

جامعة محمد خيضر بسكرة
كلية العلوم الدقيقة و علوم الطبيعة و الحياة
قسم علوم المادة



مذكرة ماستر

ميدان علوم المادة
شعبة الفيزياء
فيزياء طااقوية و طااقات متجددة

إعداد الطالب:
موسي أميرة - فرادي عتاب

دراسة خلية شمسية متحسّنة بالنقاط الكمية

لجنة المناقشة:

الرئيس

المشرف

الممتحن

جامعة محمد خيضر بسكرة

أستاذ

مفتاح أفاق

السنة الجامعية: 2020 - 2021

الشكر

الحمد لله الذي بنعمته تتم الصالحات
و الحمد لله حمدا كثيرا مباركا طيبا على نعمه و فضله
و السلام على نبينا محمد صلى الله عليه و سلم
نتقدم بأسمى آيات الشكر و الامتنان و التقدير إلى الذين....

حملوا أقدس رسالة في الحياة

إلى الذين مهدوا لنا طريق العلم و المعرفة

إلى كل أستاذ علمنا حرفا و سعى لإنارة دربنا بالعلم

يسعدنا أن نتقدم بجزيل الشكر و العرفان إلى أستاذتنا المشرفة على المذكرة

أفاق مفتاح التي كانت مثالا و قدوة للصبر

و نتوجه بكل مشاعر العرفان لكل من ساعدنا في مسارنا الدراسي

أما الشكر من النوع الخاص فنحن نتوجه بالشكر لكل صديقاتنا اللواتي سعدنا

برفقتهن والى طريق النجاح سرنا *** شيماء معافي - موسي سناء *** و الى الزميل

بلال زوبيري الذي كان دعما لنا

الإهداء

* عتاب فرادي *

في هذه اللحظة الفارقة من حياتي التي ابتدأت بطموح و انتهت بنجاح، أهدي لحظة تخرجي هذه إلى *والدي* و خاصة *أمي الغالية جميلة* ها نحن وصلنا إلى اللحظة التي كنتِ دوماً تحلمين بها، أهدي لكي هذا النجاح، و كل النجاحات التي أتمنى تحقيقها في المستقبل لأري نظرات الفخر في عينيك و اهدي تخرجي كذلك إلى جميع *إخوتي* و أخص بالذكر *حمزة* الذي كان سندا لي بالرغم من أن كلمات الشكر هذه لا توفيك حقك، من دون أن أنسى رفيقة دربي صديقتي *سماح دندوقة* شكرا لجميع *الأهل و الأصدقاء* وكل من ساندني للوصول إلى ما انا عليه الآن

* أميرة موسى *

اهدي تخرجي و ثمرة جهدي إلى اعز و أعلى إنسان على قلبي الذي حصد الأشواك عن دربي ليمهد لي طريق العلم *أبي الغالي محمد* و كذا إلى من منحتني القوة و العزيمة و علمتني الصبر والاجتهاد *أمي الغالية زهرة* إلى إخوتي *وداد- إكرام - عائشة - أخي عبد الحق*

شكرا إلى كل اساتذتي الذين افادوني بعلمهم و الى كل صديقاتي رفقاء دربي *شيماء سناء عتاب امال سعاد مروة* الى كل زملاء الدراسة متمنية لهم التوفيق و لا انسى بإهداء شكري الخالص الى زميلي *بلال زوبيري* الذي كان دعما لي في مشواري

الملخص

في عملنا هذا قمنا بمحاكاة خلية شمسية محسّنة بنقاط كميّة (QDSCs) والتي أصبحت بديلا واعدة للخلايا الشمسية التقليدية بفضل مميزات الفريدة التي تجسدت في انخفاض تكلفتها و سهوله تصنيعها و قد استعملنا في هذا العمل برنامج سيلفاكو - اطلس الذي يقوم بمحاكاة الخصائص الكهربائية المرتبطة بالبنية الفيزيائية المدروسة. تمت هذه الدراسة على خلية شمسية محسّنة بنقاط كميّة من المواد CdTe و CIGS بنسب مختلفة للغاليوم و كانت نتائج المحاكاة لوسائط الخروج الكهربائية مقارنة للقيم التجريبية. تم الحصول على أعلى مردود لخلية CGS الذي بلغ 9.58%.

تمكنا من تحسين هذا المردود وذلك عن طريق التحسين في سمك الطبقة الناقلة للإلكترونات $ETL(TiO_2)$ ($0.2\mu m$) و سمك طبقة النقاط الكمية QDs ($0.1\mu m$) و عملي الانتزاع للكاثود ($4eV$) والانود ($6.3eV$) في ظل هذه التحسينات التي قمنا بها تحصلنا على وسائط خروج جيدة وهي كالاتي: $V_{oc}=1.243V, FF=79.43\%, PCE=13.87\%, J_{sc}=14.051mA/cm^2$.

الكلمات المفتاحية : الخلايا الشمسية، النقاط الكمية، سلفاكو-أطلس، محاكاة .

Abstract :

In this work, we simulated a quantum dot sensitized solar cell (QDSCs), which has become a promising alternative to traditional solar cells due to its benefit advantages like as a low cost and ease of manufacture.

We used the Silvaco-Atlas program, which simulates the electrical properties associated with the studied physical structures. This study was carried out on a solar cell sensitized with quantum dots of CdTe and CIGS (with different ratios of gallium) materials, and the simulation results for the electrical outputs were close to the experimental values. The highest conversion efficiency was obtained with CGS QDs cell which was 9.58%.

We were able to improve this efficiency by optimizing the thickness of the electron transport layer ($0.2\mu m$), the thickness of the quantum dot layer ($0.1\mu m$) and the workfunction of the cathode and the anode (4 and $6.3 eV$). Under these improvements, we have obtained good electrical outputs, which are as follows:

$$J_{sc} = 14.051(mA/cm^2), V_{oc}=1.243V, FF=79.43\%, PCE=13.87\% .$$

Keywords : Solar cell, Quantum dots, Silvaco-Atlas, Simulation.

قائمة الأشكال

الصفحة	العنوان	الشكل
7	يمثل التمثيل التخطيطي للخلية الكهروضوئية	الشكل 1.1
9	يوضح التمثيل التخطيطي لأجيال مختلفة من الخلايا الشمسية	الشكل 2.1
10	مخطط التصنيع لخلية شمسية سيلكونية بلورية	الشكل 3.1
12	مخطط توضيحي لخلية شمسية سيلكونية من الشرائح الرقيقة	الشكل 4.1
14	الهيكل الأساسي لخلية شمسية كالكوجنية رقيقة	الشكل 5.1
14	تمثيل تخطيطي لخطوات ترسيب الخلايا الشمسية الكالكوجنية	الشكل 6.1
15	تكنولوجيا النانو (a) العودات، (b) المخاريط، (c) الأسلاك والنقاط الكمية	الشكل 7.1
16	تمثيل تخطيطي لخلية شمسية صبغية حساسة للضوء	الشكل 8.1
18	بيئة البيروفسكايت	الشكل 9.1
19	مختلف طبقات خلايا بيروفسكايت الشمسية	الشكل 10.1
20	أمثلة عن الخلايا الشمسية الترادفية	الشكل 11.1
21	(أ) توضيح امتصاص الفوتون في أنصاف النواقل مع نطاق الطاقة E_g . الفوتون مع الطاقة $E_{ph} = hv$ يثير إلكترونًا من E_i إلى E_f في E_i يتم إنشاء ثقب. (ب) إذا كان $E_{ph} > E_g$ ، يتم التخلص من جزء من الطاقة بالاسترخاء الحراري.	الشكل 12.1
23	يوضح نموذج خلية شمسية بسيط للغاية	الشكل 13.1
26	مثال لخاصية التيار والجهد (أ) وخاصية الاستطاعة والجهد (ب) لخلية شمسية تحت الإضاءة. يتم الإشارة إلى كثافة تيار الدارة القصيرة، جهد الدارة المفتوحة، نقطة الاستطاعة العظمى والجهد والتيار الدارة القصيرة عند أعظم نقطة طاقة بواسطة I_{sc} و V_{oc} و mpp و V_{mp} و I_{mp} ، على التوالي.	الشكل 14.1
27	دائرة مكافئة لخلية شمسية مثالية تحتوي على مولد ضوئي وصمام ثنائي لفصل الشحن وملتصلا ب R_L .	الشكل 15.1

29	الشكل 16.1 الخاصة تيار-جهد لخلية شمسية مثالية $I_0 = 10^{-13} \text{ mA/cm}^2$ في الظلام (العتمة) وتحت الإضاءة $I_{ph} = 0.04 \text{ mA/cm}^2$
34	الشكل 1.2: مخطط توضيحي لتوليد الحاملات الحرة تحت إثارة فوتونات ضوئية: (A) حالة خلية شمسية عادية، (B) حالة خلية شمسية مثالية ذات نقاط كمية تتميز بتوالدات إكسيتونية متعددة
36	الشكل 2.2 توضيح تخطيطي لتكوينات الجهاز ومخططات نطاق الطاقة للخلايا الشمسية القائمة على QD: (أ) خلية شمسية حساسة لـ QD ، (ب) خلية شمسية هجينة QD - بوليمر ، (ج) خلية شمسية تقاطع شوتكي ، (د) n - p خلية شمسية غير متجانسة، و (هـ) خلية شمسية متجانسة n - p.
37	الشكل 3.2 توضيح تخطيطي لبنية مركب الـ QDSCs.
41	الشكل 4.2 تطور PCE القياسي لـ QDSCs منذ عام 2006 (للخلايا بناءً على بنية قياسية ثنائية القطب واختبارها تحت إشعاع AM 1.5 G)
44	الشكل 5.2 مصفوفة الكوابل النانوية المركزة على أكسيد الزنك
47	الشكل 6.2 تصميم قلب/غلاف للنقاط الكمية المتحسسة
52	الشكل 7.2 رسم تخطيطي لطرق إعادة تركيب الشحنات الرئيسية في QDSCs
64	الشكل 3.1 بيئة تصنيع الرقاقة الافتراضية
64	الشكل 3.2 مداخل ومخارج ATLAS
65	الشكل 3.3 النافذة الأساسية TonyPlot
67	الشكل 4.3 مخطط انسيابي لمراحل بناء نموذج في ATLAS
72	الشكل 5.3 مخطط مبسط لنمط إشغال الخلية الشمسية المتحسسة بالنقاط الكمية التي ستحاكي لاحقاً بسلفاكو-أطلس
73	الشكل 6.3 بنية الخلية المحاكاة بسلفاكو-أطلس
73	الشكل 7.3 مخطط الطاقة في التوازن
74	الشكل 8.3 تغيير القرائن الضوئية مع نسبة القاليوم في QDCIGS
75	الشكل 9.3 الخاصة تيار-جهد لمادة النقاط الكمية المختلفة

75	الشكل 10.3	خاصية المردود الكوانتي لمادة النقاط الكمية المختلفة
77	الشكل 11.3	مخطط الطاقة في التوازن بالنقاط الكمية من CdTe
77	الشكل 12.3	مخطط الطاقة في التوازن بالنقاط الكمية من CGS
80	الشكل 13.3	منحنيات الخاصية تيار-جهد(1.4.3)تأثير سمك الطبقة الناقلة للإلكترونات (ETL(TiO2))
80	الشكل 14.3	منحنيات المردود الكوانتي(1.4.3)تأثير سمك الطبقة الناقلة للإلكترونات (ETL(TiO2))
82	الشكل 15.3	منحنيات الخاصية تيار-جهد(تأثير سمك طبقة النقاط الكمية)
82	الشكل 16.3	منحنيات المردود الكوانتي (تأثير سمك طبقة النقاط الكمية)
84	الشكل 17.3	منحنيات الخاصية تيار-جهد(تأثير عمل الإنتزاع للكاثود)
84	الشكل 18.3	منحنيات المردود الكوانتي(تأثير عمل الإنتزاع للكاثود)
86	الشكل 19.3	منحنيات الخاصية تيار-جهد (تأثير عمل الإنتزاع للأنود)
86	الشكل 20.3	منحنيات المردود الكوانتي (تأثير عمل الإنتزاع للأنود)

قائمة الجداول

الصفحة	العنوان	الجدول
41	جدول ملخص للأعمال البارزة في تطور QDSCs (للخلايا بناءً على بنية ثنائية القطب باستخدام كآنود ضوئي TiO₂ واختبارها تحت إشعاع AM 1.5 G)	الجدول 1.2
43	جدول ملخص للأداء الكهروضوئي لـ QDSCs بناءً على ETMs المختلفة	الجدول 2.2
48	ملخص للأداء الكهروضوئي للخلايا الشمسية QDSCs بناءً على CEs	الجدول 3.2
49	ملخص للأداء الكهروضوئي لـ QDSCs على أساس أزواج الأكسدة و الإرجاع المختلفة و HTMs في الحالة الصلبة	الجدول 4.2
51	وسائط الخروج القياسة لخلية شمسية QDs	الجدول 5.2
54	ملخص الدراسات لـ QDSCs تحت ظروف اختبار مختلفة	الجدول 6.2
71	معطيات تعريف المواد المستخدمة في الخلية الشمسية	الجدول 1.3
74	تأثير نسبة الغاليوم على نطاق الطاقة و الألفة الإلكترونية	الجدول 2.3
76	وسائط الخروج حسب مادة النقاط الكمية	الجدول 3.3
78	وسائط الخروج الكهربائية لخلية شمسية بنقاط كمية من QD - CIS على شكل طبقة متوضعة على شريحة من TiO₂ من أجل عدة درجات حرارية للتحمية أثناء الترسيب	الجدول 4.3
79	تأثير زيادة نسبة الإنديوم على وسائط الخروج	الجدول 5.3
79	تأثير كمية النقاط الكمية على وسائط الخروج	الجدول 6.3
81	وسائط الخروج الكهربائية (تأثير سمك الطبقة الناقلة للإلكترونات (ETL(TiO₂)))	الجدول 7.3
83	وسائط الخروج الكهربائية (تأثير سمك طبقة النقاط الكمية)	الجدول 8.3
85	وسائط الخروج الكهربائية (تأثير عمل الإنتزاع للكاتود)	الجدول 9.3
87	وسائط الخروج الكهربائية (تأثير عمل الإنتزاع للأنود)	الجدول 10.3

قائمة الرموز

الرمز	التسمية
R_L	مقاومة الحمل
U	
I	التيار الكلي
P_{mmp}	الاستطاعة الاعظمية المحررة من قبل الخلية
I_{mp}	التيار الموافق لاعظم استطاعة
U_{mp}	الجهد الموافق لاعظم استطاعة
FF	مهامل التعبئة
I_{Sc}	تيار الدارة القصيرة
V_{OC}	جهد الدارة المفتوحة
η	مردود التحويل (أو كفاءة التحويل)
P_{sun}	إستطاعة ضوء الشمس الذي تضاء به الخلية الشمسية
I_D	التيار المباشر
I_0	تيار التشبع
q	الشحنة الكهربائية ($1.602 \cdot 10^{-19}C$)
T	درجة الحرارة
K_B	ثابت بولتزمان ($1.38649 \cdot 10^{-23} JK^{-1}$)
I_{Ph}	التيار الضوئي

قائمة المعادلات

الصفحة	العنوان	المعادلة
25	تحديد هذه نقطة الاشتغال للخلية الشمسية بمقاومة الحمل R_L حسب قانون أوم	1.1
26	نقطة الطاقة العظمى (mpp).	1.2
26	معامل الشكل (أو معامل الإمتلاء)	3.1
27	مردود التحويل (أو كفاءة التحويل) η	4.1
28	وصف التيار عبر الصمام الثنائي (I_D)	5.1
28	معادلة الصمام الثنائي للخلية الشمسية المثالية	6.1
29	إصطلاحيا أن تيار الخلية هو $-I$	7.1
30	جهد الدارة المفتوحة	1.8

فهرس المحتويات

i.....	الشكر
ii.....	الإهداء
iv.....	الملخص
iv.....	Abstract
v.....	قائمة الأشكال
ix	قائمة الجداول
x.....	قائمة الرموز
xi.....	قائمة المعادلات
xii.....	فهرس المحتويات
01.....	المقدمة العامة
02.....	المراجع
04.....	الفصل 1 :أنواع الخلايا الشمسية
05.....	1.1 المقدمة
06	2.1 أنظمة الطاقة الشمسية
07.....	3.1 دور المواد النانوية لتوليد الطاقة الشمسية
08	4.1 تصنيف الخلايا الشمسية

09	5.1 أنواع الخلايا الشمسية.....
09	1.5.1 الخلايا الشمسية السيلكونية البلورية.....
11	1.1.5.1 الخلايا الشمسية أحادية البلورة السيلكونية.....
11	2.1.5.1 متعدد البلورات.....
11	2.5.1 الخلايا الشمسية من الشرائح الرقيقة.....
11	1.2.5.1 السيلكون الغير المتبلور
12	2.2.5.1 الخلايا الشمسية الكالوجينية.....
15	3.5.1 الخلايا الشمسية العضوية.....
15	1.3.5.1 الخلايا الشمسية الصبغية الحساسة.....
17	2.3.5.1 الخلايا البيروفسكايت الشمسية.....
20	3.3.5.1 الخلايا الشمسية الترادفية (المضاعفة - الثنائية).....
21	6.1 مبدأ عمل الخلية الشمسية.....
24	1.6.1 آليات الخسارة.....
25	7.1 الخصائص الأساسية للخلية الشمسية.....
32	الفصل 2 : نظرة عامة حول الخلايا الشمسية بالنقاط المحسنة للضوء
33	1.2 المقدمة
34	2.2 مبدأ عمل خلية شمسية <i>QDSCs</i>

37.....	3.2 نبذة عن مراحل تطور الخلايا الشمسية بالنقاط الكمية المحسنة QDSCs
42.....	4.2 المواد الأساسية في الخلايا الشمسية بالنقاط المحسنة
42.....	1.4.2 المواد القابلة للنقل / المستقبلية المستخدم في أكسيد معدن
43.....	1.1.4.2 الانود الضوئي من TiO₂
44.....	2.1.4.2 الانود الضوئي من ZnO
45.....	3.1.4.2 أنواع أخرى من ETMS
45.....	4.1.4.2 أكاسيد المعادن النصف الناقلة من النوع N و QDSC من النوع P
46.....	2.4.2 النقاط الكمية المحسنة QD
46	1.2.4.2 QDS الثنائية (خلائط ثنائية)
48.....	3.4.2 أقطاب العداد
49.....	4.4.2 الالكترونيات او مواد نقل الثقوب
51	5.2 السيطرة على الالتحامات
52	1.5.2 هندسة المواد
53	2.5.2 هندسة الواجهة / السطح البيني
54	6.2 قضايا الاستقرار
55	7.2 ملخص وتوقعات
56	المراجع

61.....	الفصل 3 محاكاة نمط إشتغال QDSSC بسلفاكو-أطلس
62.....	1.3.1. مقدمة
62.....	2.3.2. برنامج المحاكاة
62.....	1.2.3. تعريفات
64.....	2.2.3. المداخل و المخارج في SILVACO – ATLAS
65.....	1.2.2.3. DeckBuild
65.....	2.2.2.3. Tonyplot
66.....	3.2.3. بنية الإدخال في SILVACO – ATLAS
66.....	4.2.3. مخطط البناء العام لـ ATLAS
67.....	1.4.2.3. Mesh
68.....	2.4.2.3. Region (المناطق)
68.....	3.4.2.3. Electrode (القطب الكهربائي)
68.....	4.4.2.3. Doping (التطعيم)
68.....	5.4.2.3. Material (المواد)
69.....	6.4.2.3. Models (النماذج الفيزيائية)
69.....	7.4.2.3. Contacts (جهات الإتصال)
69.....	8.4.2.3. Interface (الواجهة)

69.....	Light.9.4.2.3(الضوء)
69	Solution Method.10.4.2.3 (طريقة الحل)
70.....	Solution Specification.11.4.2.3(تحديد وتخصيص الحل)
70.....	Extraction and plott 12.4.2.3 (استخراج البيانات و تعقيبيها)
71.....	3.3 نتائج المحاكاة.....
71.....	1.3.3 بنية الخلية الشمسية في حالة الاتزان ومخطط الطاقة في حالة الاتزان.....
74.....	2.3.3 تأثير تغيير مادة النقاط الكمية.....
78.....	3.3.3 المقارنة مع بعض النتائج التجريبية.....
79.....	4.3 الدراسة التحسينية
80.....	1.4.3 تأثير سمك الطبقة الناقلة للالكترونات ETL(TiO ₂).....
81.....	2.4.3 تأثير سمك طبقة النقاط الكمية.....
83.....	3.4.3 تأثير عمل الانتزاع للكاثود.....
85.....	4.4.3 تأثير عمل الانتزاع للأنود
87.....	5.3 الخلاصة.....
88.....	المراجع.....
90.....	الخلاصة العامة.....
92	الملخص.....

المقدمة العامة

الطاقة هي قضية حيوية بالنسبة للبشرية في الوقت الحاضر و أيضا في المستقبل [1،2]. أدى الاستهلاك الكبير للطاقة الأحفورية إلى أزمة طاقة عالمية بالإضافة إلى قضايا التلوث البيئي. لذلك ، هناك حاجة ملحة لاستكشاف الطاقة النظيفة المتجددة للمساعدة في حل هذه المشاكل.

من بين مصادر الطاقة هذه، يعتقد الكثيرون أن الطاقة الشمسية هي المورد الواعد للطاقة المتجددة نظراً لخصائصها الرائعة ، مثل الإمداد الذي لا ينضب و طبيعتها الصديقة للبيئة. على سبيل المثال ، في عام واحد، يمكن أن يتلقى سطح الأرض 3850 زيتاجول (ZJ) من الطاقة من الشمس ، مما يعني أن الطاقة الشمسية التي يمتصها سطح الأرض في ساعة واحدة أكبر من الطاقة التي يستخدمها العالم كله في السنة [1-3]. ليس هناك شك في أن الاستخدام الرشيد للطاقة الشمسية له أهمية كبيرة للبشرية في المستقبل.

