n .
2. تأثير السُمك : خلصت المحاكاة إلى أن تغيير سمك المنطقة n يؤثر على خواص الخلية بينما يكون هذا التأثير أقل حدة عند تغيير سمك المنطقة p .
3. التطعيم والسمك الذي حقق أفضل مردود للخلية

المنطقة p	المنطقة n	الخاصية
$5 * 10^{16}$	10^{18}	التطعيم (cm^{-3})
90	(3L) 0.00195	السمك (μm)
7.41875		أعلى مردود للخلية (%)

قائمة مراجع

[1] Joakim Widén, Joakim Munkhammar, Solar Radiation Theory, Uppsala University 2021, Translation to Arabic by Dr. Khalafallah Omar Kassem 2021.

[2]https://ar.wikipedia.org/wiki/%D8%B7%D8%A7%D9%82%D8%A9_%D8%B4%D9%85%D8%B3%D9%8A%D8%A9 .21/04/2024 /18:30

[3] ديبونة عبد الباسط ،قماري عبد الله،محاكاة خلية شمسية باستعمال برنامج سيلفاكوأطلس SILVACO-ATLAS ، مذكرة تخرج لنيل شهادة الماستر 2022/2021، جامعة قاصدي مرباح ورقلة.

[3]https://ar.wikipedia.org/wiki/%D8%B7%D8%A7%D9%82%D8%A9_%D8%B4%D9%85%D8%B3%D9%8A%D8%A9 .21/04/2024 /18:30

[4] ميموني إيمان،مساهمة في دراسة الطبقات الرقيقة للخلايا الشمسية المترسبة بتقنية PECVD، مذكرة ماستر 2116/2115جامعة قاصدي مرباح ورقلة -الجزائر.

[5]<https://www.solar-facts-and-advice.com/solar-cells>. 25/04/2024/ 14:00.

[6]Jicheng Yi , Guangye Zhang, Han Yu& He Yan , Advantages, challenges and molecular design of different material types used in organic solar cells, Review article, Nature Reviews Materials, Published online: 15/12/2023.

[7]Khalil ElKhamisy , Hamdy Abdelhamid, El-Sayed M. El-Rabaie , Nariman Abdel - Salam. A Comprehensive Survey of Silicon Thin-film Solar Cell: Challenges and Novel Trends. *Plasmonics* 19, 1–20 (2024).

[8]Yunru Song , Donor Polymers in All polymer Organic Solar Cells, Arizona College, Hebei University of Technology, Tianjin, China, ESAC 2024, Volume 87 (2024).

[9]Zhanglin Wu, Guo Xie, Fengsheng Gao, Wenlong Chen, Qingwen Zheng Yingzhang Liu, Experimental study of a self-cooling concentrated photovoltaic (CPV)system using thermoelectric modules, Energy Conversion and Management 299 (2024) 117858.

[10]سي جوليان تشين، فيزياء الطاقة الشمسية، الترجمة إلى العربية مصطفى محمد فؤاد ، مؤسسة هنداوي للنشر ، 2020م.

[11]D. Mouloua, A. Kotbi, G. Deokar, K. Kaja, M. El Marssi, M. A. El Khakani, and M. Jouiad, "Recent progress in the synthesis of MoS₂ thin films for sensing, photovoltaic and plasmonic applications: a review," Materials, vol. 14, p. 3283, 2021.

[12] V. P. Pham and G. Y. Yeom, "Recent advances in doping of molybdenum disulfide: industrial applications and future prospects," *Advanced Materials*, vol. 28, pp. 9024–9059, 2016

[13] <https://fr.wikipedia.org/wiki/Chalcog%C3%A8ne>.02/05/2024/10:00.

[14]https://ar.wikipedia.org/wiki/%D9%81%D9%84%D8%B2_%D8%A7%D9%86%D8%AA%D9%82%D8%A7%D9%84%D9%8A. 02/05/2024/10:30.

[15] N. Thomas, S. Mathew, K. M. Nair, K. O'Dowd, P. Forouzandeh, A. Goswami, G. McGranaghan, and S. C. Pillai, "2D MoS₂: structure, mechanisms, and photocatalytic applications," Materials Today Sustainability, vol. 13, p. 100073, 2021.

[16] Chang, Xiao, "Electrical properties of metal semiconductor contacts – metals on MoS₂: a case study" (2017). *Theses*. 43.

[17]M. Srivastava, S. Banerjee, S. Bairagi, P. Singh, B. Kumar, P. Singh, R. D. Kale, D. M. Mulvihill, and S. W. Ali, "Recent progress in molybdenum

disulfide (MoS₂) based flexible nanogenerators: An inclusive review," *Chemical Engineering Journal*, p. 147963, 2023.