الخلية الشمسية هي مركب يتوفر على ميزة رائعة في تحويل الطاقة الشمسية مباشرة إلى طاقة كهربائية اعتماداً على التأثير الكهروضوئي ويمكن استخدامها في كل مكان دون الحاجة إلى مرافق كبيرة، كما يمكن صناعتها بشكل كبير لإنتاج طاقة ضخمة. بالاستفادة من الخصائص المميزة لمصدر طاقة نظيف ومنخفض التكلفة ووفير، تعتبر التكنولوجيا الكهروضوئية من أكثر تقنيات الطاقات المتجددة الواعدة [1،4].

منذ ظهور أول خلية شمسية بلورية من السيلكون اخترعتها **Bell Labs** في عام 1954 ، شهدت تكنولوجيا الخلايا الشمسية تطوراً سريعاً بشكل كبير. وقد تم تطوير مجموعة متنوعة من الخلايا الشمسية و دخول عدد منها في الإنتاج الصناعي. عادة يمكن تصنيف الخلايا الشمسية إلى ثلاثة أجيال وفقاً لتطور المواد والتكنولوجيا [1-5،7].

في دراسة الخلايا الشمسية من الجيل الثالث ، تم التركيز على الخلايا الشمسية القائمة على النقاط الكمية.

يمكن تصنيف الخلايا الشمسية المستندة إلى النقاط الكمية (*QD*) إلى أربعة أنواع: الخلايا الشمسية بوصلة شوتكي ، و الخلايا الشمسية بالوصلة *p-n* (كلاهما متجانسة وغير متجانسة) ، و خلايا شمسية هجينة بوليميرية -نقاط كمية (*QD - polymer*) ، و خلايا شمسية متحسسة بالنقاط الكمية (*QDSCs*) [1] . تمتلك *QDSCs* مزايا عملية منها صناعة المركب منخفضة التكلفة بسبب بساطته وتمائله مع شبيبتها من الخلايا الصبغية [1]. على مدار 12 سنة الماضية قفزت كفاءة التحويل لهذا النوع من الخلايا من 1% إلى ما يقارب 13% [1].

في هذا العمل قمنا بدراسة خلية شمسية متحسسة بالنقاط الكمية بإستعمال برنامج المحاكاة سلفاكو-أطلس حيث إشتملت المذكرة على ثلاث فصول إضافة لمقدمة و خلاصة عامة. في الفصل الأول قدمنا نبذة عن مختلف أجيال الخلايا الشمسية ، مبدأ عمل الخلية الشمسية بشكل عام و كذا وسائط الخروج الكهربائية التي تستعمل في التشخيص. في الفصل الثاني عرضنا أهم مميزات و المواد المستعملة في الخلايا الشمسية المتحسسة بالنقاط الكمية (*QDSC*). في الفصل الثالث نعرض برنامج المحاكاة سلفاكو-أطلس و أيضا نتائج المحاكاة.

المراجع :

- [1] Zhenxiao Pan, Huashang Rao, a Iva'n Mora-Sero', Juan Bisquert and Xinhua Zhong, "Quantum dot-sensitized solar cells", Chem. Soc. Rev., 2018,47, 7659
- [2] R. E. Smalley, " Our energy challenge ", Abstr. Pap. Am. Chem. Soc., 2003, 226, U24.
- [3] O. Morton, " Silicon Valley sunrise", Nature, 2006, 443, 19-22
- [4] N. S. Lewis and D. G. Nocera, "Powering the planet: Chemical challenges in solar energy utilization ", Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A.,2006, 103, 15729-15735

[5] A. Hagfeldt, G. Boschloo, L. Sun, L. Kloo and H. Pettersson, "Dye-Sensitized Solar Cells", *Chem. Rev.*, 2010, 110, 6595–6663.

[6] D. Chapin, C. Fuller and G. Pearson, "A New Silicon p-n Junction Photocell for Converting Solar Radiation into Electrical Power", *J. Appl. Phys.*, 1954, 25, 676.

[7] J. Wu, Z. Lan, J. Lin, M. Huang, Y. Huang, L. Fan and G. Luo, "Electrolytes in dye-sensitized solar cells", *Chem. Rev.*, 2015, 115, 2136–2173.

الفصل الأول :

أنواع الخلايا الشمسية

1.1 المقدمة

إن التحديات و الجهود المتضافرة من قبل المجتمع العلمي جارية لتلبية الطلب العالمي على تحقيق إنتاج الطاقة بطريقة مستدامة. يعتبر الإشعاع الشمسي أحد أكثر أشكال الطاقة وفرة على وجه الأرض ، و له القدرة على تلبية الطلب على الطاقة في العالم إلى حد كبير. في غضون عام ، يصل حوالي 3850.000 إكساجول من الطاقة إلى سطح الأرض ، يتم استخدام 500 إكساجول ($10^{18}J$) منها بشكل مفيد من خلال تقنيات الحصد الحالية لدينا [1].

أجرى علماء المواد في جميع أنحاء العالم أبحاثاً مكثفة حول حصاد الطاقة الشمسية و تخزينها. هدفهم الرئيسي هو تطوير المواد الأكثر فاعلية و التي لها خصائص فريدة على مقياس النانومتر كطبقة امتصاص أساسية لتسخير الطاقة الشمسية. تم تكريس جهود مستمرة لتطوير تقنيات الحصاد المتجددة ، لا سيما عبر مسار كيميائي صديق للبيئة و العديد من التقنيات القائمة على الفراغ و غير الفراغ [1].

في الواقع ، زادت المواد النانوية نصف ناقلة من نسبة السطح إلى الحجم و التي بدورها تعزز الخصائص الكهربائية، الضوئية و انتقال الشحنة ، للجسيمات النانوية (**nanoparticules**) ذات الأشكال المختلفة ، العودات النانوية (**nanorods**)، المواد النانوية (**nanoporous**)، والنقاط الكمية (**QDs**) [1].

حاول العديد من الباحثين استخدام مواد نانوية مختلفة الشكل نظراً لخصائصها الممتازة في نقل الشحنات ، و الصيانة منخفضة التكلفة ، و التشغيل البسيط ، و مرونة القياس ، و الاستقرار ، و فجوة النطاق المتغيرة لاستخلاص أكبر قدر ممكن من الإشعاعات. بالنسبة لأنظمة توليد الطاقة الموزعة، تعد الطاقة الشمسية من أنسب الخيارات عند مقارنتها بمصادر الطاقة المتجددة الأخرى. ذكرت (**IEAPVPS**) برنامج نظام الطاقة الكهروضوئية التابع للوكالة الدولية) أنه في نهاية عام 2014 ، إجمالي الطاقة الكهروضوئية المركبة أقل من

177 جيجا وات. و المتوقع أن يصل إلى حوالي 498 جيجاوات من الطاقة المركبة بحلول نهاية عام

2019 كما هو مسجل بواسطة تقنيات IHS، هي مؤسسة متخصصة في دراسات تكنولوجيا السوق. [1-2]

2.1 أنظمة الطاقة الشمسية

التأثير الكهروضوئي (PV) هو عملية تقوم من خلالها الخلية الكهروضوئية بتحويل طاقة ضوء الشمس الممتصة إلى كهرباء. يعمل النظام الكهروضوئي بدون انبعاث ثاني أكسيد الكربون مما يعود بالفائدة على سلامة البيئة. يتم نقل طاقة الفوتون التي تمتصها المواد النانوية إلى الإلكترونات في الذرات. يوضح

الشكل 1.1 مخططاً مبسطاً لعمل خلية PV. عندما يتم الاتصال بين طبقتين مختلفتين من أنصاف النواقل

$p - n$ ، ينشأ حقل كهربائي بين طبقتي أشباه الموصلات من النوع n و p . بسبب فرق التركيز تنتقل

الإلكترونات عبر الوصلة إلى نصف الناقل من النوع p تاركة وراءها شحنة موجبة ثابتة. في الوقت نفسه

،تنتقل الثقوب عبر الوصلة تاركة وراءها شحنة سالبة ثابتة. تتحد هذه الإلكترونات و الثقوب الحرة و تختفي

عند مستوى معين، أين تنشأ منطقة نضوب عند تقاطع $p-n$ حيث لا توجد فرص أخرى لترحيل حاملات

الشحنة. تخلق هذه الشحنات الثابتة و السالبة المنفصلة حقلاً كهربائياً عبر منطقة النضوب. يوفر هذا

المجال الكهربائي لمد مجال قوة أو الجهد اللازم لدفع التيار عبر دارة خارجية. عندما يتم امتصاص طاقة

الفوتون من الشمس بواسطة طبقة أشباه الموصلات ، يتم نقلها إلى إلكترونات المادة. تحصل الإلكترونات

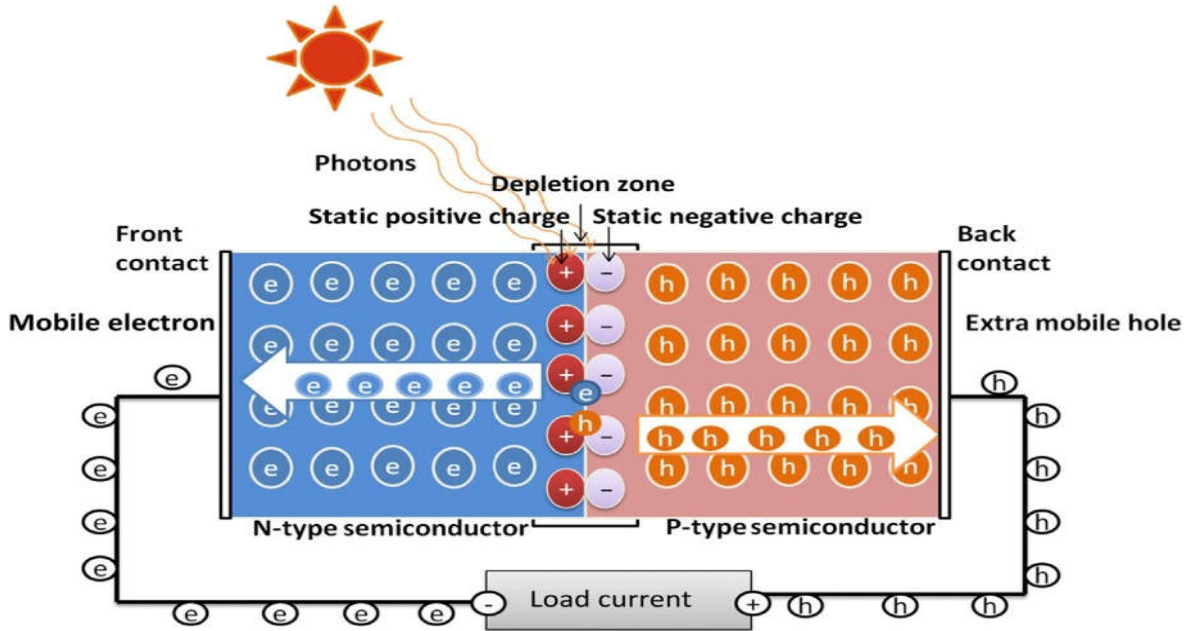
على طاقة كافية للانتقال إلى نطاق التوصيل الذي بدوره يترك "ثقب" في نطاق التكافؤ. تثار إلكترونات

التكافؤ من ذرات مادة النصف الناقل وتصبح جزءاً من التدفق أو التيار الكهربائي. يتسبب هذا الحقل

الكهربائي في تحرك الإلكترونات نحو الطرف السالب والثقوب باتجاه الموجب. عندما تكون هناك كمية

كافية من الطاقة الشمسية ، أي عندما تكون طاقة الفوتون الممتصة أكبر من نطاق الطاقة (فجوة الطاقة -

النطاق الممنوع (للمواد المستخدمة في الخلية الكهروضوئية ، تتأين الذرات و تتولد الإلكترونات الحرة مما ينتج عنه تيار كهربائي[1].



الشكل 1.1: يمثل التمثيل التخطيطي للخلية الكهروضوئية.

3.1 دور المواد النانوية لتوليد الطاقة الشمسية

تعتبر خلايا السيلكون الشمسية التقليدية مكلفة و تتعلق بعدة عوامل التي يجب التغلب عليها للحفاظ على أدائها العالي. يركز علماء تقنية النانو و الباحثون الآخرون على تطوير أجهزة خلايا شمسية أحدث بتكلفة أقل و مرنة و ذات كفاءة أكبر. أثناء التعامل مع مقياس النانومتر ، تستخدم مادة **QD** قدرتها الجديدة على النقاط الإشعاع الشمس مع الاحتفاظ بمرونتها و شفافيته. تعتبر المواد النانوية أكثر جاذبية لـ **PVs** لأن هذه البلورات النانوية النصف الناقلة تظهر تأثير التكميم في ثلاثة أبعاد محدودة (محصورة) [34]. على مستوى النانومتر ، يمكن للمواد توليد إكسيتون متعدد (عدة إكسيتونات) (**MEG**) ، حيث يكون لديها القدرة على تشكيل

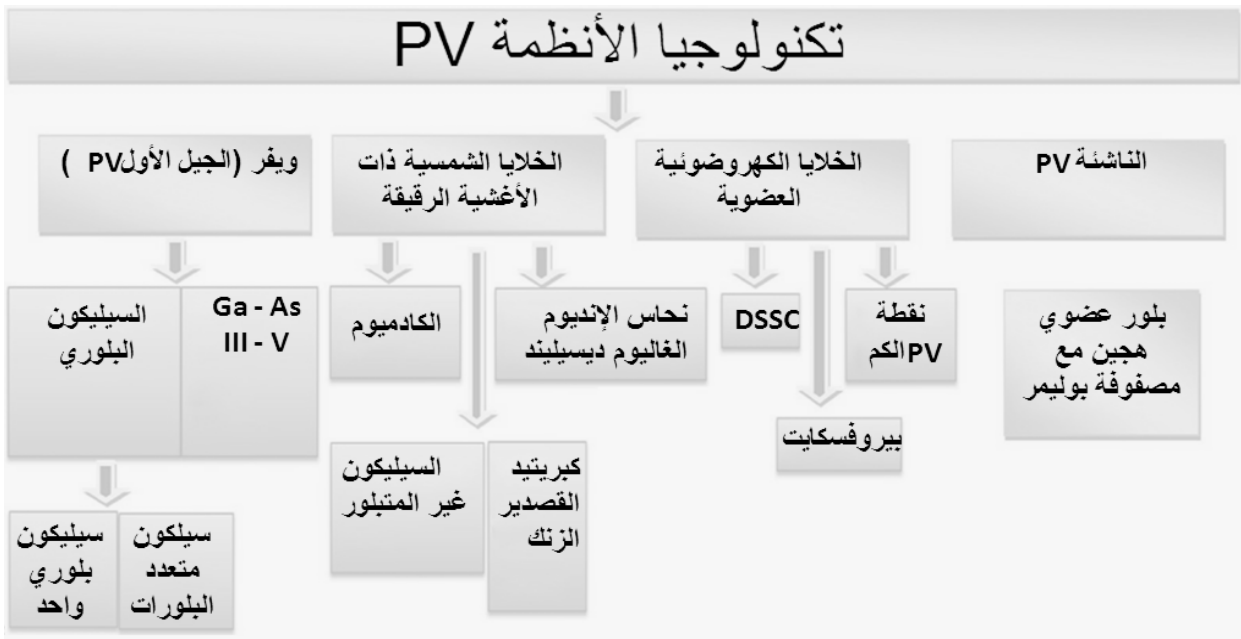
أكثر من ثنائية واحدة متولدة ضوئياً (إلكترون-ثقب) عند امتصاص فوتون واحد و من المحتمل أن يكون ذلك من أكثر الأمور طلباً لتحسين الخلايا الشمسية [1].

في الآونة الأخيرة ، كان مجال الاهتمام الرئيسي هو العثور على مواد و طرق جديدة لتسخير الطاقة الشمسية مع معالجة بدرجات الحرارة المنخفضة ، التحكم في شكل و حجم المواد النانوية ، و التطورات الجديدة في الفيزياء الضوئية باستخدام مفهوم "الإلكترون الساخن" ، و استخدام مواد ذات معامل امتصاص عالي [5-6]. كانت البداية في أوائل الثمانينيات حيث تم تصنيع مجموعة المواد $IV - VI$ ، $III - V$ ، $II - VI$ ، لدراسة تأثيرات الحجم الكمي؛ وشكلت **Cds** ، **SiQDs** ، **InP** ، **CdTe** ، **GaInP** ، **GaN** ، **GeCdSe** ، **GaAs** ، **GaP** ، **core - shell InP / ZnCdSe₂** بعض الأمثلة في هذه الفئة من المواد [10] من خلال إدخال المواد النانوية في الكهروضوئية، يمكن للمرء أن يحقق سهولة التصنيع، الكفاءة العالية، الفعالية من حيث التكلفة و كذلك السلامة البيئية. [1]

4.1 تصنيف الخلايا الشمسية

يتم تصنيف الخلايا الشمسية عموماً إلى أربعة أجيال حسب الوقت و أنواع المواد المستخدمة في تصنيعها. الخلايا الشمسية الأكثر شيوعاً المتوفرة في السوق هي الخلايا الشمسية من الجيل الأول و التي تتكون من السيلكون الأحادي و متعدد البلورات. تم إدخال الخلايا الشمسية من الجيل الثاني نظراً للاستخدام الكبير للمواد و التكلفة العالية للخلايا الشمسية من السيلكون البلوري. لتقليل استخدام المواد، تم تخفيض الحد الأقصى لسمك الشريحة لهذا الجيل من بضعة نانومترات إلى عشرات الميكرومترات. و في الوقت ذاته تم تطوير ما يسمى بالجيل الثالث للخلايا الشمسية من خلال تطوير الباحثين مفاهيم إدارة الضوء باستخدام

الخلايا الشمسية الحساسة للصبغة (DSSCs)، البيروفسكايت ، الخلايا الشمسية العضوية ، الخلايا الكيمائية الضوئية ، النقاط الكمية ، البنية النانوية ، و التشتت (الانتشار) النانوي. أما الخلايا الشمسية من الجيل الرابع فتقع في تصنيف الخلايا الشمسية الهجينة بين الجيل الأول و الثالث أو الجيل الثاني و الثالث [1].



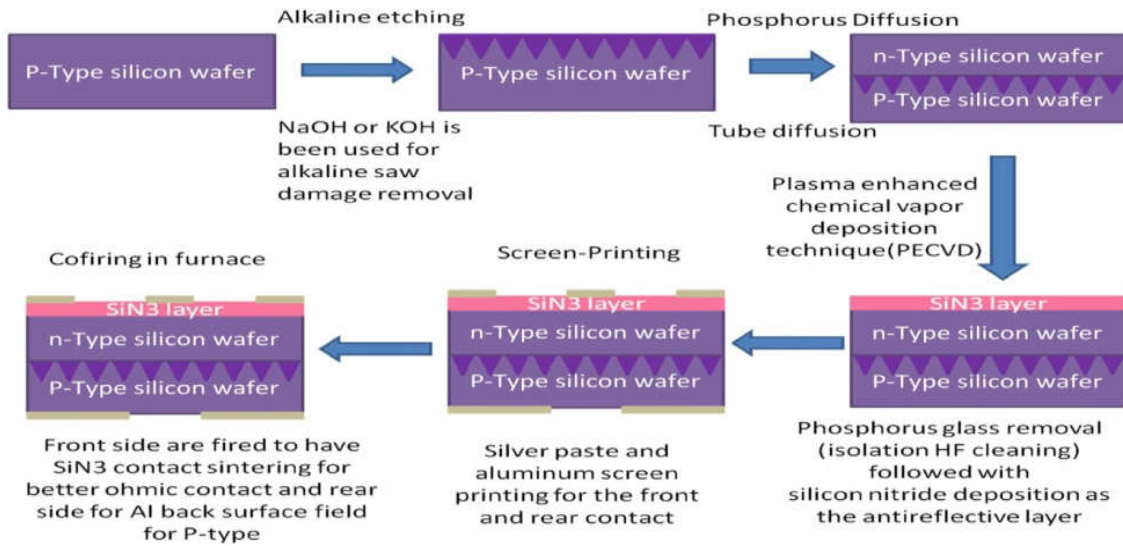
الشكل 2.1: يوضح التمثيل التخطيطي لأجيال مختلفة من الخلايا الشمسية.

5.1 أنواع الخلايا الشمسية

1.5.1 الخلايا الشمسية السيلكونية البلورية

تتكون الخلايا الشمسية أحادية البلورة أساسًا من بلورات تنمو على طول مستوى واحد (أو اتجاه واحد) من سبائك أسطوانية الشكل يتم تقطيعها بدورها إلى شرائح صغيرة. يمكن للخلايا الشمسية البلورية النموذجية التجارية أن تحقق أعلى كفاءة في حدود 18% - 20% اعتمادًا على درجة السيلكون المستخدم. في حالة

الخلايا الشمسية متعددة البلورات، يتم صهر السيلكون الخام و صبه في قالب مربع ، ثم يتم تبريده مرة أخرى و تقطيعه إلى رقائق مربعة تمامًا. هذا له العديد من القيود بسبب انخفاض نقاوتها و عدم انتظامها و مساحتها المنخفضة و الحد الأقصى للكفاءة يصل إلى 16% [7-8]. كل رقاقة من السيلكون لديها القدرة على الاحتفاظ باستطاعة قدرها $2W - 3$. من المفترض أن تقدم هذه الخلايا الشمسية القائمة على السيلكون جهدًا كهربائيًا قدره $0.6V$ عند 25 درجة مئوية من إضاءة $AM1.5$.. إذن من أجل الحصول على الطاقة المطلوبة في وحدة واحدة (وحدة شمسية)، يتم توصيل الخلايا الشمسية السيلكونية الفردية على تسلسل لزيادة الطاقة و الجهد المتوافق مع بطارية $12V$. من المعروف أن هناك مفاضلة (أو مقايضة) كبيرة بين أداء الخلية و فعالية التكلفة في تكنولوجيا الخلايا الشمسية البلورية السيلكونية الحالية. لذلك تُصنف الخلايا الشمسية من الجيل الأول إلى اثنين اعتمادًا على طرق تصنيعها: أحادية و متعددة البلورات [1].



الشكل 3.1: مخطط التصنيع لخلية شمسية سيلكونية بلورية.

1.1.5.1 الخلايا الشمسية أحادية البلورة السيلكونية

تتكون هذه الأنواع من سيليكات بلورية مفردة يتم تصنيعها من خلال طريقة *Czochralski*. عادة هذه هي الطريقة الاصطلاحية (القياسية) لتصنيع رقائق السيلكون عالية الجودة. يتم تسخين غرفة التصنيع حتى 1500 درجة مئوية لإذابة السيلكون الخام في بوتقة. تضاف ذرات الشوائب لتطعيم السيلكون إما لجعله من النوع p أو النوع n عندما يتم صهر السيلكون بالكامل ، يتم غمس العمود الدوار المثبت مع البذرة أحادية البلور و سحبها لأعلى من خلال التحكم في تدرج درجة الحرارة ، معدل السحب ، و سرعة الدوران. يتم بعد ذلك تقطيع رقائق السيلكون إلى شرائح صغيرة من السبائك. صحيح أن تكلفة الإنتاج مرتفعة للغاية لكن هذه الخلايا الشمسية تتمتع بكفاءة تحويل ممتازة و طويلة الأمد[1].

2.1.5.1 متعدد البلورات

هذه الخلايا مصنوعة من السيلكون المعاد بلورته، مقطع إلى رقائق رقيقة جداً. تكلفة التصنيع أقل من السيلكون أحادي البلور و للحصول على أفضل أداء للطاقة الشمسية الكهروضوئية ، فإنه يحتاج إلى مساحة أكبر على السطح[1].

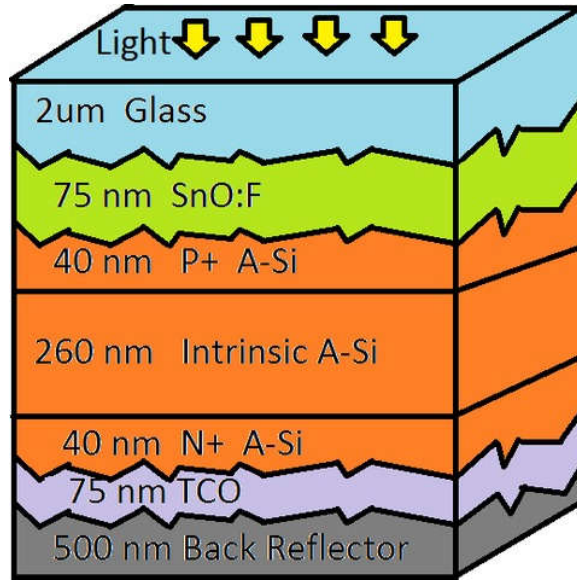
2.5.1 الخلايا الشمسية من الشرائح الرقيقة

1.2.5.1 السيلكون غير المتبلور

تتكون من طبقة رقيقة من ذرات السيلكون بدلاً من طبقة بلورية تحتوي على عدة طبقات لتشكيل بنية بلورية محددة. لديها القدرة على امتصاص الضوء حتى المترسبة منها كطبقة رقيقة جداً. و من ثم يطلق عليه أيضاً اسم الخلايا الشمسية السيلكونية الرقيقة الغير المتبلورة. تعمل هذه الأنواع من الخلايا بشكل أفضل في درجات

الحرارة المرتفعة و لكنها تتطلب ضعف مساحة السطح للحصول على نفس الطاقة الناتجة عن الخلايا الشمسية المصنوعة من السيلكون البلوري [1].

بشكل عام تتميز الخلايا الشمسية البلورية التقليدية بتكاليف عالية لذلك تعتبر تكنولوجيا النانو الناشئة مدعمة لإنتاج الألواح الشمسية المرنة و تقلل من تكاليف تركيب الخلايا الشمسية البلورية الصلبة التقليدية. إن الخلايا الشمسية المصنوعة من السليكون ذات البنية النانوية أكثر جاذبية بسبب خصائصها الممتازة المضادة للانعكاس. تتيح الخاصية الفريدة للانعكاسات الداخلية المتعددة حصر اقتناص قوي للضوء مما ينتج عنه كفاءة توليد جيدة للحاملات الحرة [1].



الشكل 4.1 : مخطط توضيحي لخلية شمسية سيلكونية من الشرائح الرقيقة.

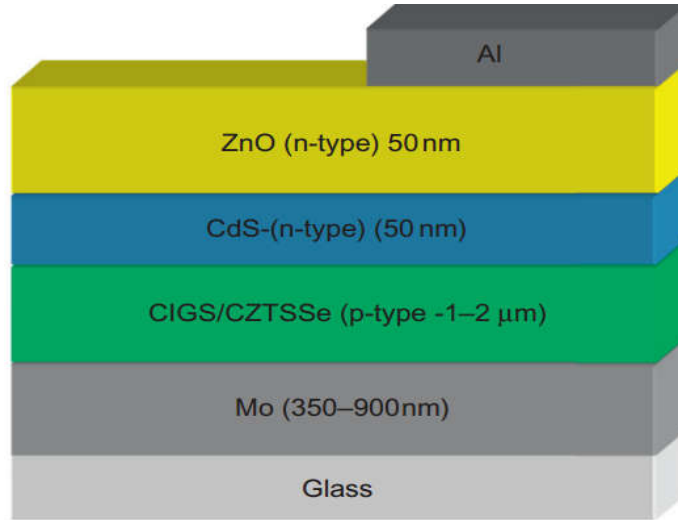
2.2.5.1 الخلايا الشمسية الكالوجينية

تصنع هذه الأنواع من الخلايا الشمسية عن طريق ترسيب طبقتين غير متجانستين محصورتين بين منطقتين ناقلتين. حظيت الخلايا الشمسية المشكلة من الكالكوبايرايت المكونة من النحاس سيلينيد الإنديوم الغاليوم

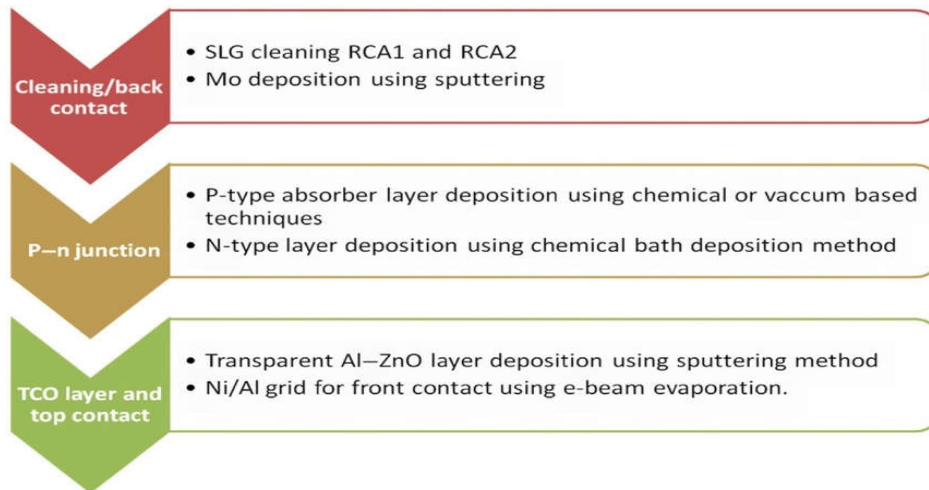
ديسلينيد (CIGS) والأغشية الرقيقة CdTe باهتمام واسع وحقت فيما بعد أعلى كفاءة للخلايا بنسبة 22.6% و 22.1% [9-10]. في حين حققت الخلايا الشمسية كبريتيد القصدير و الزنك النحاسي/سيلينيد (CZTSSe) أعلى كفاءة بنسبة 12.6%. وجاءت لتقليل التكلفة و الاستعادة من المواد الوفيرة غير السامة مع طبقة امتصاص خالية من المعادن النادرة ، كبديل لـ CIGS [9-11]. عند مقارنتها بالخلايا الشمسية السيلكونية ، تتمتع الطبقة الماصة CZTSSe بكفاءة عالية بسبب انخفاض فقدان الطاقة ويمكنها التقاط أكثر للفوتونات من الشمس. و مع ذلك فإن مستويات الكفاءة الفعلية مقارنة بالسيلكون لا تزال منخفضة نوعا ما. تُظهر هذه الأنواع من الخلايا الشمسية ، المكونة من الأغشية الرقيقة المذكورة أعلاه معامل امتصاص شمسي مرتفع ، يتطلب سماكة طبقة 2.5 ميكرومتر ، مقارنة بـ 170 μm إلى 250 μm لخلايا السيلكون الشمسية [12]. يوضح الشكل 5.1 الخلية الشمسية الأساسية القائمة على CIGS حيث تتكون من غشاء رقيق متعدد الطبقات يتم ترسيبه على طبقة سفلية مصنوعة من الزجاج أو المعدن أو رقائق البوليمر . أنصاف النوافل من النوع p و n المستخدمة في هذه الخلية الكهروضوئية هي CIGS وكبريتيد الكاديوم Cds ، على التوالي. و هي محصورة بين التلامس الخلفي للكهربائي الموجب للموليبيدينوم وأكسيد الموصل الشفاف الذي يعمل كتلامس كهربائي سلبي. كما أسلفنا ، يعد $\text{Cu}_2\text{ZnSnS}_4$ (CZTS) مادة بارزة أخرى للخلايا الشمسية ذات الأغشية الرقيقة وهي مادة غير مكلفة ، وفيرة ، وغير سامة ، وأيضًا طبقة ماصة منخفضة التكلفة وخالية من المعادن النادرة ومناسبة لاستخدامها كبديل لطبقة امتصاص CIGS في الطبقة الرقيقة [13].

في المقياس النانوي ، تحتوي المواد على نسبة سطح إلى حجم عالية اعتمادًا على الأشكال المختلفة التي تم إنشاؤها ، مثل الأسلاك النانوية ، المخاريط النانوية ، الأعمدة النانوية ، و QDs . سيكون إنشاء الدعامات النانوية مفيدًا نظرًا لأنه يزيد من مساحة الوصلة ، و يقلل المسافة بين مكان توليد الحاملات ومكان

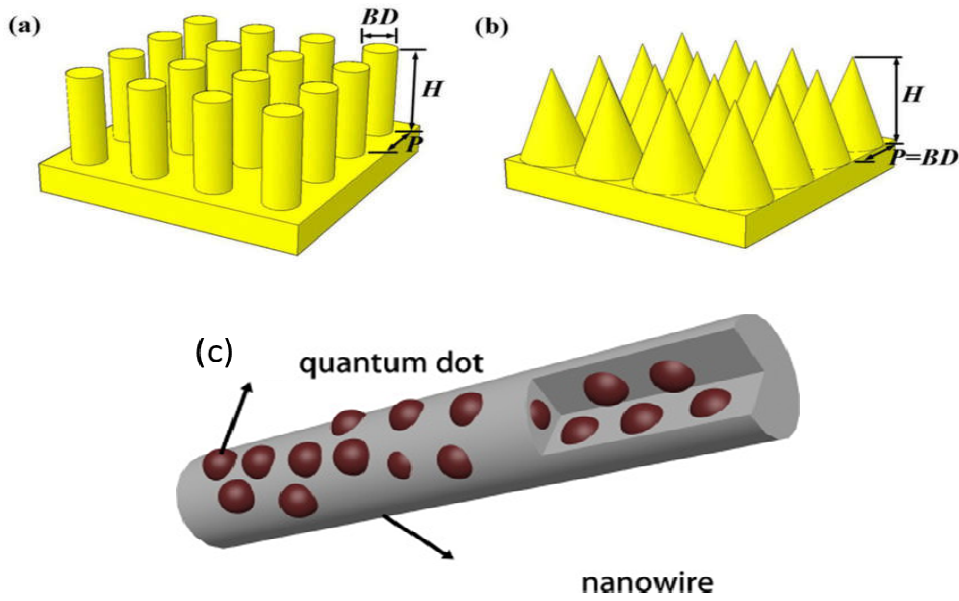
تجميعها ، يسمح باحتجاز فعال للضوء ، يقلل الانعكاس ، يحسن ضبط فجوة النطاق ، يزيد من تحمل و إستعاب العيوب ، و تجميع الحاملات المتولدة بدون أي تكلفة إضافية في تصنيع الخلايا الشمسية[1].



الشكل 5.1: الهيكل الأساسي لخلية شمسية كالكوجنية رقيقة



الشكل 6.1: تمثيل تخطيطي لخطوات ترسيب الخلايا الشمسية الكالكوجنية.

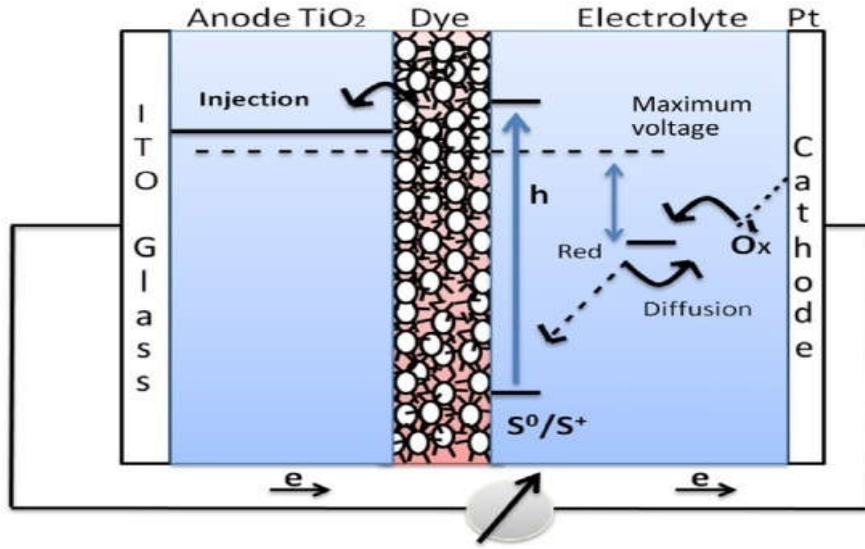


الشكل 7.1: تكنولوجيا النانو (a) العودات، (b) المخاريط، (c) الأسلاك والنقاط الكمية

3.5.1 الخلايا الشمسية العضوية

1.3.5.1 الخلايا الشمسية الصبغية الحساسة

تختلف أنواع الجيل الثالث هذه كثيرًا عن الجيلين الأول والثاني لأنها لا تعتمد على الوصلة **pn** التقليدية لفصل ناقلات الشحن المتولدة ضوئيًا. وبدلاً من ذلك، فإنها تتضمن مستويات طاقة متعددة، توليد متعدد الأكسيتونات، وتكون قادرة على اقتناص الحاملات قبل استرخائها الحراري [3-14]. يعتبر هذا الجيل أكثر فائدة بسبب إمكانيات ضبط النطاق، القدرة على التقاط الضوء من أجزاء مختلفة من الطيف الشمسي، تصنيع المركبات على ركائز مرنة [15]. أصبحت الخلايا الشمسية الصبغية (**DSSCs**) بديلاً جذاباً لخلايا السيلكون الشمسية التقليدية بسبب الإنتاجية العالية والتكلفة المنخفضة وسهولة التصنيع. يوضح الشكل 8.1 النظام الضوئي الكيمائي للخلية الصبغية المتشكل من طبقة نصف الناقل بين الانود والالكتروليت [1].



الشكل 8.1: تمثيل تخطيطي لخلية شمسية صبغية حساسة للضوء.

تُستخدم الجسيمات النانوية TiO_2 في طور **Anatase** بشكل عام كطبقة أنود لـ **DSSC** بسبب ثباتها و طبيعتها غير السامة. في هذه الأنواع تمتص صبغة الروثينيوم ضوء الشمس الساقط للحث على نقل الإلكترون المثار من مدار منخفض المستوى إلى مدار أعلى منه. يتم حقن الإلكترون المثار بواسطة الصبغة إلى نصف الناقل (TiO_2) و يؤدي الانتشار الكيميائي للإلكترونات من طبقة TiO_2 إلى الطبقة الموصلة لأكسيد القصدير الإنديوم (**ITO**) إلى إنشاء دارة خارجية. تعود الإلكترونات إلى الخلية لإكمال الدارة وإعادة الصبغة إلى حالتها "الطبيعية" باستخدام محلول إلكتروليت و الذي يساعد في نقل الإلكترونات عبر الخلية. تشبه الخلايا "شطيرة" يتم فيها تراكب زجاجيين موصلين. يستخدم قطب البلاتين بشكل عام كجزء من الكاثود ، و كإلكتروليت مزيج من يوديد / ثلاثي يوديد ، ثنائي الأكسدة والإرجاع. العائق الرئيسي لـ **DSSC** هو استقرار الصبغة و الإلكترونيات العضوية السائلة. ركز العديد من الباحثين على إيجاد بدائل للخلايا الشمسية الصبغية [16-17]. تتمثل الإمكانيات الرئيسية لاستخدام المواد النانوية في **DSSC** في استخدام الطاقة الزائدة

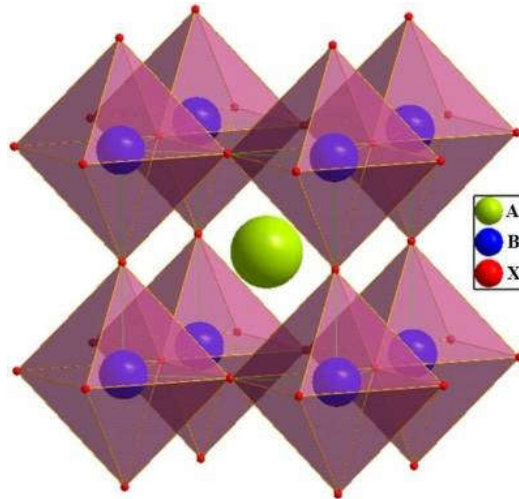
في الفوتونات الممتصة للتوليد متعدد الإكسيتونات (MEG). إثارة إلكترونات متعددة من نطاق التكافؤ إلى نطاق التوصيل قد يزيد بشكل كبير من كفاءة تحويل الطاقة لخلية شمسية. و من ثم أنصاف النوافل النانوية هذه تلعب دورًا مهمًا في كفاءة تحويل الطاقة ، و التي بدورها تحكم استدامة الطاقة في الخلايا الشمسية الكهروضوئية[1].

2.3.5.1 خلايا بيروفسكايت الشمسية

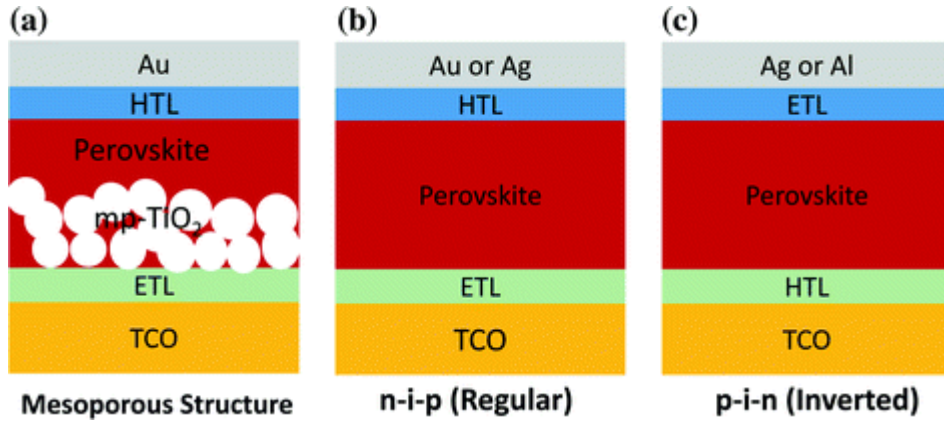
يتمثل العائق الرئيسي لـ DSSC في تحضير الأصباغ العضوية و استقرارها الكيميائي. و من ثم تم تقديم نوع جديد من المواد تسمى **perovskites** و **QDs** كبديل للأصباغ الجزيئية و حققت كفاءة قياسية تتجاوز 20% في مساحة صغيرة جدًا. ظهرت الخلايا الشمسية من بيروفسكايت الهاليد غير العضوي-عضوي (**Organic Inorganic halide perovskite**) - مؤخرًا كأجهزة واعدة ذات بنية نانوية فعالة من حيث التكلفة و عالية الكفاءة. تبدو جذابة بشكل خاص كنوع خلايا شمسية من الجيل الثالث نظرًا لكفاءتها العالية في تحويل الطاقة. تم تطوير أول خلية شمسية من البيروفسكايت عام 2009 بواسطة **Miyasaka** وزملائه كانت كفاءة تحويل الطاقة 3.81%. أما الآن فإن الحد الأقصى من كفاءة تحويل الطاقة التي تم الإبلاغ عنها رسميًا للخلية الشمسية من البيروفسكايت تزيد عن 21% و هي نسبة أعلى من تلك التي أعلن عنها في الخلايا الشمسية ذات الشرائح الرقيقة العضوية. تم الحصول على أعلى كفاءات التحويل للخلايا الشمسية من البيروفسكايت بشكل أساسي باستخدام مواد هاليد الرصاص مثل الأمونيوم. في بنية التبلور المعروفة بالبيروفسكايت مع الصيغة العامة ABX_3 (هالوجينات X=)، يحتل الكاتيون **A** موقعًا مكعبًا ثماني السطوح بينما يحتل الكاتيون **B** موقعًا ثماني السطوح لخلية وحدة مكعبة. عندما يتم استخدام أنيون O^{2-} ، عادة ما يكون **A** و **B** ثنائي التكافؤ و رباعي التكافؤ. توجد أيضًا تركيبات أخرى. يسمح البيروفسكايت المحتوي على

أنيونات الهالوجين للكاثيونات أحادية التكافؤ و ثنائية التكافؤ في المواقع **A** و **B** بتحقيق حيادية الشحنة. تتبلور مادة بيروفسكايت هاليد الرصاص غير العضوية هذه بالنوع **ABX₃**. حيث **A** عبارة عن كاتيون ميثيل أمونيوم عضوي ، و **B** هو **Pb** أو **Sn**، و **X** هو أنيون هاليد. يجب أن يكون حجم الكاتيون **A** مناسباً لتشكيل بنية بيروفسكايت متراسة بشكل جيد و يجب أن يتناسب مع الفراغ المحصور بين أربعة ثمانيات الأوجه **MX₆** متشاركة الزوايا الركنية [1].