[18] Q. Deng, Y. Li, Y. Shen, L. Chen, G. Wang, and S. Wang, "Numerical simulation on n-MoS₂/p-Si heterojunction solar cells," *Modern Physics Letters B*, vol. 31, p. 1750079, 2017

[19] H. Yu, Y. Xie, J. Wei, P. Zhang, Z. Cui, and H. Yu, "Resonant perfect absorption of molybdenum disulfide beyond the bandgap," *Chinese Physics B*, vol. 32, p. 048101, 2023.

[20] توين ماركس، مارك هيرسام، "أشباه الموصلات تتمدد؛ وتصير رقيقة"، مجلة Nature الشهرية، الطبعة العربية، العدد 33، جوان 2015، ISSN 977-2314-55003

[21] J. Kwon, M. Seol, J. Yoo, H. Ryu, D.-S. Ko, M.-H. Lee, E. K. Lee, M. S. Yoo, G.-H. Lee, and H.-J. Shin, "200-mm-wafer-scale integration of polycrystalline molybdenum disulfide transistors," *Nature Electronics*, pp. 1-9, 2024.

[22] R. Dagan, Y. Vaknin, A. Henning, J. Shang, L. Lauhon, and Y. Rosenwaks, "Two-dimensional charge carrier distribution in MoS₂ monolayer and multilayers," *Applied Physics Letters*, vol. 114, 2019.

[23] N. E. Boukourt, "Study and Simulation of a Nanoscale Structure of a Multi-gate MOS Transistor," These Doctorate, Mostaganem University, 2017.

[24] بو عبدالله ع. الغني، "CIGS محاكاة رقمية لتأثير الطبقة Sb في تقليص العيوب في الخلية الشمسية"، رسالة دكتوراه، جامعة محمد خيضر بسكرة، 2020.

[25] M. Elbar, "Etude par simulation numérique d'une cellule solaire en CIGS à multi-jonction par le logiciel Tcad Silvaco," Université Mohamed Khider-Biskra, 2018.

[26] R. Boumaraf, "Simulation de l'effet de la température et les défauts sur les caractéristiques électriques des diodes à base de GaAs," Université Mohamed Khider–Biskra, 2015.

[27] C. Hsu, R. Frisenda, R. Schmidt, A. Arora, S. M. De Vasconcellos, R. Bratschitsch, H. S. van der Zant, and A. Castellanos-Gomez, "Thickness-dependent refractive index of 1L, 2L, and 3L MoS₂, MoSe₂, WS₂, and WSe₂," *Advanced optical materials*, vol. 7, p. 1900239, 2019.

[28] <https://www.pveducation.org/pvcdrom/design-of-silicon-cells/voltage-losses-due-to-recombination>

[29] K. F. Mak, C. Lee, J. Hone, J. Shan, and T. F. Heinz, "Atomically thin MoS₂: a new direct-gap semiconductor," *Physical Review Letters*, vol. 105, p. 136805, 2010.

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE
MINISTRE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR
ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE
UNIVERSITE MOHAMED KHIDER - BISKRA
Faculté des SE&SNV



الجمهورية الجزائرية الديمقراطية الشعبية
وزارة التعليم العالي والبحث العلمي
جامعة محمد خيضر بسكرة
كلية العلوم الدقيقة وعلوم الطبيعة والبيئة

Département des Sciences de la matière
Filière: Physique

قسم: علوم المادة
شعبة: الفيزياء

تصريح شرفي

خاص بالالتزام بقواعد النزاهة العلمية لإنجاز بحث

(ملحق القرار 1082 المؤرخ في 2021/12/27)



أنا الممضي أسفله،

السيدة(ة): علوي محمود

الصفة: طالب سنة ثانية ماستر فيزياء

تخصص: فيزياء طاقوية والطاقات المتجددة

الحامل(ة) لبطاقة التعريف الوطنية رقم: 4993784 الصادرة بتاريخ: 2019/09/08

المسجل بكلية: علوم الطبيعة والبيئة والحياتية قسم: علوم المادة

والمكلف بإنجاز أعمال بحث: مذكرة ماستر في الفيزياء

عنوانها: دراسة الخلايا الشمسية MOS_2/Si وفق

محاكاة بواسطة برنامج SILVACO ATLAS

أصرح بشرفي أنني أتزم بمراعاة المعايير العلمية والمنهجية ومعايير الأخلاقيات المهنية والنزاهة الأكاديمية المطلوبة في إنجاز البحث المذكور أعلاه وفق ما ينص عليه القرار رقم 1082 المؤرخ في 2021/12/27 المحدد للقواعد المتعلقة بالوقاية من السرقة العلمية ومكافحتها.

التاريخ: 2024/03/10

إمضاء المعني بالأمر