يتم تقدير قابلية تشكيل البيروفسكايت بناءً على عامل التسامح الهندسي الخاص به. في مختلف مواد بيروفسكايت هاليد الرصاص، تم قياس يوديد ميثيل أمونيوم الرصاص مع فجوة نطاق تبلغ حوالي 1.5-1.6 إلكترون فولت مع طيف امتصاص ضوئي يصل إلى طول موجي بحدود 800 نانو متر . يتم استخدامه بكثرة كعازل ضوئي في الخلايا الشمسية [1].



الشكل 9.1: بيئة البيروفسكايت.

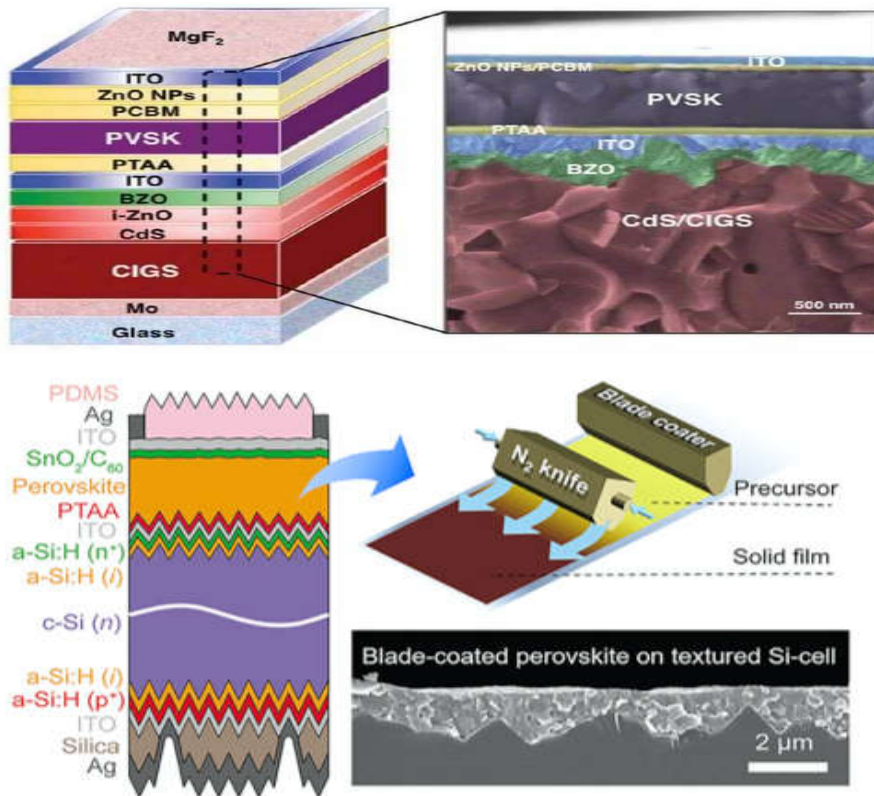


الشكل 10.1: مختلف طبقات خلايا بيروفسكايت الشمسية.

تصنف خلايا البيروفسكايت الشمسية إلى نوعين. يوضح الشكل 10.1 . خلية البيروفسكايت الشمسية ، و التي تحتوي على طبقات TiO_2 المدمجة و المسامية. أما النوع الثاني هو خلايا بيروفسكايت الشمسية المترسبة بالتبخير الفراغي والتي تتشكل من الجزيئات العضوية الصغيرة مع طبقة TiO_2 مدمجة واحدة فقط. تحتوي خلايا البيروفسكايت الشمسية على 40 نانو متر تقريباً من طبقة TiO_2 المدمجة على أكسيد موصل شفاف. عندما يمتص البيروفسكايت ($\text{CH}_3\text{CH}_2\text{NH}_3\text{PbX}_3$) الموجود في الطبقات المسامية الضوء ، تتولد الأكسيتونات (أزواج الثقوب و الإلكترونات) حيث تكون الإلكترونات على نطاق التوصيل (3.93eV) والثقوب على نطاق التكافؤ (-5.43eV) على الفور ، يتم فصل الأكسيتونات عن طريق حقن الإلكترونات في TiO_2 (-4.0 إلكترون فولت) و نقل الثقوب إلى قطب البلاتينيوم (-5.0eV) مما يشكل تياراً ضوئياً في الخلية الشمسية. بالإضافة إلى ذلك ، يمكن تصنيع مركبات الجيل الثالث بسهولة باستخدام تقنيات صناعية بسيطة قادرة على تصنيع الخلايا الشمسية البوليمرية. على الرغم من محدودية استقرار وأداء هذا الجيل من أجهزة الخلايا الشمسية و كونها ما تزال في نطاق المختبر ، إلا أنها تتمتع بإمكانيات كبيرة و يمكن تسويقها بسهولة في المستقبل القريب [3]

3.3.5.1 الخلايا الشمسية الترادفية (المضاعفة -الثنائية)

تقع الخلايا الشمسية من الجيل الرابع في فئة الأجيال الافتراضية (تسمى أيضا بالهجينة) المكونة من مواد مركبة (*composites*). هذه المركبات مصنوعة من بوليمرات ممزوجة بالجسيمات النانوية لتكون لها خصائص طبقة ماصة واحدة. و يمكن تكديسها أو تجميعها أكثر لتشكيل طبقات رقيقة متعددة الأطياف أرخص ثمناً و أكثر كفاءة من أي جيل آخر من الخلايا الشمسية [18]. من أجل زيادة كفاءة الخلية الشمسية ، يتم نحت الطيف الشمسي إلى أقسام مختلفة لامتصاص منطقة الطول الموجي بأكملها. يشتمل جهاز الخلايا الشمسية الترادفية على خلية شمسية علوية لامتصاص الفوتونات عالية الطاقة و سفلية لامتصاص الفوتونات النافذة عبر الخلية الأمامية و طبقة تعمل كصدادة بينهما [4].



الشكل 11.1: أمثلة عن الخلايا الشمسية الترادفية.

6.1 مبدأ عمل الخلية الشمسية

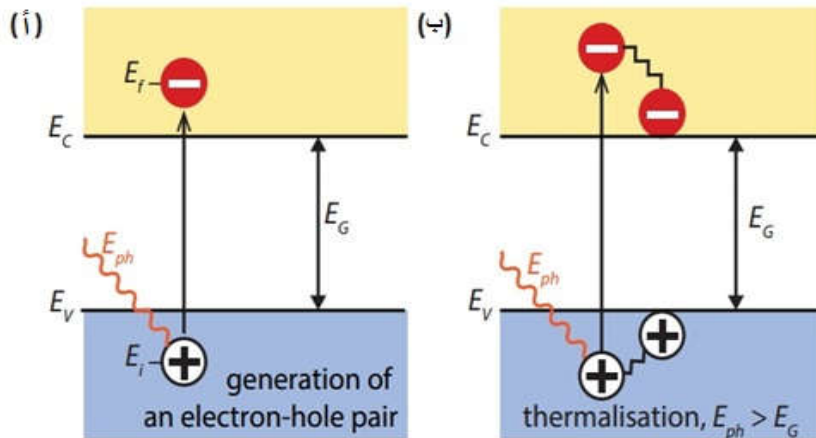
يعتمد مبدأ عمل الخلايا الشمسية على التأثير الكهروضوئي، أي توليد فرق جهد عند التقاء مادتين مختلفتين استجابة للإشعاع الكهرومغناطيسي. يرتبط التأثير الكهروضوئي ارتباطاً وثيقاً بالتأثير الكهروضوئي، حيث تمتص المادة الضوء فتنبعث الإلكترونات بتردد أعلى من تردد عتبة المادة. في عام 1905، أدرك ألبرت أينشتاين أن هذا التأثير يمكن تفسيره بافتراض أن الضوء يتكون من كميات طاقة محددة جيداً، تسمى الفوتونات. تعرف طاقة هذا الفوتون بواسطة العلاقة $E = h\nu$.

حيث h هو ثابت بلانك و ν هو تردد الضوء. لتفسيره للتأثير الكهروضوئي، حصل أينشتاين على جائزة نوبل في الفيزياء عام 1921 [19].

يمكن تقسيم الفعل الفوتوفلطائي إلى ثلاثة عمليات أساسية:

أ. توليد حاملات الشحنة نتيجة امتصاص الفوتونات في أنصاف النواقل التي تشكل الوصلة

يعني امتصاص الفوتون في مادة ما أن طاقته تُستخدم لإثارة إلكترون من مستوى طاقة ابتدائي E_i إلى مستوى طاقة أعلى E_f ، كما هو موضح في الشكل 12.1 (أ). لا يمكن امتصاص الفوتونات إلا إذا كانت مستويات طاقة الإلكترون E_i و E_f موجودة بحيث يكون الاختلاف بينهما يساوي طاقة الفوتون، $h\nu = E_f - E_i$.

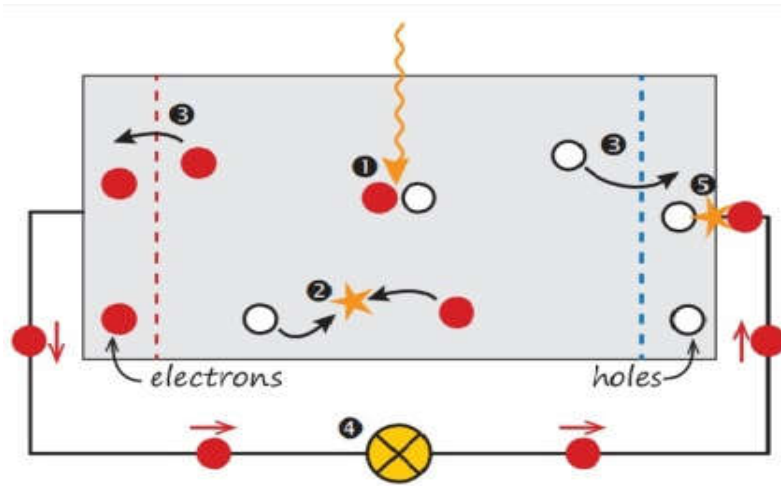


الشكل 12.1: (أ) توضيح امتصاص الفوتون في أنصاف النواقل مع نطاق الطاقة E_g . الفوتون مع الطاقة $E_{ph} = h\nu$ يثير إلكترونًا من E_i إلى E_F في E_i يتم إنشاء ثقب. (ب) إذا كان $E_{ph} > E_g$ ، يتم التخلص من جزء من الطاقة بالاسترخاء الحراري.

في النصف الناقل المثالي ، يمكن للإلكترونات أن تملأ مستويات الطاقة تحت ما يسمى حافة نطاق التكافؤ E_V و فوق ما يسمى حافة نطاق التوصيل E_C . بين هذين النطاقين لا توجد حالات طاقة مسموح بها، والتي يمكن أن تسكنها الإلكترونات ومن ثم فإن فرق الطاقة هذا يسمى بالنطاق الممنوع $E_G = E_C - E_V$. إذا وصل الفوتون ذو الطاقة الأصغر من E_G إلى نصف ناقل مثالي ، فلن يتم امتصاصه ولكنه سوف يجتاز المادة دون تفاعل. في أنصاف النواقل الحقيقية لا تكون نطاقات التكافؤ و التوصيل مسطحة و لكنها تختلف باختلاف ما يسمى بشعاع الموجة k الذي يصف الاندفاع أو كمية حركة الإلكترون في النصف الناقل. و هذا يعني أن طاقة الإلكترون تعتمد على زخمه (اندفاعه) بسبب التركيب الدوري لبلورة أنصاف النواقل. إذا حدث أن الحد الأقصى لنطاق التكافؤ و الحد الأدنى لنطاق التوصيل عند نفس المتجه k ، فيمكن إثارة الإلكترون من نطاق التكافؤ إلى نطاق التوصيل دون تغيير في الزخم. تسمى هذه أنصاف النواقل مادة ذات النطاق المباشر. إذا لم يكن بالإمكان إثارة الإلكترون دون تغيير زخمه، فإننا نتحدث عن مادة ذات نطاق غير مباشر. يمكن للإلكترون فقط تغيير زخمه عن طريق تبادل الزخم مع البلورة، أي عن طريق تلقي الزخم أو إعطاء الزخم للفونونات (لاهتزازات الشبكة البلورية). إن معامل الامتصاص في مادة ذات نطاق مباشر أعلى بكثير مما هو عليه في مادة ذات نطاق غير مباشر، و بالتالي فإن أنصاف النواقل الماصة يمكن أن تكون أرق بكثير. [19]

إذا تم إثارة إلكترون من E_i إلى E_f ، فسيتم إنشاء فراغ في E_i هذا الفراغ يتصرف كجسيم ذو شحنة أولية موجبة ويسمى ثقب. وبالتالي يؤدي امتصاص الفوتون إلى تكوين زوج إلكترون ثقب، أين يتم تحويل الطاقة الإشعاعية للفوتون إلى الطاقة الكيميائية للزوج إلكترون-ثقب. كفاءة التحويل القصوى من الطاقة الإشعاعية إلى الطاقة الكيميائية محدودة بالديناميكا الحرارية. يقع هذا الحد الديناميكي الحراري بين 67% لأشعة الشمس غير المركزة و 86% لأشعة المركزة بالكامل. [19]

ب. فصل حاملات الشحنات المتولدة بالضوء عند الوصلة



الشكل 13.1: يوضح نموذج خلية شمسية بسيط للغاية.

- 1 يؤدي امتصاص الفوتون إلى توليد زوج ثقب إلكترون. 2 الإلكترونات و الثقوب سوف تلتحم.
- 3 فصل الإلكترونات و الثقوب 4 يمكن استخدام الإلكترونات المفصولة لتشكيل دائرة كهربائية 5 بعد مرور الإلكترونات عبر الدارة، سوف تلتحم مرة أخرى مع الثقوب.

غالبًا ما سوف يلتحم زوج الثقب و الإلكترون، أي أن الإلكترون سوف يعود إلى مستوى الطاقة الأولي E_1 ، كما هو موضح في الشكل 13.1 ② سيتم بعد ذلك إطلاق الطاقة إما على شكل فوتون (إعادة الالتحام المشع) أو نقلها إلى إلكترونات أخرى أو ثقوب (الالتحام غير المشع). إذا أردنا استخدام الطاقة المخزنة في زوج ثقب الإلكترون لأداء عمل الدارة خارجية، فيجب أن تكون الأغشية الشبه المنفذة على جانبي المنطقة الماصة، بحيث يمكن للإلكترونات أن تتدفق فقط من خلال غشاء واحد ويمكن للثقوب فقط التدفق للخارج من خلال الغشاء الآخر، كما هو موضح في الشكل 13.1 ③. في معظم الخلايا الشمسية، تتكون هذه الأغشية من مواد من النوع p و n يجب تصميم خلية شمسية بحيث تصل الإلكترونات والثقوب إلى الأغشية قبل إعادة التحامها، أي أن الوقت الذي تتطلبه حوامل الشحن للوصول إلى الأغشية يجب أن يكون أقصر من عمرها الافتراضي. و هذا يحد من سمك منطقة الامتصاص. [19]

ت. تجميع حاملات الشحنة المولدة بالضوء عند أطراف الوصلة

يتم استدراج حاملات الشحنة من الخلايا الشمسية عبر التماس الكهربائي بحيث يمكنها أداء العمل في دارة خارجية الشكل 13.1 ④ أخيرًا، تتحول الطاقة الكيميائية لأزواج الثقوب الإلكترونية إلى طاقة كهربائية. بعد مرور الإلكترونات عبر الدارة، سوف تلتحم مع الثقوب في السطح البيني بين التماس ومنطقة الإمتصاص، كما هو موضح في الشكل 13.1 ⑤.

1.6.1 آليات الخسارة

إن أهم آليتين من آليات الخسارة في الخلايا الشمسية ذات نطاق الممنوع الموحد (وصلات متجانسة) هي عدم القدرة على تحويل الفوتونات ذات الطاقات التي تقل طاقتها إلى كهرباء و كذلك حرارة طاقات الفوتون التي تتجاوز النطاق الممنوع، كما هو موضح في الشكل 12.1 (أ) تؤدي هاتان الآليتان وحدهما إلى خسارة

حوالي نصف الطاقة الشمسية الناتجة عن عملية التحويل وبالتالي فإن كفاءة تحويل الطاقة القصوى لخلية شمسية أحادية الوصلة تكون أقل بكثير من الحد الديناميكي الحراري [19]

7.1 الخصائص الأساسية للخلية الشمسية

يمكن للخلية الشمسية المضيئة أن توفر جهدًا ضوئيًا معينًا عند تيار ضوئي معين. يُطلق على قيمة التيار الضوئي والجهد الضوئي التي يمكنها تشغيل الخلية الشمسية بنقطة الإشتغال. على وجه الخصوص يتم تحديد هذه النقطة للخلية الشمسية بمقاومة الحمل R_L حسب قانون أوم:

$$R_L = \frac{V}{I} \quad (1.1)$$

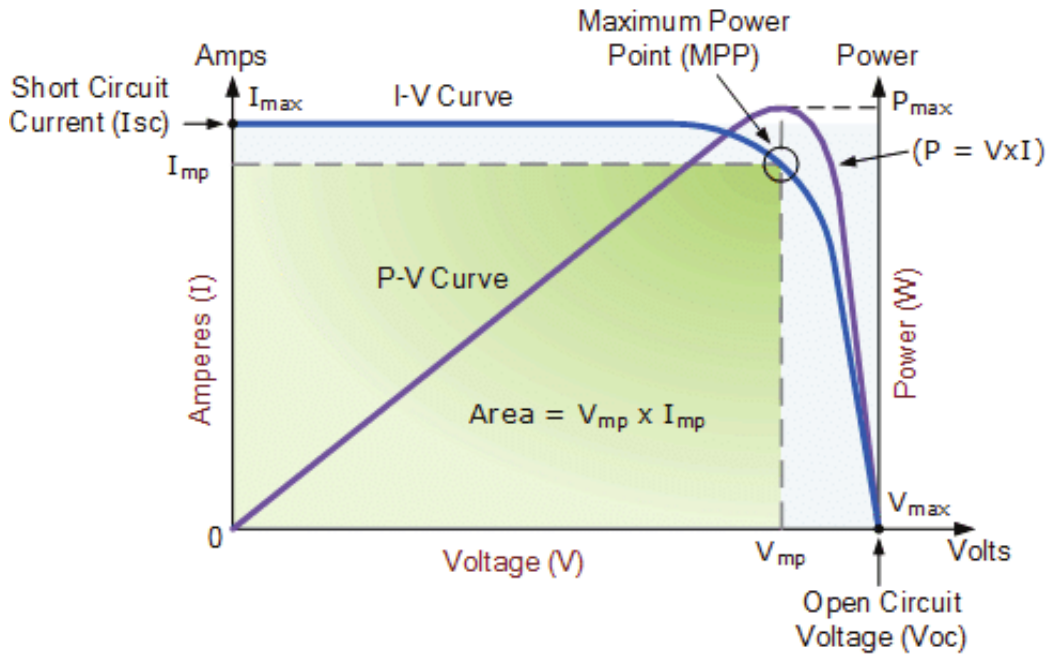
حسب قانون أوم ، الجهد الضوئي يكون منخفض جدًا إذا كانت R_L منخفضة جدًا ، و التيار الضوئي يكون منخفض جدًا عند R_L عالية جدًا. نعرف ظروف الدارة القصيرة و الدارة المفتوحة للخلية الشمسية على أنها لما R_L تساوي صفر أو أنها مرتفعة بلا حدود على التوالي. نعرف قيم التيار الضوئي والجهد الضوئي في ظروف الدارة القصيرة و المفتوحة، على التوالي، بتيار الدارة القصيرة I_{sc} و"فولطية الدارة المفتوحة V_{oc} ". و عليه تكون الطاقة الكهربائية المحررة من الخلية الشمسية عند ظروف تشغيل الدارة القصيرة (ينعدم الجهد) و المفتوحة (ينعدم التيار) لخلية شمسية معدومة [20].

خاصية تيار-جهد (خاصية $I - V$) للخلية الشمسية هي تمثيل لجميع نقاط التشغيل الممكنة في مجال معين. يوضح الشكل 14.1 شكل تخطيطي للخاصية $I - V$ لخلية شمسية تحت الإضاءة. هناك تركيبة واحدة (متفردة) للتيار والجهد حيث تكون طاقة الخلية الشمسية أكبر ما يمكن (I_{mp} و V_{mp} ، على التوالي). هذه النقطة في الخاصية $I - V$ للخلية الشمسية المضيئة تسمى بنقطة الطاقة العظمى (mpp).

$$P_{mmp} = I_{mp} \cdot U_{mp} \quad (1.2)$$

يمكن قياس قيم I_{sc} و V_{oc} بسهولة. لذلك، من الأفضل تحديد الطاقة العظمى لخلية شمسية انطلاقاً من I_{sc} و V_{oc} وسيط إضافي بدلاً من تحديدها مباشرة من I_{mp} و U_{mp} . نعرف الوسيط الإضافي بمعامل الشكل (أو معامل الإمتلاء) وهو النسبة بين جداء I_{mp} و U_{mp} على جداء I_{sc} و V_{oc} . تصف هذه القيمة المقدار الذي يتم به ملء المستطيل $-V_{oc}I_{sc}$ بواسطة المستطيل $-U_{mp}I_{mp}$ [20].

$$FF = \frac{I_{mp} \cdot U_{mp}}{I_{sc} \cdot V_{oc}} \quad (1.3)$$



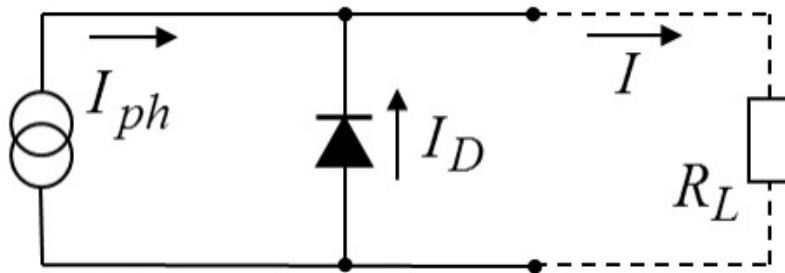
الشكل 14.1: أمثال لخاصية التيار و الجهد (أ) و خاصية الاستطاعة و الجهد (ب) لخلية شمسية تحت الإضاءة. يتم الإشارة إلى كثافة تيار الدارة القصيرة ، جهد الدارة المفتوحة ، نقطة الاستطاعة العظمى و الجهد و تيار الدارة القصيرة عند أعظم نقطة طاقة بواسطة I_{sc} و V_{oc} و mpp و V_{mp} و I_{mp} ، على التوالي.

الوسيط الرابع لوصف إشتغال الخلية الشمسية هو مردود التحويل (أو كفاءة التحويل) η . هو النسبة بين الإستطاعة المستخرجة من mpp للخلية الشمسية و إستطاعة ضوء الشمس الذي تضاء به الخلية الشمسية P_{Sun} . [20]

$$\eta = FF \frac{I_{sc} \cdot V_{oc}}{P_{Sun}} \quad (1.4)$$

تعد كفاءة تحويل الطاقة الشمسية معيارًا حاسمًا لتكاليف و استدامة إنتاج الطاقة الكهروضوئية. كلما زادت قيمة η ، انخفضت كمية المواد و المساحة اللازمة لمحطة الطاقة الكهروضوئية لإشعاع P_{inst} معين.

تم توفير الكثير من الجهد في الماضي و سيستمر كذلك في المستقبل (1) لدراسة المعايير الأساسية التي تتحكم في η لأنواع مختلفة من الخلايا الشمسية ، (2) في علوم المواد لاكتشاف المواد المناسبة و تركيبات المواد التي توفر قيمة عالية لـ η (3) لتطوير التقنيات التي تسمح بالوصول إلى القيم الفضلى لـ η في الإنتاج الضخمة و بأقل قدر ممكن في الموارد. [20] يتم التعبير عن الوظيفتين الأساسيتين للخلية الشمسية بواسطة عنصرين مختلفين في الدارة المكافئة للخلية الشمسية المثالية (الشكل 15.1).



الشكل 15.1: دائرة مكافئة لخلية شمسية مثالية تحتوي على مولد ضوئي وصمام ثنائي لفصل الشحن و متصلة بـ R_L .

العنصر الأول هو منبع التيار من الإضاءة أي مولد التيار الضوئي. العنصر الثاني يجب أن يحقق شرط فصل الشحنات، أي يسمح للتيار أن يمر عبره في اتجاه واحد و لكن ليس في الإتجاه الآخر . هذه الخاصية تميز الديود (الصمام الثنائي)، العنصر الثاني في الدارة المكافئة للخلية الشمسية المثالية. يتم وصف التيار عبر الصمام الثنائي (I_D) بواسطة المعادلة [20]:

$$I_D = I_0 \left[\exp\left(\frac{q \cdot V}{T \cdot K_B}\right) - 1 \right] \quad (1.5)$$

تحتوي معادلة الصمام الثنائي على عامل التناسب الذي يسمى تيار تشبع الصمام الثنائي (I_0).

تيار تشبع الصمام الثنائي هو خاصية محددة لكل خلية شمسية اعتمادًا على مواد الامتصاص، التماسات الناقلية وكذلك على هندسة الخلية (تصميم). يتضاعف تيار تشبع الصمام الثنائي أسياً مع الجهد المباشر جداء q قسمة الجداء K_B مع T . عند الجهد الصفري يجب أن ينعدم التيار المباشر للصمام الثنائي. عند الجهد السالب ، ينخفض تيار الصمام الثنائي إلى أدنى مستوى سلبي إلى غاية I_0 (الاتجاه العكسي). [20]

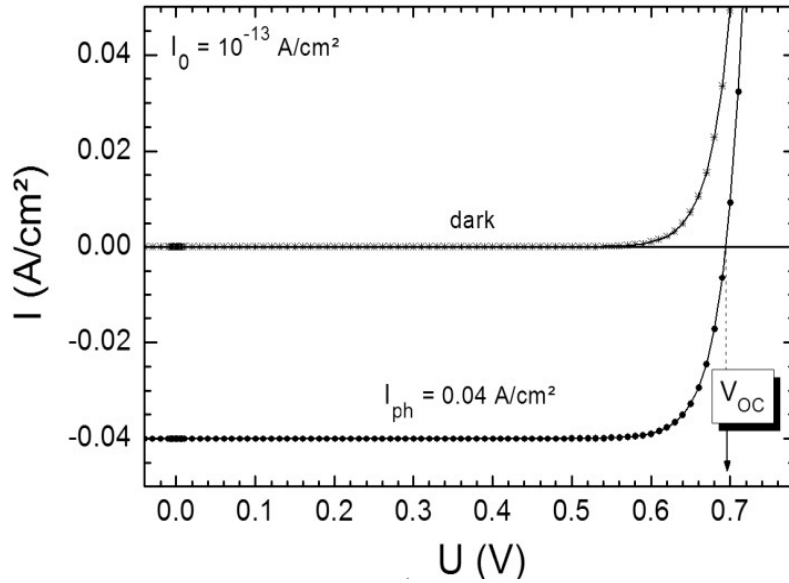
تكون مقاومة الصمام الثنائي المثالي منخفضة للغاية في الاتجاه المباشر وكبيرة جدًا في الاتجاه العكسي. يتدفق التيار الضوئي عبر مقاومة الحمل R_L ، أي أن التيار الضوئي لا يتفرع عبر الصمام الثنائي. التيار الضوئي هو عكس تيار الصمام الثنائي ويجب طرحه منه للحصول على التيار الصافي الذي تولده الخلية ككل. ينتج عن هذا معادلة الصمام الثنائي للخلية الشمسية المثالية [20]:

$$I = I_0 \left[\exp\left(\frac{q \cdot V}{T \cdot K_B}\right) - 1 \right] - I_{ph} \quad (1.6)$$

يوضح الشكل 16.1 الخصائص $I - V$ لخلية شمسية مثالية في الظلام وتحت الإضاءة. تستخدم المعادلة (1.6) لتحليل خصائص $I - V$ للخلايا الشمسية المضيئة بإعتبار I_{ph} مساويًا لـ I_{sc} (تيار الدارة القصيرة هو

نفسه أكبر تيار ضوئي تنتجه الخلية). عادة القيم النموذجية لتيار الدارة القصيرة I_{sc} هي في حدود عشرات

ملي أمبير/لوحة السنتيمتر مربع عند $AM1.5$. [20].



الشكل 16.1. الخاصية تيار-جهد لخلية شمسية مثالية $I_0 = 10^{-13} mA/cm^2$ في الظلام (العتمة) وتحت

$$I_{ph} = 0.04 \cdot mA/cm^2 \text{ الإضاءة}$$

غالبًا ما يتم رسم الخصائص $I - V$ للخلايا الشمسية تحت الإضاءة في الربع الأول الموجب للمعلم تيار

بدلالة الجهد. لذلك يعتبر إصطلاحياً أن تيار الخلية هو $-I$ (عد للشكل 14.1) [20]:

$$-I = -I_0 \left[\exp \left(\frac{q \cdot U}{T \cdot K_B} \right) - 1 \right] + I_{sc} \quad (1.7)$$

يمكن الحصول على جهد الدارة المفتوحة لخلية شمسية مثالية من المعادلة السابقة بوضع التيار مساو

للصفر.

$$V_{OC} = \frac{T.K_B}{q} \ln \left(\frac{I_{SC}}{I_0} + 1 \right) \approx \frac{T.K_B}{q} \cdot \ln \left(\frac{I_{SC}}{I_0} \right) (1.8)$$

يمكن أن تتغير قيمة I_0 بقيم عدة اعتمادًا على المواد وعلى السطوح الفاصلة بين المواد التي تشكل الصمام الثنائي. كلما كانت قيمة I_0 صغيرة جدًا فهذا يعني أن V_{OC} يأخذ قيمة جيدة و ضروريًا لتحسين أداء الخلايا الشمسية بشكل عام. [20]

المراجع

- [1] P. Hu, Y. Cao, N. Han, D. Wang, J. Chen, Nanomaterials for solar energy harvesting and storage, J. Nanometer. (2015). Available from: <https://doi.org/10.1155/2015/856021>. Available from: doi.
- [2] S.V.A., Global Solar PV Capacity to Reach Nearly 500 GW in 2019, IHSSays, in: IHSTechnology, 2015.
- [3] <http://energyprofessionalsymposium.com/?p=515173i>.
- [4] D.H.Neuhaus, A.Munzer, Industrial silicon wafers solar cells, Adv. Optoelectron. 24521(2007). 15pp.
- [5] S. Kumar, M. Nehra, A. Deep, D. Kedia, N. Dilbaghi, K.H. Kim, Quantum sized nanomaterials for solar cell applications, Renewable Sustainable Energy Rev. 73(2017)821—839.
- [6] J. Nozik, M.C. Beard, J.M. Luther, M. Law, R.J. Ellingson, J.C. Johnson, Semiconductor quantum dots and quantum dot arrays and applications of multiple exciton generation to third-generation photovoltaic solar cells, Chem. Rev. 110(2010)6873—6890.
- [7] M.T. Kibria, A. Ahammed, S.M. Sony, F. Hossain, S. Ul-Islam, A review: comparative studies on different generations solar cell technology, in: Proceedings of 5th International Conference on Environmental Aspects of Bangladesh (ICEAB) 2014.
- [8] M.A.Green, Third generation photovoltaics: solar cells for 2020 and beyond, Physica E 14(2002)65—70.
- [9] O.K. Simya, A. Mahboobbatcha, K. Balachander, A Comparative study on the

performance of Kesterite based thin film solar cells using SCAPS simulation program, *Superlattice Microstruct.* 82(2015)248—261.

[10] W. Wang, M.T. Winkler, O. Gunawan, T. Gokmen, T.K. Todorov, Y. Zhu, et al., Device characteristics of CZTSSe thin-film solar cells with 12.6% efficiency, *Adv. Energy Mater.* (2013). Available from: <https://doi.org/10.1002/aenm.201301465>.

[11] S. Bag, O. Gunawan, T. Gokmen, Y. Zhu, T.K. Todorov, D.B. Mitzi, Low band gap liquid-processed CZTSSe solar cell with 10.1% efficiency, 24 February 2012 on <http://pubs.rsc.org> | <https://doi.org/10.1039/C2EE00056C>.

[12] K. Shoori, G. Kavei, "Copper indium gallium diselenide—CIGS photovoltaic solar cell technology" a review, *Int. Mater. Phys.* 1(2013)15—21.

[13] O.K. Simya, A. Mahboobbatcha, K. Balachander, Compositional grading of CZTSSe alloy using exponential and uniform grading laws in SCAPS-ID Simulation, *Superlattice Microstruct.* 92(2016)285—293.

[14] https://www.iitk.ac.in/ispst/?page5solar_cellsi.

[15] [http://www.growthconsulting.frost.com/web/images.nsf/0/5C8C038AEE4690D96525744E001A9C9B/\\$File/TI.html](http://www.growthconsulting.frost.com/web/images.nsf/0/5C8C038AEE4690D96525744E001A9C9B/$File/TI.html).

[16] O.K. Simya, M. Selvam, A. Karthik, V. Rajendran, Dye-sensitized solar cells based on visible-light-active TiO₂ heterojunction nanoparticles, *Synth. Met.* 188(2014)124—129.

[17] Y. Duan, N. Fu, Q. Liu, Y. Fang, X. Zhou, J. Zhang, et al., Sn-doped TiO₂ photoanode for dye-sensitized solar cells, *J. Phys. Chem.* 116(2010)8888—8893.

[18] <http://www.plasticphotovoltaics.org/lc/lc-solarcells/lc-introduction.html>.

[19] The working principle of a solar cell- solar energy

[20] Materials Concepts for Solar Cells Downloaded from www.worldscientific.com by 105.105.32.241 on 01/08/21. Re-use and distribution is strictly not permitted, except for Open Access articles.

الفصل الثاني

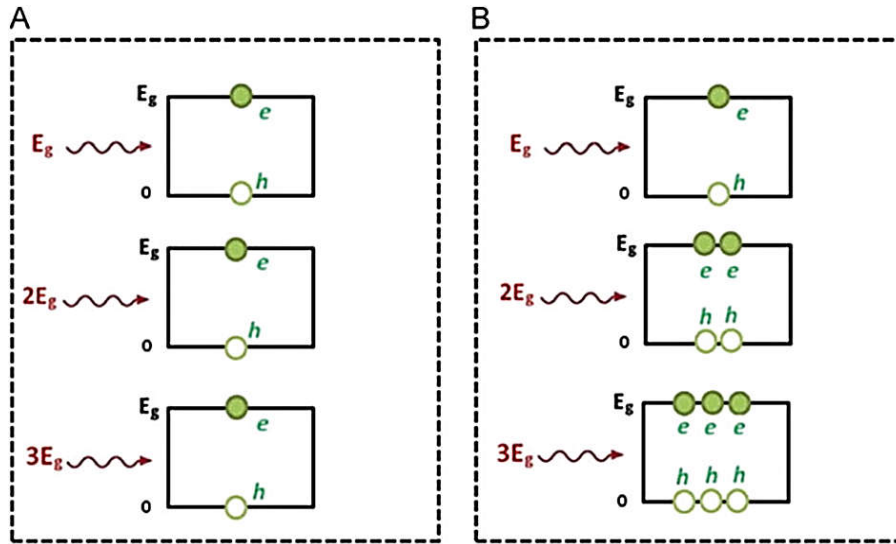
نظرة عامة حول الخلايا الشمسية بالنقاط المحسنة للضوء

1.2 المقدمة :

عادةً ما يتم تعريف الخلايا الشمسية من الجيل الثالث على أنها خلايا شمسية ناشئة ، و معظمها لا يزال في مرحلة البحث العلمي. تسمح باستخدام الظواهر المادية و المواد الجديدة و أيضا البنى التي يمكن أن تقلل إلى حد كبير من تكلفة الإنتاج. حاليًا . تشمل الخلايا الشمسية من الجيل الثالث بشكل أساسي على الخلايا الشمسية الصبغية (*DSSCs*) ، الخلايا الشمسية العضوية / البوليميرية (*OSCs*) ، خلايا البيروفسكايت الشمسية (*PSCs*) ، الخلايا الشمسية القائمة على النقاط الكمومية (*QD*)، و قد حظيت الخلايا الشمسية من الجيل الثالث باهتمامٍ بحثيٍّ هائلٍ وخضعت لتطور سريع [1].

في دراسة الخلايا الشمسية من الجيل الثالث تم التركيز بشكل خاص على الخلايا الشمسية المستتدة على *QD*، [5,4,3,2] بفضل الخصائص المذهلة لأنصاف النواقل *QDs* كمواد ملقطة (حاصدة) للضوء ، مثل نطاقها القابل للضبط بسهولة من خلال التحكم في الحجم أو التركيب ، عزم ثنائي القطب ذاتي كبير، ثباتها العالي في الضوء والحرارة والرطوبة مقارنةً بجزيئات الصبغة و بيروفسكايت الرصاص. بالإضافة إلى ذلك ، تحتوي *QDs* على عديد من الخصائص غير التقليدية ، مثل ما هو موضح بالشكل 1.2 إمكانية التوليد متعدد الإكسيتونات (*MEG*) ، والتي تمكن الخلايا الشمسية المستتدة على *QD* من الوصول إلى حد كفاءة ما يعرف بـ *Shockley-Quessier efficiency limit* البالغ 32.9% [4,6]. في الفيزياء ، يعتبر حد *Shockley – Queisser* (المعروف أيضًا باسم حد التوازن المفصل ، أو حد كفاءة *Shockley Queisser – SQ* ، أو من الناحية المادية حد الكفاءة الإشعاعية) هو الحد الأقصى للكفاءة النظرية لخلية شمسية باستخدام وصلة أحادية p-n لجمع الإستطاعة من الخلية حيث آلية الخسارة الوحيدة هي الإلتحام المباشر المشع في الخلية الشمسية [1].

تمتلك **QDSCs** مزايا عملية تصنيع الخلية المنخفضة التكلفة بسبب بنية المركب البسيطة المستمدة من نظيراتها DSC المشابهة (الصبغية). من الملاحظ أنه على مدار الـ 12 عامًا الماضية أظهرت كفاءة تحويل الطاقة (**PCE**) في **QDSCs** تحسنًا كبيرًا من أقل من 1% إلى ما يقارب 13%. اتجاه التطور المذهل لهذا نوع من الخلايا الشمسية يشير إلى إمكاناته الكبيرة الواعدة للجيل القادم من الخلايا الكهروضوئية. سنعرض في الفصل نظرة عامة حول **QDSCs**، و مبادئ عملها الأساسية، المواد المستخدمة، و مدى التقدم التقني. كذلك سنقدم نظرة شاملة على التطوير المتكامل لـ **QDSCs** من وقت ظهورها إلى الوضع الحالي.



الشكل 1.2: مخطط توضيحي لتوليد الحاملات الحرة تحت إثارة فوتونات ضوئية: (A) حالة خلية

شمسية عادية، (B) حالة خلية شمسية مثالية ذات نقاط كمية تتميز بتوالدات إكسيتونية متعددة [1].

2.2 مبدأ عمل خلية شمسية **QDSCs**

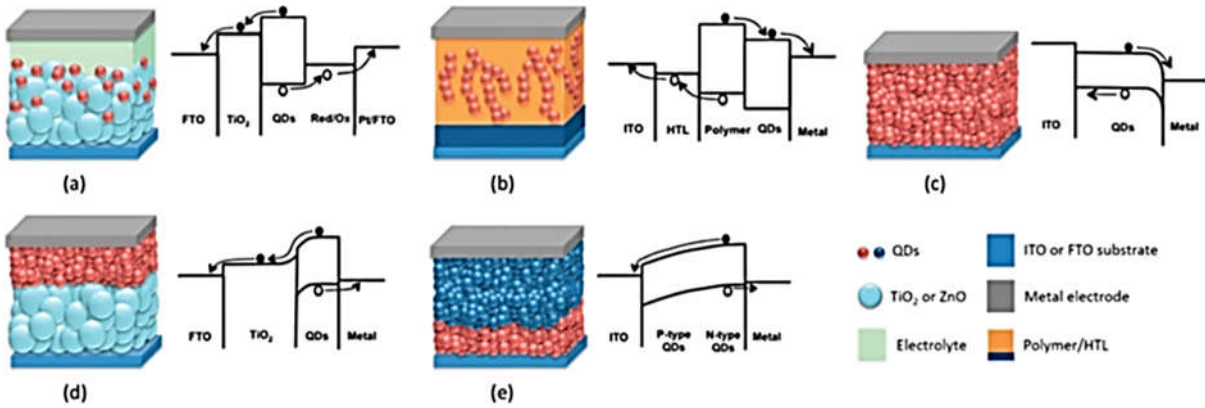
يعود تاريخ مفهوم "نصف الناقل المتحسس" إلى فترة الستينيات [7] أين يتم تحسيس (جعله متحسسًا) نصف ناقل ذو نطاق طاقي عريض باستخدام نصف ناقل ذو نطاق طاقي أضيق لالتقاط ضوء الشمس وتوليد

ناقلات الشحنة. على أساس هذا المفهوم، تمت الدراسة الأولية و صناعة الأجهزة القائمة على *DSCs* في وقت مبكر من الثمانينيات [8]. في البداية تم استخدام أقطاب نصف ناقلة ملاء لتحميل الصبغة. لكن كانت كفاءة تحويل الضوء الملتقط لهذا القطب المسطح منخفضة جدًا نظرًا لكمية التحميل الصغيرة للصبغة، و بالتالي كانت كفاءة الخلية منخفضة جدًا. في عام 1991، أنتج *O'Regan* و *Gra'tzel* أول خرق في هذه التقنية من خلال استبدال القطب نصف ناقل المسطح بغشاء مسامي (*TiO2 mesoporous*) ، مما يسمح لهم بالحصول على تحسن كبير في كمية تحميل الصبغة و تعزيز *PCE* في *DSC* إلى 7.1% [9]. منذ ذلك الوقت بدأت *DSCs* في جذب الكثير من الاهتمام من الباحثين في جميع أنحاء العالم، بحيث يُطلق على *DSC* غالبًا باسم "خلية *Gra'tzel*" [10,11,12].

العمل الرائد الذي قام به *Gra'tzel* و زملاؤه يعتبر علامة فارقة تمثل بداية الدراسة في تقنية الجيل الثالث من الخلايا الكهروضوئية. إن الميزة الكبيرة لهذه الخلايا المحسنة هي أنها تفصل بين آلية توليد الشحنة و آلية نقل الشحنة. في السليكون أو في الخلايا الشمسية ذات الأغشية الرقيقة ، تحدث كلتا العمليتين في نفس المادة ، و بالتالي يجب أن تكون جودة المواد عالية لتجنب العيوب التي تعزز الإلتحام. في الأجهزة الحساسة، يتم توليد الشحنة في الصبغة بينما يتم حقن الشحنة المتولدة ضوئيًا بسرعة في وسطي نقل مختلفين. وهكذا ، فإن الوسيط ينقل فقط نوعًا معينًا من الناقلات ، و بالتالي يقلل من الإلتحام و يسمح بتخفيف المعايير العالية لجودة المواد و بالتالي تقليل تكاليف التصنيع. [13]

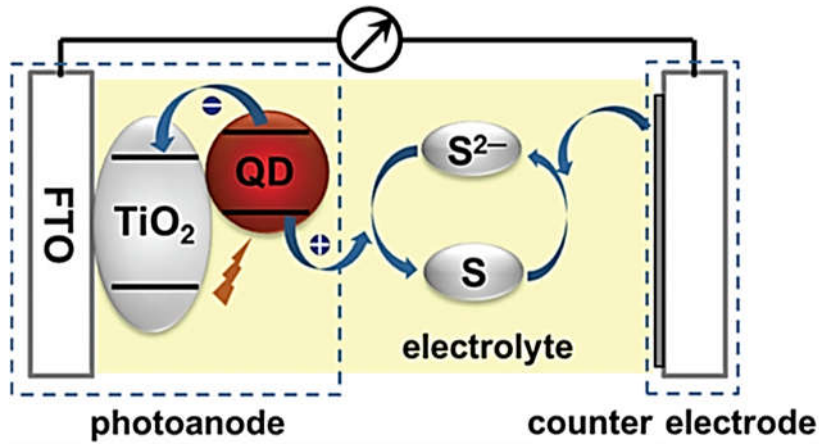
بنية *QDSC* مستتبطة مباشرة من *DSCs* ، باستخدام *QDs* لتحل محل جزيئات الصبغة العضوية كمواد لاقطة للضوء [14]. كان الدافع في البداية لدراسة *QDSCs* هو الخصائص الكهروضوئية الجذابة لـ *QDs* [4,16,15]. تتكون *QDSC* من *QD* حساس للضوء، إلكتروليت ، و إلكتروود مضاد كما هو موضح في الشكل 2.2 [17,18,19]. عند الإشعاع الضوئي، تمتص *QDs* الطاقة الشمسية و تثار

الإلكترونات في QDs من نطاق التكافؤ (Ev) إلى نطاق التوصيل (Ec) ، مما يؤدي إلى توليد أزواج من الثقوب و الإلكترونات. بعد ذلك ، يتم حقن الإلكترونات الموجودة في Ec من QDs بسرعة في Ec الخاص بأكسيد معدن (فلز) (بشكل عام TiO_2) مستقبلاً للإلكترونات وذلك بفضل قوة الجر الناتجة من الإختلاف الطاقي في Ec بين QDs وأكسيد المعدن ، و بالتالي تتحقق عملية فصل الشحنات.



الشكل 2.2: توضيح تخطيطي لتكوينات الجهاز ومخططات نطاق الطاقة للخلايا الشمسية القائمة على QD : (أ) خلية شمسية حساسة لـ QD ، (ب) خلية شمسية هجينة QD - بوليمر ، (ج) خلية شمسية تقاطع شوتكي ، (د) $n - p$ خلية شمسية غير متجانسة، و(هـ) خلية شمسية متجانسة $n - p$.

تنتقل الإلكترونات عبر (TiO_2 mesoporous) إلى مسند أكسيد موصل شفاف ملاصق له و من ثم إلى القطب المضاد من خلال دارة خارجية. في الوقت نفسه ، يتم تجديد QDs المؤكسدة بفضل العناصر المرجعة لزوج إرجاع-أكسدة ($Redox\ couple$) في الإلكتروليت، بينما يتم إرجاع العناصر المتأكسدة لزوج $Redox$ بواسطة الإلكترونات من الدارة الخارجية عبر الإلكتروليت الخلفي. إضافة لعمليات نقل الشحنة المرغوبة بها، في نفس الوقت تحدث بعض العمليات الأخرى غير المرغوب فيها، المعروفة باسم إلتحام الشحنة ، وتؤدي إلى تدهور أداء الخلايا الشمسية بشكل كبير [21,20].



الشكل 3.2: توضيح تخطيطي لبنية مركب الـ $QDSCs$.

3.2 نبذة عن مراحل تطور الخلايا الشمسية بالنقاط الكمية المحسنة ($QDSCs$):

منذ سبعينيات القرن الماضي ، وجد الباحثون أنه يمكن زيادة كفاءة فصل الشحنة عن طريق ملامسة جسيم نصف ناقل بنوع آخر من أنصاف النواقل [23,22]. على سبيل المثال ، في عام 1984 ، $Graetzel$ و زملاؤه. أظهر أن الجمع بين TiO_2 و CdS يمكن أن يزيد من إنتاجية توليد H_2 من H_2S ، مستفيدًا من إنتقال الإلكترون من نطاق توصيل CdS إلى الخاص بجزيئات TiO_2 [23]. ادخل $Gerischer$ و زملاؤه مفهوم الصبغة المتحسسة لأنصاف النواقل. قاموا بوضع CdS على TiO_2 و وجدوا أن التيار الكهروضوئي للقطب قد تحسن بسبب إمتداد نطاق امتصاص الضوء [24]. بفضل هذه الأعمال تم بلورة المفهوم الأولي لـ $QDSCs$ الحالية. و منذ ذلك الحين، تم استخدام العديد من أنواع أنصاف النواقل اللاقطة للضوء ، مثل Bi_2S_3 ، CdS ، PbS ، $CdSe$ ، لتحسين أنصاف النواقل ذات النطاق العريض و كذلك دراسة خصائصها الكهروكيميائية-الضوئية [22].

في عام 1990 قام $Weller$ و زملاؤه بتحسين قطب TiO_2 عالي المسامية بواسطة جزيئات CdS ذات الحجم الكمي من خلال طرق الترسيب الموضعية [25] و قاموا أيضًا بتصنيع خلية كهروكيميائية

ضوئية تعتمد على ثلاثة أقطاب كهربائية وتحصلوا على $V_{oc}/J_{sc} FF$ بقيمة $0.395V$ و $175mA/cm^2$ و 0.75 على التوالي تحت إضاءة ضوء أحادي اللون بطول موجة 460 نانومتر [1].

في عام 1998 قام **alZaban and Nozi** بترسيب $QDs InP$ على قطب TiO_2 و صنعت الخلية $QDSC$ من نوع الشطيرة لأول مرة باستخدام I^-/I_3^- كإلكتروليت و Pt كعداد قطب كهربائي [26]. تمت ملاحظة التيار الضوئي للخلية الشمسية تحت الإضاءة و شكل ذلك أول تقرير عن إشتغال $QDSC$ متكامل ، على الرغم من عدم إعطاء قيمة الـ PCE للخلية الشمسية. بعد ذلك تم استخدام $InAs QDs$ بأحجام مختلفة أيضًا كمحسّس من قبل مجموعة **Nozik** وتم الحصول على كفاءة بنسبة 0.3% [27]. بالنظر إلى الاستقرار المحدود لـ QDs في I^-/I_3^- قام **Graetzel** و زملاؤه بتشبيد أول $QDSC$ ذات الحالة الصلبة في عام 2002 باستخدام $(N,N\text{-di-p-}2,2',7,7'\text{-tetrakis}((N,N\text{-di-p-}methoxyphenylamine)-9,9')\text{-}spirobifluorene)$ ($spiro - OMeTAD$) (HTM) و حصلت على كفاءة 0.49% تحت 0.1 من إضاءة الشمس [28]. حتى عام 2006 ، لم تلتفت $QDSCs$ الكثير من الاهتمام لأن كفاءتها التي تم الحصول عليها كانت أقل بكثير مقارنة مع قرينتها $DSCs$ [29].

حقق **Toyoda** و زملاؤه أول قفزة إلى الأمام لـ $QDSCs$ عام 20 [30] حيث لاقت PCE في $QDSCs$ دفعا إلى أكثر من 2% . في هذا العمل قاموا بتصنيع خلايا TiO_2 الشمسية ببنية عكسية مع الأوبال (العقيق) المحسنة بـ $CdSe$ جنبًا إلى جنب مع إلكتروليت متعدد الكبريتيد [1]. إضافة إلى ذلك أوضح المؤلفون أن طبقة رقيقة من ZnS على الأنود الضوئي يمكن أن تحسن أداء الخلايا الشمسية بشكل كبير. و تجدر الإشارة إلى أن التحسين بـ ZnS هذا قد أعتبر منذ ذلك الحين كإجراء لا غنى عنه في تصنيع $QDSCs$ عالية الكفاءة [1].

بعد ذلك Lee و زملاؤه قدم لأول مرة طرق ترسيب QDs بمرحلتين ، حيث تم تجميع بنحو مسبق طبقة بذرة CdS مع سطح قطب TiO_2 باستخدام جزيء رابط ثنائي الوظيفة (*linkbifunctional* molecule) متبوعًا بعملية ترسيب الحمام الكيميائي (CBD) لنمو طبقة CdSe . حققت هذه البنية PCE نسبة 2.8% [31] . بعد ذلك، طرح Lee و زملاؤه بنية متحسنة مشتركة CdS / CdSe كلاسيكية من خلال طرق ترسيب أيونية متتالية الطبقات و التفاعلات (SILAR) ، مما أدى إلى زيادة PCE لـ QDSCs إلى 4.22% [32] . في عام 2009 *Graetzel* و زملاؤه طور إجراءً جديدًا لتحضير مصدر السليينيد (Se^{2-}) عن طريق إرجاع الأكسيد السابق في الإيثانول ثم باستخدام ترسيب CdSe QDs على TiO_2 من خلال طريقة SILAR مما يعرض PCE بنسبة 4.18 % تحت 0.1 إضاءة الشمس باستخدام زوج أكسدة إرجاع من الكوبالت [33] .

منذ عام 2009 بدأت شركة QDSCs في جذب المزيد من الاهتمام بسبب أدائها الكهروضوئي المحسن بشكل كبير . *Fan* و زملاؤه استكشف أمر الكربون المسامي متعدد الوسائط (OMPC) و الألياف النانوية الكربونية المتوسطة المسامية (MCNFs) كمواد تحفيزية للقطب الكهربي المضاد في QDSCs و حققت كفاءات تحويل 4.36% و 4.81% على التوالي *Xu* [35,34] و زملاؤه قام بتصميم

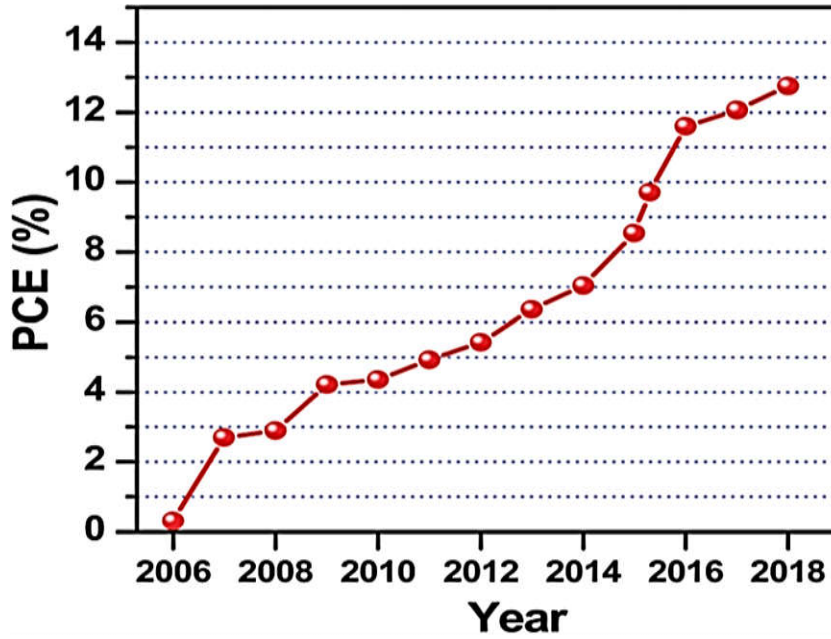
$ZnO / Zn_xCd_{1-x}Se$ core / shell (بنية قلب-غلاف) على شكل مصفوفة كابل نانوي للأنود الضوئي و وفر PCE بنسبة 4.74% [36] .

قام *Meng* و زملاؤه بتحسين هيكل قطب فيلم TiO_2 استنادًا إلى نظام CdS / CdSe QDs ، مما أعطى أفضل كفاءة بنسبة 4.92% *Kamal* [37] و زملاؤه اقترح إستراتيجية التطعيم في محسّسات QD لتسهيل عمليتي نقل الشحنة و فصل الشحنات. استخدموا Mn^{+2} كمطعم في طبقة CdS و أعدوا

محسّسات **Mn doped – CdS / CdSe QD** مما عزز **PCE** في **QDSCs** إلى أكثر من 5.4% لأول مرة [38].

شهد عام 2012 تطورًا سريعًا في مجال **PCE** الخاص بـ **QDSCs** بتطوير كل من المواد و الآليات بعد الدراسات المكثفة . لغاية الوقت الحالي تم الحصول على أعلى الكفاءات باستخدام الأقطاب الكهربائية الحساسة ، التي تنتمي فيها **QDs** مباشرة على القطب الكهربائي المسامي بطريقة **CBD** أو **SILAR**. بالمقابل فإن طرق التوصيف المختلفة للخلايا الشمسية المحسنة بـ **QDs** تشير إلى قدرات أفضل للخلايا التي تستخدم **QDs** الغروية كمحسّسات [39]. ومع ذلك ، فإن كفاءة **QDSCs** باستخدام **QDs** الغروية كانت محدودة بسبب انخفاض التحميل بـ **QD** (إنخفاض الإنغراس)، مما حد من النقاط الضوء [1].

في عام 2012 ركزت مجموعة **Zhong** على استخدام **QDs** الغروية عالية الجودة مسبقا التحضير كمحسّسات ، و ترسبت **QDs** على قطب **TiO₂** من خلال طريقة التجميع الذاتي الناجم عن الترابط **(CLIS)** [41,40]. طريقة الترسيب الجديدة هذه أثبتت أنها كانت قادرة على تحقيق كمية تحميل سريعة ، موحدة و عالية من **QDs** الغروية على قطب **TiO₂** [42]. إضافة لذلك شكلت مقارنة الـ **CLIS** طريقة لتقديم **QDs** ذات جودة عالية كمحسّسات في **QDSCs** ، ومنذ تلك اللحظة ، تم الحصول على كفاءة تحويل بأرقام قياسية باستخدام **QDs** الغروية كمواد حساسة [45,40,44,42,43]. من خلال استكشاف محسّسات **QD** الغروية الفائقة و هندسة تعديل الواجهة ، تم تحسين أعلى نسبة **PCE** في **QDSCs** من 5% إلى ما يقرب من 13% خلال السنوات الخمس الماضية ، مما أدى إلى خطوة كبيرة إلى الأمام و جعلها أكثر قدرة على المنافسة مع الأنواع الأخرى من الخلايا الشمسية الناشئة. نعرض تطور **PCE** لـ **QDSCs** في الشكل 4.2 و الأعمال المقابلة مدرجة في الجدول 1.2 [1].



الشكل 4.2: تطور PCE القياسي لـ QDSCs منذ عام 2006 (للخلايا بناءً على بنية قياسية ثنائية

القطب واختبارها تحت إشعاع AM 1.5 G). يتم سرد البيانات التفصيلية في الجدول 1.2 [1].

Year	QDs	CE	Electrolyte	J_{sc} (mAcm^{-2})	V_{oc} (V)	FF	PCE (%)
1998	InP	Pt	I^-/I_3^-	—	—	0.685	—
2002	PbS	—	Spiro-OMeTAD	—	0.24	—	0.49
2007	CdSe	Pt	Polysulfide	7.51	0.71	0.50	2.7
2008	CdS/CdSe	Au	Polysulfide	11.66	0.503	0.49	2.9
2009	CdS/CdSe	Au	Polysulfide	16.8	0.514	0.49	4.22
2011	CdS/CdSe	$\text{Cu}_2\text{S}/\text{brass}$	Polysulfide	13.68	0.575	0.63	4.92
2012	Mn-CdSe/CdSe	$\text{Cu}_2\text{S}-\text{RGO}^a$	Polysulfide	20.7	0.558	0.47	5.42
2013	$\text{CdSe}_x\text{T}_{1-x}$	$\text{Cu}_2\text{S}/\text{brass}$	Polysulfide	19.35	0.571	0.575	6.36
2013	CdTe/CdSe	$\text{Cu}_2\text{S}/\text{brass}$	Polysulfide	19.59	0.606	0.569	6.76
2014	CuInS_2	$\text{Cu}_2\text{S}/\text{brass}$	Polysulfide	20.65	0.586	0.581	7.04
2015	$\text{CdSe}_x\text{T}_{1-x}$	$\text{Cu}_2\text{S}/\text{brass}$	Polysulfide	20.78	0.653	0.605	8.21
2015	$\text{CdSe}_x\text{Te}_{1-x}$	$\text{Cu}_x\text{S}/\text{FTO}$	Polysulfide	20.78	0.702	0.636	9.28
2016	$\text{CdSe}_x\text{Te}_{1-x}$	$\text{Cu}_2\text{S}/\text{brass}$	Polysulfide	21.04	0.720	0.642	9.73
2016	$\text{CdSe}_x\text{Te}_{1-x}$	MC^b/Ti	Polysulfide	20.69	0.807	0.689	11.51

2016	ZCISe	MC/Ti	Polysulfide	25.49	0.745	0.627	11.91
2017	ZCISe	N-MC/Ti	Polysulfide	25.67	0.759	0.639	12.45
2018	ZCISe–CdSe	MC/Ti	Polysulfide	27.39	0.752	0.619	12.75

^a RGO = reduced graphene oxide. ^b MC = mesoporous carbon.

الجدول 1.2: جدول ملخص للأعمال البارزة في تطور **QDSCs** (للخلايا بناءً على بنية ثنائية القطب باستخدام كأنود ضوئي TiO_2 واختبارها تحت إشعاع AM 1.5 G) [1]..

4.2 المواد الأساسية في الخلايا الشمسية بالنقاط المحسنة:

1.4.2 المواد القابلة للنقل / المستقبلية المستخدمة في أكسيد المعدن:

تُستخدم المواد الناقلة/المستقبلية للإلكترونات من أكاسيد المعادن (**ETMs**) لتشكيل المسند الخاص بالأنود الضوئي ، و هي الدعامة لترسيب محسّسات **QD** في الأنود الضوئي. يؤدي **ETM** وظيفة دعم **QDs** و استخراج الإلكترونات المثارة ضوئياً من **QDs** ثم نقلها إلى الركيزة الموصلة (عادةً **FTO**) [46,48,47,46] ويجب أن تتميز منطقة نقل الإلكترونات بالخصائص التالية: (1) حافة نطاق توصيل مناسبة ، و التي ستحدد كفاءة استخراج الإلكترون المتولد ضوئياً بالإضافة إلى V_{oc} للخلية الشمسية ؛ (2) حركية عالية للتنقل الإلكتروني لتسهيل نقل الإلكترون المستخرج في المنطقة و تجميعه في الإلكترود الناقل ؛ (3) مساحة سطحية وفيرة لتوفير كمية تحميل **QD** كافية لالتقاط فعال للضوء؛ (4) الاستقرار الكيميائي و السمية المنخفضة والتحضير البسيط. وفقاً لذلك تركزت الدراسات حول المواد الناقلة للإلكترونات في **QDSCs** بشكل أساسي على هذه الخصائص المهمة ، و من بين تلك المواد ، يعتبر TiO_2 و ZnO أكثر **ETMs** التي تمت دراستها على نطاق واسع في **QDSCs**. نلخص نتائج التقارير

البحثية لـ *QDSCs* بناءً على *ETMs* المختلفة في الجدول 2.2 [1].

ETM	QDs	CE	Electrolyte	J_{sc}	V_{oc}	FF	PCE
				(mAcm^{-2})	(V)		(%)
TiO ₂ -NP	ZnSe-CdSe	MC/Ti	Polysulfide	27.39	0.752	0.619	12.75
TiO ₂ -NW	CdS/CdSe	Cu ₂ S/FTO	Polysulfide	19.32	0.531	0.586	6.01
TiO ₂ -NT	PbS	Pt	I ⁻ /I ₃ ⁻	8.48	0.64	0.63	3.41
TiO ₂ -NR	PbS	—	Spiro-OMeTAD	13.56	0.52	0.579	4.10
TiO ₂ -NS	CdSe	Cu ₂ S/brass	Polysulfide	16.95	0.591	0.50	5.01
ZnO-NP	CdS/CdSe	Cu ₂ S/brass	Polysulfide	10.48	0.683	0.623	4.46
ZnO-NW	Zn _x Cd _{1-x} Se	Cu ₂ S/brass	Polysulfide	18.05	0.65	0.40	4.74
ZnO-NW	ZnSe/CdSe	Cu ₂ S/brass	Polysulfide	11.96	0.836	0.45	4.54
ZnO-NR	CdS/CdSe	Cu ₂ S/brass	Polysulfide	13.28	0.642	0.567	4.83
ZnO-TP	ZnSe/CdSe/ZnSe	Cu ₂ S-RGO	Polysulfide	17.3	0.761	0.471	6.2
SnO ₂	CdS/CdSe	Cu ₂ S	Polysulfide	10.13	0.700	0.616	4.37
NiO	PbS	Pt	[Co(dtbbpy) ₃] ^{2+/3+}	5.27	0.227	0.33	0.40

الجدول 2.2: ملخص للأداء الكهروضوئي لـ *QDSCs* بناءً على *ETMs* المختلفة [1].

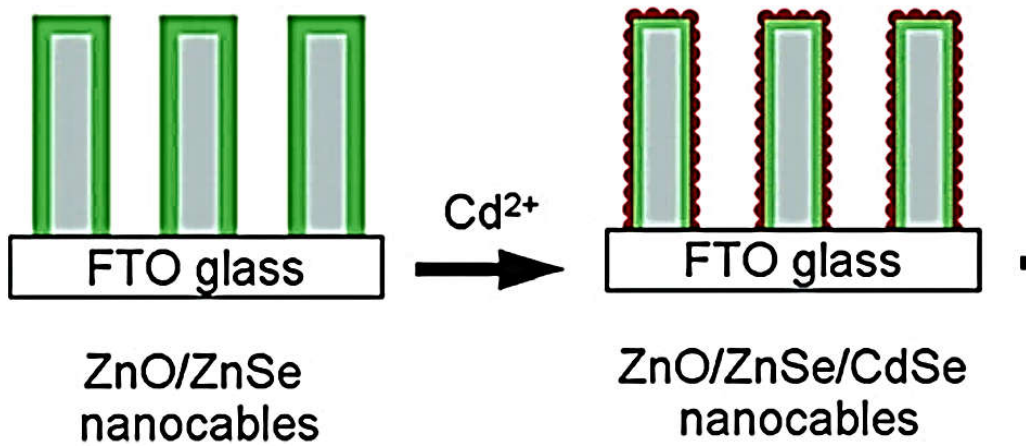
الأنود الضوئي من TiO₂:

المواد النانوية القائمة على TiO₂ يُعتقد أنها مناسبة لـ *ETM* نظرًا لمزاياها المميزة ، بما في ذلك الاستقرار الكيميائي الجيد ، عدم السمية ، و التكلفة المنخفضة [47,46]. من بين تلك المواد تعتبر ،

TiO_2 ذو الجسيمات متناهية الصغر ($TiO_2 - NP$) الأكثر شيوعًا كأنود ضوئي في $DSCs$ و $QDSCs$ نظرًا لمساحة سطحها الكبيرة ، سهولة التصنيع و الاستقرار الجيد [46]. وقد تم أيضا تجربة بنى نانوية أحادية البعد مختلفة لثنائي أكسيد التيتانيوم كالأنايب ، العودات و الأسلاك [1].

2.1.4.2 الأنود الضوئي من ZnO :

من ناحية الميزات الإلكترونية ، يبدو أن ZnO أكثر ملاءمة للعمل بمثابة ETM نظرًا لارتفاع حركية الإلكترونات ($4-0.1.130 - 200 vscm^2V^{-1}s^{-1}$) و حافة نطاق التوصيل. هذه الخصائص الفريدة مفيدة للحصول على قيم أعلى لجهد الدارة المفتوحة [48,49]. تم إجراء عدة دراسات على الأنود الضوئي من ZnO . لكن بينت أنه ، من ناحية الاستقرار الكيميائي ، يكون القطب ZnO محدودًا أكثر مع ثبات أقل من TiO_2 ، و تؤدي طبيعته المتذبذبة إلى إذابة أكسيد الزنك في كل من الوسائط الحمضية والأساسية ، مما يحد من تطبيقه في $QDSCs$. سيؤدي عدم الاستقرار الكيميائي هذا إلى الحد من عمر الخلايا الشمسية [1]. تم أيضا تطوير الأنود الضوئي للـ ZnO على شكل مصفوفة كابلات قلب/غلاف كما هو موضح بالشكل 5.2 بغية التخفيف من المشكل سالف الذكر [1].



الشكل 5.2: مصفوفة الكوابل النانوية المرتكزة على أكسيد الزنك

3.1.4.2 أنواع أخرى من *ETMs*:

بصرف النظر عن TiO_2 و ZnO ، هناك أنواع أخرى من أكاسيد المعادن ، مثل $[51,50]SnO_2$ ،
 $[52]ZrO_2$ ، و $[53]Zn_2SnO_4$ تم استكشافها أيضًا كـ *ETMs* في *QDSCs* و مع ذلك ، فإن أداء
 الخلية على أساس *ETMs* هذه عادة ما يكون ضعيفًا ، و يرجع ذلك جزئيًا إلى موضع حافة النطاق
 غير المناسب أو الحركية المنخفضة للإلكترونات فيها [1].

4.1.4.2 . أكاسيد المعادن نصف الناقلة من النوع p و *QDSCs* من النوع p:

أنصاف النواقل ذات النطاق العريض المذكورة أعلاه (مثل TiO_2 و ZnO) ، هي من النوع n ، و هي
 مسؤولة عن استخراج الإلكترونات المولدة ضوئيًا من محسّسات *QD* في *QDSC*. نوع آخر من أكاسيد
 المعادن نصف الناقلة هي النوع p ، و الذي يلعب دور استخراج الثقوب المتولدة ضوئيًا من محسّسات
QD في *QDSC*. المثال الكلاسيكي لأنصاف النواقل من النوع p هو NiO ، والذي يستخدم على نطاق
 واسع في المركبات الكهروضوئية. ثيوسيانات النحاس (I) ، $CuSCN$ ، هو بديل واعد لـ NiO كمادة
 نصف ناقلة غير عضوية من النوع p [1]. نشير إلى أن الخلايا الشمسية من *QD* المحسنة التي
 تعتمد على ZnO أو TiO_2 كنواقل للإلكترونات تعتبر البنى القياسية أو الإصطلاحية لهذا النوع من
 الخلايا، فحين أن تلك التي تستبدل أكسيد المعدن نصف الناقل من النوع n بأخر من النوع p ، تعتبر
 البنية المقلوبة أو العكسية لهذا النوع من الخلايا، وتعرف بالخلايا الشمسية بالنقاط الكمية المحسنة من

النوع p لأن الثقوب هي التي تجمع في أكسيد المعدن نصف الناقل من النوع p ، لكن مردود هذه الخلايا كان منخفضاً جداً مقارنة مع الخلايا الإصطلاحية [1].

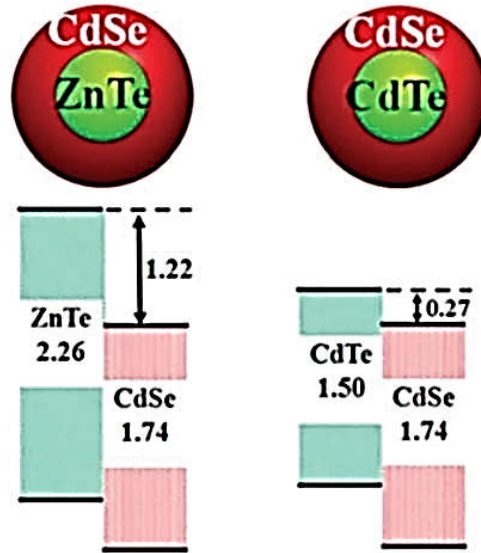
2.4.2 النقاط الكمية المحسنة QD :

QDs هي المكونات الأساسية في $QDSCs$ التي تؤدي وظيفة التقاط ضوء الشمس ثم توليد الأزواج الإلكترونية-ثقوب [54,16,19]. يجب أن تمتلك محسّسات QD المثالية الخصائص التالية: (1) حافة نطاق توصيل أعلى بالنسبة إلى تلك الخاصة بـ ETM لحقن الإلكترونات بشكل فعال ؛ (2) فجوة ضيقة النطاق لامتناس ضوء الشمس على نطاق واسع من الطيف الشمسي و معامل امتصاص عالي لكفاءة عالية في التقاط الضوء ؛ (3) استقرار جيد تجاه الضوء والحرارة والالكتروليت ؛ (4) تحضير بسيط وسمية منخفضة. ناهيك عن تصميم هيكل QDs ، يمكن لمسار ترسيب QD على مسند أكسيد المعدن أيضاً تحديد الأداء الكهروضوئي النهائي للخلايا الشمسية [1].

1.2.4.2 QDs الثنائية (خلايا ثنائية):

تستخدم QDs الثنائية على نطاق واسع كمواد حساسة في المرحلة الأولية من $QDSCs$ نظراً لتركيبها الناضجة و خصائصها الكهروضوئية المعروفة. نذكر مجموعة متنوعة من QDs الثنائية ، مثل CdS [59,58,57,56] $InAs$ [96] InP [26,55] ، $CdTe$ [61,60] $CdSe$ [30,31,41,63,62] ، PbS [68,67,66,65,64] ، Ag_2S [72,71,70,69] تم تطبيقها كمواد حساسة في $QDSCs$ من بينها شكلت ، CdS و $CdSe$ QDs الاختيار الأكثر شيوعاً بسبب تحضيرها البسيط. في QDs . ميزة أخرى مميزة لـ QDs الثنائية هي أنه يمكن زراعتها مباشرة على المعدن من خلال الأنيونات و الكاتيونات في

محلول عند درجة حرارة منخفضة ، مما يتيح طريقًا مناسبًا لإعداد الأنود الضوئي. و مع ذلك فإن المشكلة الرئيسية في **QDs** الثنائية هي أنه من الصعب تحقيق التوازن بين فجوة النطاق الضيقة وحافة نطاق التوصيل العالية [1]. مثلًا إذا أخذنا **CdS** فإنه يتمتع بحافة نطاق توصيل عالية تساعد على الحقن في منطقة نقل الإلكترونات ، لكنه بالمقابل يملك فجوة نطاق كبيرة لا تسمح بإمتصاص فعال للفوتونات. و **Pbs** يملك فجوة نطاق منخفضة لكن حافة نطاق توصيل منخفضة غير ملائمة للحقن ، لذلك تم تطوير مركبات نقاط كمية (**composite**) التي توازن بين كلا الخاصيتين [1]. كذلك تم تطوير نقاط كمية متحسنة بنى قلب/غلاف (**core/shell**) وقد ثبت أيضًا أن هذه التقنية فعالة في تعزيز الاستقرار الكيميائي ، الحراري والكيميائي الضوئي لأن الغلاف غير العضوي يمكن أن يوفر حماية أكثر قوة لمعايير الجودة الأساسية (الشكل 6.2) [1].



الشكل 6.2: تصميم قلب/غلاف للنقاط الكمية المتحسنة

3.4.2 . أقطاب العداد:

تتمثل الوظيفة الرئيسية للقطب الكهربائي المضاد **CE** في **QDSCs** في تحفيز تفاعل الإرجاع للالكتروليت المؤكسد بواسطة الإلكترونات من الدارة الخارجية [74,49,73]. يجب أن تمتلك **CE** المفضلة الخصائص التالية: (1) الناقلية الجيدة لنقل الإلكترونات من الدارة الخارجية للمواقع النشطة؛ (2) نشاط تحفيزي عالي تجاه تفاعل الإرجاع للالكتروليت المؤكسد؛ (3) استقرار كيميائي وميكانيكي جيد لضمان الاستقرار الكامل للخلية الشمسية. يمكن تقسيم المواد النشطة التي تمت دراستها كـ **CE** لـ **QDSCs** بشكل أساسي إلى أربعة أنواع: المعادن النبيلة، و مركبات الكالكوجينيد المعدنية، و المواد الكربونية، و المواد المركبة. نلخص أداء الخلايا لـ **QDSCs** بناءً على **CEs** المختلفة في الجدول 3.2.

CE	QDs	Electrolyte	J_{sc} (mA cm ⁻²)	V_{oc} (V)	FF	PCE (%)
Pt	ZnSe/CdSe/ZnSe	Polysulfide	17.8	0.741	0.398	5.25
Au	CdS/CdSe	Polysulfide	16.8	0.514	0.49	4.22
Cu ₂ S/brass	Zn-Cu-In-Se	Polysulfide	26.91	0.629	0.607	10.27
Cu _x S/FTO	CdSe _x Te _{1-x}	Polysulfide	20.78	0.702	0.636	9.28
Cu _x Se/FTO	CdSe _x Te _{1-x}	Polysulfide	21.09	0.673	0.614	8.72
ITO/Cu ₂ S	CdSe _x Te _{1-x}	Polysulfide	15.23	0.688	0.584	6.12
GH-CuS/Ti	CdSe _x Te _{1-x}	Polysulfide	20.69	0.786	0.66	10.74
CoS	CdS/CdSe	Polysulfide	14.44	0.510	0.565	4.16
PbS	CuInS ₂ /CdS	Polysulfide	18.3	0.58	0.45	4.70
NiS	CdS/CdSe	Polysulfide	13.70	0.502	0.48	3.30
FeS ₂	ZnSe/CdSe	Polysulfide	13.58	0.743	0.387	3.90

MoS ₂	CdS/CdSe	Polysulfide	15.65	0.588	0.449	4.13
Cu ₂ SnSe ₃	CdSe	Polysulfide	16.29	0.563	0.54	4.93
CZTS	ZnSe/CdSe	Polysulfide	11.06	0.822	0.41	3.73
CZTSe	CdSe	Polysulfide	15.49	0.54	0.52	4.35
Cu ₂ S/carbon	CdS/CdSe	Polysulfide	13.69	0.593	0.48	3.87
Cu ₂ S/RGO	CdS/CdSe	Polysulfide	18.4	0.520	0.46	4.40
PbS/CB	CdS/CdSe	Polysulfide	13.32	0.509	0.58	3.91
CuInS ₂ /CB	CdS/CdSe	Polysulfide	14.16	0.512	0.60	4.32
Cu _{1.18} S/GOR	CdTe/CdS/CdS	Polysulfide	20.55	0.626	0.53	6.81
C60	CdS/CdSe	Polysulfide	12.6	0.546	0.60	4.18
CNTs	CdS/CdSe	Polysulfide	16.09	0.586	0.495	4.67
HCMS	CdSe	Polysulfide	12.41	0.60	0.52	3.90
OMPC	CdSe	Polysulfide	12.34	0.63	0.56	4.36
MCNF	CdSe	Polysulfide	11.99	0.62	0.60	4.81
MC-Ti	CdSe _x Te _{1-x}	Polysulfide	20.69	0.807	0.689	11.51
N-MC-Ti	Zn-Cu-In-Se	Polysulfide	25.67	0.759	0.639	12.45

الجدول 3.2: ملخص للأداء الكهروضوئي للخلايا الشمسية **QDSCs** بناءً على **CEs** المختلفة

4.4.2. الإلكتروليت أو مواد نقل الثقوب:

يعتبر زوج الأكسدة والإرجاع بالالكتروليت أو مادة نقل الثقوب (**HTM**) أيضاً أحد المكونات الأكثر

أهمية في **QDSCs** ، حيث يعمل على تجديد **QDs** ونقل الثقوب المتولدة ضوئياً إلى **CE** [75,73].

Redox couple or HTMs	QDs	CE	J_{sc} mAcm ⁻²	V_{oc} (V)	FF	PCE (%)
Polysulfide	ZCISE-CdSe	MC/Ti	27.39	0.752	0.619	12.75
[(CH ₃) ₄ N] ₂ S/[(CH ₃) ₄ N] ₂ S _n CdS		Pt	3.0	1.2	0.89	3.2

Polysulfide-IL	CdSe	Pt	13.85	0.42	0.32	1.86
Fe(CN) ₆ ^{3-/4-}	CdS	Pt	3.8	0.8	0.66	2.0
[Co(bpy) ₃] ^{2+/3+}	CdS	Pt	2.34	0.704	0.62	1.01
[Co(bpy) ₃] ^{2+/3+}	Au _x	Pt	3.96	0.832	0.716	2.36
[Co(<i>o</i> -phen) ₃] ^{2+/3+}	CdSe _x Te _{1-x}	Pt	4.94	0.67	0.54	1.77
Tetramethylthiourea	ZnSe/CdS	Pt	2.25	0.66	0.58	0.86
[DHexBIm][SCN] ^a	CdS/CdSe	PbSe	12.58	0.60	0.56	4.26
CuSCN	CdSe	Au	4.00	~0.50	—	2.3
Spiro-OMeTAD ^b	Pbs	Au	13.86	0.52	0.579	4.10
P3HT ^c	Pbs/Cus	Au	20.7	0.60	0.65	8.07
PCPDTBT ^d	Sb ₂ S ₃	Au	15.3	0.616	0.657	6.18

^a1,3-Dihexylbenzimidazolium cation combined with the SCN anions.

^b 2,2⁰,7,7⁰-Tetrakis-(*N,N*-di-*p*-methoxyphenylamine)-9,9⁰-spirobifluorene

الجدول 4.2 ملخص للأداء الكهروضوئي لـ **QDSCs** على أساس أزواج الأكسدة والإرجاع المختلفة

و **HTMs** في الحالة الصلبة

زوج الأكسدة والإرجاع أو **HTM** في **QDSCs** ، ينبغي أن يحقق الخصائص التالية: (1) تأكل منخفض في **QDs** للحفاظ على الاستقرار الجيد على المدى الطويل للخلية ؛ (2) إمكانية الأكسدة والإرجاع المناسبة لتجديد **QDs** بشكل فعال والحفاظ على قيمة V_{oc} عالية في نفس الوقت ؛ (3) الناقلية الأيونية العالية لتسهيل نقل الثقوب ؛ (4) استقراره الجيد وشفافية عالية للضوء المرئي ؛ و (5) متجدد بالكامل ، مع تجنب استخدام أدوات إزالة الثقوب غير المتجددة. بشكل عام ، يمكن أن يؤثر لإلكتروليت أو **HTM** بشكل كبير على أداء الخلايا الشمسية واستقرارها على المدى الطويل. وفقًا للخصائص الظاهرية ، يمكن

تلخيص أنواع الإلكتروليكات أو *HTMs* في *QDSCs* إلى ثلاثة أنواع: الحالة السائلة، شبه الصلبة والحالة الصلبة. نلخص الأداء الكهروضوئي لـ *QDSCs* استنادًا إلى الإلكتروليكات المختلفة أو *HTMs* في الجدول 4.2 . من بين آخر التصاميم للخلايا شمسية بالنقاط الكمية المتحسنة نذكر *QDsZCISE/ZnSe* التي صممت من طرف *HuashangRao* حيث تم الوصول لوسائط الخروج الكهربائية: *PCE* بنسبة 13.84% قدرت J_{sc} بقيمة 26.7 mA/cm^2 وجهد الدارة المفتوحة V_{oc} بقيمة 0.78 V و *FF* بلغت 0.664 (الجدول 5.2)[76]

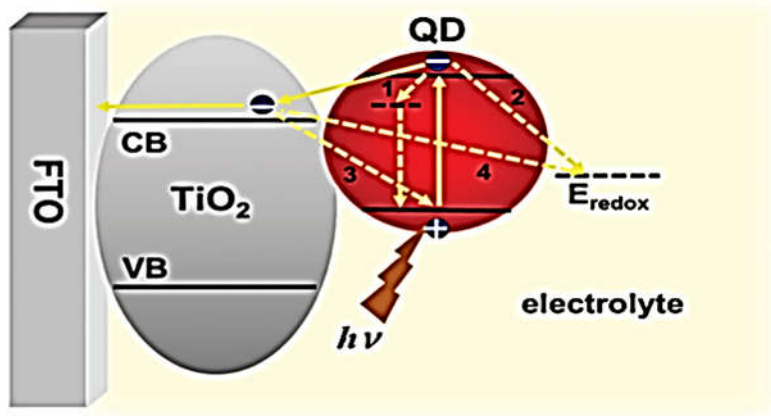
<i>QDs</i>		$J_{sc} (\text{mA/cm}^2)$	$V_{oc} (\text{V})$	<i>FF</i>	<i>PGE</i> %
<i>ZCISE/ZnSe</i>	Champion	26.70	0.780	0.664	13.84
	certifird	26.23	0.782	0.657	13.49

الجدول 5.2: وسائط الخروج القياسة لخلية شمسية *QDs* [76].

5.2 السيطرة على الإلتحامات:

في *QDSCs* ، بصرف النظر عن عمليات نقل الشحنة ، هناك أيضًا العديد من مسارات الإلتحامات التي تتنافس مع هذه العمليات المناسبة . من المعروف جيدًا أن إلتحام الشحنة غير الإشعاعية يمكن أن يؤدي إلى تدهور خطير في أداء الخلية [20,21] . بالنسبة إلى *QDSCs* ، إلتحام الشحن يكون أشد بشكل خاص مقارنة بـ *DSCs* بسبب وجود حالات العيوب في محسّسات *QD* ، فكمية التحميل *QD* المنخفضة تحفز جزء كبير من سطح TiO_2 العاري على التعرض المباشر للإلكتروليكات ، وكذلك النشاط الكيميائي المعقد للإلكتروليكات متعدد الكبريتيد شائع الاستخدام. لذلك يعد كبح الإلتحامات في *QDSCs* مشكلة كبيرة يجب معالجتها للحصول على الأداء الكهروضوئي المرغوب فيه. كما هو مبين في الشكل

7.2 مع الأسهم المنقطعة ، هناك أربعة طرق رئيسية للإلتحام في **QDSCs** (1) إلتحام الشحنة داخل **QD** من خلال حالات العيوب ، (2) إلتحام الإلكترون المثار في **QD** مع العناصر المؤكسدة في الإلكتروليت في واجهة **QD** / الإلكتروليت ، (3) عودة للإلكترونات للخلف في **TiO₂** إلى **QD** على مستوى واجهة **QD/TiO₂**، و (4) إلتحام الإلكترونات في **TiO₂** مع الإلكتروليت عند واجهة **TiO₂** / الإلكتروليت [20]. يمكن أن تؤدي حالات العيوب في **QD** والمساحة الكبيرة من سطح **TiO₂** العاري إلى تقاوم إلتحامات الشحن في **QDSCs** مقارنةً بـ **DSCs**، أين يتم تغطية **TiO₂** بالكامل تقريبًا بواسطة الصبغة أو الخلايا الشمسية البوليمرية.



شكل 7.2: رسم تخطيطي لطرق إعادة تركيب الشحنات الرئيسية في **QDSCs**

1.5.2 هندسة المواد:

نظرًا لكون أحد أصناف الإلتحامات الرئيسية تتم داخل **QDs** من خلال حالات العيوب ، فقد أصبح المحسس **QD** عالي الجودة شرطاً أساسياً للخلايا الشمسية عالية الكفاءة. في مرحلة الدراسة المبكرة لـ **QDSCs**، عادةً ما تم تنمية **QDs** مباشرة على الركيزة **TiO₂** من خلال طرق **SILAR** أو

CBD [32,43]. كما تم ذكره سلفاً، عادةً ما تمتلك **QDs** التي تشكلت من خلال هذه الطريقة في الموضوع كثافة عالية من حالات العيوب بسبب نقص التبلور وعدد كبير من الروابط المعلقة على السطح ، مما يؤدي إلى إلتحامات الشحنة شديدة داخل **QDs** أو العودة الخلفية للإلكترون من TiO_2 إلى **QDs**. لذلك ، فإن اعتماد محسس **QD** عالي الجودة تم تصنيعه مسبقاً هو طريق فعال لتحسين الأداء الكهروضوئي لـ **QDSCs** [77,43]. من ناحية ، تمتلك **QDs** الغروية المركبة مسبقاً كثافة أقل من حالات العيوب الداخلية والسطحية ، والاستفادة من طريقة التوليف المعدني العضوي المتطورة. من ناحية أخرى ، توفر **QDs** المعدة مسبقاً المزيد من الفرص لتحقيق تحكم أفضل في تكوين وهيكله **QDs**. وبالتالي، فليس من المستغرب أن اعتماد **QDs** المُصنَّعة مسبقاً كمحفز قد عزز بشكل بارز تطوير **QDSCs** في السنوات الخمس الماضية [42,44,40,82,81,80,79,78] وفقاً لذلك ، تم بذل الكثير من الجهد لتصميم التركيبة المثلى للـ **QDs** لضمان التحكم في الإلتحامات. من بين الحلول ، تم إثبات أن التصميم **core/shell** واستراتيجية صناعة السبائك وسيلة فعالة لتقليل فقدان الشحن و الإلتحامات.

2.5.2 هندسة الواجهة (السطح البيئي) :

بالإضافة للتحكم في الإلتحامات و تحسين جودة محسّسات **QD** تم إعطاء اهتمام آخر بشكل أساسي لعمليات الإلتحامات التي تحدث في واجهة **QD/TiO₂**//الإلكتروليت [84,21,20]. في الأنود الضوئي ، يتلامس **QDs** و سطح **TiO₂** العاري مباشرة مع الإلكترونيت . هذا يسهل إقتناص الإلكترونيات التقاطها من قبل العناصر المؤكسدة في الإلكترونيت. وبالتالي ، فإن تعديل واجهة **QD/TiO₂** / الإلكترونيت أمر بالغ الأهمية لتحقيق الأداء الكهروضوئي العالي لـ **QDSCs**. بشكل عام ، يمكن تصنيف تقنيات

تعديل الواجهة إلى ثلاثة أنواع: إستراتيجية الطلاء باستخدام مواد فجوة واسعة النطاق غير عضوية ،
والمعالجة الجزيئية العضوية ، وتعديل الإلكتروليت [1].

6.2. قضايا الاستقرار:

بالنسبة لجميع أنواع الخلايا الشمسية الناشئة ، يعد الاستقرار طويل الأمد شرطاً أساسياً لتحقيق تطبيقاتها التجارية. حتى الآن ، يعد الاستقرار على المدى الطويل أحد المعوقات التي تحد من التطبيق العملي لجميع أنواع الخلايا الشمسية الناشئة تقريباً [86,85]. في **QDSCs** ، ركزت القليل من الدراسات على تحقيق الاستقرار ، على الرغم من استقرار الخلية يعد بعيد عن أن يكون مرضياً. لذلك ، من أجل زيادة تطوير هذا النوع من الخلايا الشمسية ، ينبغي تكريس الكثير من الجهد لمعالجة مشكلة الاستقرار. يتم تحديد استقرار **QDSCs** بشكل أساسي من خلال العوامل التالية: (1) الاستقرار الكيميائي لـ **QDs** في الإلكتروليت ؛ (2) الاستقرار الكيميائي و الميكانيكي لقطب العداد المستخدم في **QDSCs** ؛ (3) استقرار زوج الأكسدة والإرجاع في الإلكتروليت ؛ و (4) تقنية الختم المستخدمة لتجنب تسرب وتطاير الإلكتروليت (لأجهزة التوصيل السائل). يظهر ملخص الدراسات لـ **QDSCs** في الجدول 6.2 [1]

QDs	CE	Electrolyte.	Storage conditions	Period (h)	Degradati% %
CdS/CdSe	PbS-CB/FTO	Polysulfide	AC ^a	1000	No
CdS/CdSe	CuInS ₂ -CB/FTO	Polysulfide	In dark at AC	1000	No
CdSe _x Te _{1-x}	CuS/FTO	Polysulfide/SiO ₂	In dark at AC	1000	6.3
CdS/CdSe	Cu ₂ S/brass	Gel polysulfide	—	1000	27
CdS/CdSe	Cu ₂ S-carbon/FTO	Polysulfide	In dark at AC	720	No
CdS/Au@PAA	-Fabric/WO _{3-x}	Polysulfide/SiO ₂	In dark at AC	720	3
CdS/CdSe	PbSe	[DHexBlm][SCN]	—	504	33

CdSe _x Te _{1-x}	Cu ₂ S/FTO	Polysulfide	AC	500	No
CdS/CdSe	CuS/FTO	Gel polysulfide	—	240	No
CdS/CdSe	Pt	Pt	In oven at 60 C	220	8
CdSe _x Te _{1-x}	Cu ₂ S/FTO	Polysulfide	AC	120	20
CdSe _x Te _{1-x}	Cu ₂ S/FTO	Polysulfide/PVP	AC	80	15
CdSe	Cu ₂ S/FTO	Polysulfide/TEOS	AC	76	6
CdSe _x Te _{1-x}	Cu ₂ S/FTO	Gel polysulfide	1 sun illumination	90	20
CdSe	Cu _x S/FTO	Gel polysulfide	1 sun illumination	77	23
Sb ₂ S ₃	Au	CuSCN	0.6 sun illumination	72	10
CdSe _x Te _{1-x}	Cu _x S/FTO	Gel polysulfide	1sun illumination	46	31
CdSe	Cu _x S/FTO	Polysulfide/PEG	1sun illumination	30	No
CdSe _x Te _{1-x}	Cu ₂ S/FTO	Polysulfide	1sun illumination	24	No
CdSe	Cu ₂ S/FTO	Polysulfide	1sun illumination	10	No
CdS/CdSe	NiS–PbS/FTO	Polysulfide	1sun illumination	10	No
CdS/Au@PAA	C-Fabric/WO _{3-x}	Polysulfide/SiO ₂	1–2 sun illumination	5	18
Mn–CdSe/CdSe	Cu ₂ S–RGO/FTO	Polysulfide	1 sun illumination	2	2

^a Ambient condition under room light.

الجدول 6.2 ملخص الدراسات لـ **QDSCs** تحت ظروف اختبار مختلفة

7.2 ملخص و توقعات:

في السنوات الأخيرة برزت **QDSCs** كمرشحة جذابة للخلايا الشمسية من الجيل الثالث. خلال السنوات الخمس الماضية شهدنا تحسناً سريعاً في **PCEs** القياسية التي تم الحصول عليها لـ **QDSCs** ، والتي نشأت عن التقدم المادي والتقني. يبلغ الرقم القياسي لـ **PCE** حوالي **13%** الآن ، وهو مستوى تنافسي مقارنة بأنواع أخرى من الخلايا الشمسية الناشئة. هذا يحفزنا على زيادة تعزيز دراسة هذا النوع من الخلايا الشمسية إلى مستوى أعلى بهدف التطبيق التجاري.

المراجع

- [1] Zhenxiao Pan, Huashang Rao, Iván Mora-Seró, Juan Bisquert and Xinhua Zhong, Quantum dot-sensitized solar cells, *Cite this: Chem. Soc. Rev.*, 2018, 47, 7659.
- [2] I.J. Kramer and E.H. Sargent, *Chem. Rev.*, 2014, 114, 863–882.
- [3] I.J. Kramer and E.H. Sargent, *ACS Nano*, 2011, 5, 8506–8514.
- [4] A. J. Nozik, M. C. Beard, J. M. Luther, M. Law, R. J. Ellingson and J. C. Johnson, *Chem. Rev.*, 2010, 110, 6873–6890.
- [5] G.H. Carey, A.L. Abdelhady, Z. Ning, S.M. Thon, O.M. Bakr and E.H. Sargent, *Chem. Rev.*, 2015, 115, 12732–12763.
- [6] O.E. Semonin, J.M. Luther, S. Choi, H.-Y. Chen, J. Gao, A.J. Nozik and M.C. Beard, *Science*, 2011, 334, 1530–1533.
- [7] H. Gerischer, M. E. Michel-Beyerle, F. Reberndt and H. Tributsch, *Electrochim. Acta*, 1968, 13, 1509–1515.
- [8] K. Kalyanasundaram, *Sol. Cells*, 1985, 15, 93–156.
- [9] B. O'Regan and M. Grätzel, *Nature*, 1991, 353, 737–740.
- [10] S. Mathew, A. Yella, P. Gao, R. Humphry-Baker, B.F.E. Curchod, N. Ashari-Astani, I. Tavernelli, U. Rothlisberger, M.K. Nazeeruddin and M. Grätzel, *Nat. Chem.*, 2014, 6, 242–247.
- [11] P. Wang, S.M. Zakeeruddin, J.E. Moser, M.K. Nazeeruddin, T. Sekiguchi and M. Grätzel, *Nat. Mater.*, 2003, 2, 402–407.
- [12] M. Grätzel, *Acc. Chem. Res.*, 2009, 42, 1788–1798.
- [13] J. Bisquert, *The Physics of Solar Cells: Perovskites, Organics, and Photovoltaic Fundamentals*, CRC Press, Boca Raton, 2017.
- [14] G. Hodes, *J. Phys. Chem. C*, 2008, 112, 17778–17787.
- [15] P.V. Kamat, *J. Phys. Chem. C*, 2008, 112, 18737–18753. M. Pazoki, U.B. Cappel, E.M.J. Johansson, A. Hagfeldt and G. Boschloo, *Energy Environ. Sci.*, 2017, 10, 672–709.
- [16] P. V. Kamat, K. Tvrđy, D.R. Baker and J. G. Radich, *Chem. Rev.*, 2010, 110, 6664–6688.
- [17] Z. Yang, C.Y. Chen, P. Roy and H.T. Chang, *Chem. Commun.*, 2011, 47, 9561–9571.

- [18] I. Mora-Sero and J. Bisquert, *J. Phys. Chem. Lett.*, 2010, 1,3046–3052.
- [19] S.Ruhle, M. Shalom and A. Zaban, *ChemPhysChem*, 2010, 11, 2290–2304.
- [20] K. Zhao, Z. Pan and X. Zhong, *J. Phys. Chem. Lett.*, 2016, 7,406–417.
- [21] I. Mora-Sero, S. Gimenez, F. Fabregat-Santiago, R. Gomez, Q. Shen, T. Toyoda and J. Bisquert, *Acc. Chem. Res.*, 2009, 42, 1848–1857.
- [22] R. Vogel, P. Hoyer and H. Weller, *J. Phys. Chem.*, 1994, 98, 3183–3188.
- [23] N. Serpone, E. Borgarello and M. Grätzel, *J. Chem. Soc., Chem. Commun.*, 1984, 0, 342–344.
- [24] H. Gerischer and M. Lubke, *J. Electroanal. Chem.*, 1986, 204, 225–227.
- [25] R. Vogel, K. Pohland H. Weller, *Chem. Phys. Lett.*, 1990, 174, 241–246.
- [26] A. Zaban, O. I. Micic, B. A. Gregg and A. J. Nozik, *Langmuir*, 1998, 14, 3153–3156.
- [27] P. Yu, K. Zhu, A. G. Norman, S. Ferrere, A. J. Frank and A. J. Nozik, *J. Phys. Chem. B*, 2006, 110, 25451–25454.
- [28] R. Plass, S. Pelet, J. Krueger, M. Grätzel and U. Bach, *J. Phys. Chem. B*, 2002, 106, 7578–7580.
- [29] A. J. Nozik, *Phys. E*, 2002, 14, 115–120.
- [30] L. J. Diguna, Q. Shen, J. Kobayashi and T. Toyoda, *Appl. Phys. Lett.*, 2007, 91, 023116.
- [31] Y.-L. Lee, B.-M. Huang and H.-T. Chien, *Chem. Mater.*, 2008, 20, 6903–6905.
- [32] Y.-L. Lee and Y.-S. Lo, *Adv. Funct. Mater.*, 2009, 19, 604–609.
- [33] H. Lee, M. Wang, P. Chen, D. R. Gamelin, S. M. Zakeeruddin, M. Grätzel and M. K. Nazeeruddin, *Nano Lett.*, 2009, 9, 4221–4227.
- [34] S.-Q. Fan, B. Fang, J. H. Kim, B. Jeong, C. Kim, J.-S. Yu and J. Ko, *Langmuir*, 2010, 26, 13644–13649.
- [35] B. Fang, M. Kim, S.-Q. Fan, J. H. Kim, D. P. Wilkinson, J. Ko and J.-S. Yu, *J. Mater. Chem.*, 2011, 21, 8742–8748.
- [36] J. Xu, X. Yang, H. Wang, X. Chen, C. Luan, Z. Xu, Z. Lu, V. A. Roy, W. Zhang and C. S. Lee, *Nano Lett.*, 2011, 11, 4138–4143.
- [37] Q. Zhang, X. Guo, X. Huang, S. Huang, D. Li, Y. Luo, Q. Shen, T. Toyoda and Q. Meng, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 2011, 13, 4659–4667.
- [38] P. K. Santra and P. V. Kamat, *J. Am. Chem. Soc.*, 2012, 134, 2508–2511.
- [39] E. Martinez-Ferrero, I. M. Sero, J. Albero, S.

- Gimenez, J. Bisquert and E. Palomares, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 2010, 12, 2819–2821.
- [40] Z. Pan, H. Zhang, K. Cheng, Y. Hou, J. Hua and X. Zhong, *ACS Nano*, 2012, 6, 3982–3991.
- [41] H. Zhang, K. Cheng, Y. M. Hou, Z. Fang, Z. X. Pan, W. J. Wu, J. L. Hua and X. H. Zhong, *Chem. Commun.*, 2012, 48, 11235–11237.
- [42] J. Wang, I. Mora-Sero, Z. Pan, K. Zhao, H. Zhang, Y. Feng, G. Yang, X. Zhong and J. Bisquert, *J. Am. Chem. Soc.*, 2013, 135, 15913–15922.
- [43] W. Li and X. Zhong, *J. Phys. Chem. Lett.*, 2015, 6, 796–806.
- [44] S. Jiao, Q. Shen, I. Mora-Sero, J. Wang, Z. Pan, K. Zhao, Y. Kuga, X. Zhong and J. Bisquert, *ACS Nano*, 2015, 9, 908–915.
- [45] S. Jiao, J. Du, Z. Du, D. Long, W. Jiang, Z. Pan, Y. Li and X. Zhong, *J. Phys. Chem. Lett.*, 2017, 8, 559–564.
- [46] Y. Bai, I. Mora-Sero, F. De Angelis, J. Bisquert and P. Wang, *Chem. Rev.*, 2014, 114, 10095–10130.
- [47] J. Tian and G. Cao, *J. Phys. Chem. Lett.*, 2015, 6, 1859–1869.
- [48] J. Xu, Z. Chen, J. A. Zapien, C. S. Lee and W. Zhang, *Adv. Mater.*, 2014, 26, 5337–5367.
- [49] M. Ye, X. Gao, X. Hong, Q. Liu, C. He, X. Liu and C. Lin, *Sustainable Energy Fuels*, 2017, 1, 1217–1231.
- [50] V. Ganapathy, E.-H. Kong, Y.-C. Park, H. M. Jang and S.-W. Rhee, *Nanoscale*, 2014, 6, 3296–3301.
- [51] J. Xiao, Q. Huang, J. Xu, C. Li, G. Chen, Y. Luo, D. Li and Q. Meng, *J. Phys. Chem. C*, 2014, 118, 4007–4015.
- [52] S. Greenwald, S. Ruhle, M. Shalom, S. Yahav and A. Zaban, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 2011, 13, 19302–19306.
- [53] A. Pimachev, U. Poudyal, V. Proshchenko, W. Wang and Y. Dahnovsky, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 2016, 18, 26771–26776.
- [54] M. Kouhnavard, S. Ikeda, N. A. Ludin, N. B. Ahmad Khairudin, B. V. Ghaffari, M. A. Mat-Teridi, M. A. Ibrahim, S. Sepeai and K. Sopian,
- [55] S. Yang, P. Zhao, X. Zhao, L. Qu and X. Lai, *J. Mater. Chem. A*, 2015, 3, 21922–21929.
- [56] C.-H. Chang and Y.-L. Lee, *Appl. Phys. Lett.*, 2007, 91, 053503.
- [57] V. Dzhagan and D. R. T. Zahn, *RSC Adv.*, 2016, 6, 100145–100157. H. Lee, H. C. Leventis, S.-J. Moon, P. Chen, S. Ito, S. A.

- [58] W.-T. Sun, Y. Yu, H.-Y. Pan, X.-F. Gao, Q. Chen and L.-M. Peng, *J. Am. Chem. Soc.*, 2008, 130, 1124–1125.
- [59] D. R. Baker and P. V. Kamat, *Adv. Funct. Mater.*, 2009, 19, 805–811.
- [60] J. H. Bang and P. V. Kamat, *ACS Nano*, 2009, 3, 1467–1476.
- [61] J. Yang and X. Zhong, *J. Mater. Chem. A*, 2016, 4, 16553–16561.
- [62] M. A. Becker, J. G. Radich, B. A. Bunker and P. V. Kamat, *J. Phys. Chem. Lett.*, 2014, 5, 1575–1582.
- [63] J. Tian, L. Lv, C. Fei, Y. Wang, X. Liu and G. Cao, *J. Mater. Chem. A*, 2014, 2, 19653–19659
- [64] J.-H. Yum, J.-W. Lee, Y. Kim, R. Humphry-Baker, N.-G. Park and M. Grätzel, *Sol. Energy*, 2014, 109, 183–188.
- [65] L. C. Spangler, L. Lu, C. J. Kiely, B. W. Berger and S. McIntosh, *J. Mater. Chem. A*, 2016, 4, 6107–6115.
- [66] S. Jiao, J. Wang, Q. Shen, Y. Li and X. Zhong, *J. Mater. Chem. A*, 2016, 4, 7214–7221.
- [67] J.-W. Lee, D.-Y. Son, T. K. Ahn, H.-W. Shin, I. Y. Kim, S.-J. Hwang, M. J. Ko, S. Sul, H. Han and N.-G. Park, *Sci. Rep.*, 2013, 3, 1050.
- [68] L. Tao, Y. Xiong, H. Liu and W. Shen, *Nanoscale*, 2014, 6, 931–938.
- [69] A. Tubtintae, K.-L. Wu, H.-Y. Tung, M.-W. Lee and G. J. Wang, *Electrochem. Commun.*, 2010, 12, 1158–1160.
- [70] B. Liu, D. Wang, Y. Zhang, H. Fan, Y. Lin, T. Jiang and T. Xie, *Dalton Trans.*, 2013, 42, 2232–2237.
- [71] R. K. Chava and M. Kang, *Mater. Lett.*, 2017, 199, 188–191.
- [72] I. Hwang and K. Yong, *ChemPhysChem*, 2013, 14, 364–368.
- [73] M. Wu, X. Lin, Y. Wang and T. Ma, *J. Mater. Chem. A*, 2015, 3, 19638–19656.
- [74] J. Wu, Z. Lan, J. Lin, M. Huang, Y. Huang, L. Fan, G. Luo, Y. Lin, Y. Xie and Y. Wei, *Chem. Soc. Rev.*, 2017, 46, 5975–6023.
- [75] J. Wu, Z. Lan, J. Lin, M. Huang, Y. Huang, L. Fan and G. Luo, *Chem. Rev.*, 2015, 115, 2136–2173.
- [76] Huashang Rao, Mengsi Zhou, Zhenxiao Pan, and Xinhua Zhong, Quantum dot material engineering boosting quantum dot sensitized solar cells efficiency over 13%, *Journal of Materials Chemistry A Materials for energy and sustainability*,

Published on 04 May 2020. Downloaded by University of New England on 5/4/2020

- [77] H.-Y. Wei, G.-S. Wang, H.-J. Wu, Y.-H. Luo, D.-M. Li and Q.-B. Meng, *Acta Phys.-Chim. Sin.*, 2016, 32, 201–213.
- [78] H. Wei, G. Wang, J. Shi, H. Wu, Y. Luo, D. Li and Q. Meng, *J. Mater. Chem. A*, 2016, 4, 14194–14203.
- [79] G. Wang, H. Wei, J. Shi, Y. Xu, H. Wu, Y. Luo, D. Li and Q. Meng, *Nano Energy*, 2017, 35, 17–25.
- [80] Z. Du, Z. Pan, F. Fabregat-Santiago, K. Zhao, D. Long H. Zhang, Y. Zhao, X. Zhong, J. S. Yu and J. Bisquert, *J. Phys. Chem. Lett.*, 2016, 7, 3103–3111
- [81] J. Du, Z. Du, J. S. Hu, Z. Pan, Q. Shen, J. Sun, D. Long, H. Dong, L. Sun, X. Zhong and L. J. Wan, *J. Am. Chem. Soc.*, 2016, 138, 4201–4209.
- [82] Z. Pan, K. Zhao, J. Wang, H. Zhang, Y. Feng and X. Zhong, *ACS Nano*, 2013, 7, 5215–5222.
- [83] P. V. Kamat, *Acc. Chem. Res.*, 2012, 45, 1906–1915.
- [84] P. Cheng and X. Zhan, *Chem. Soc. Rev.*, 2016, 45, 2544–2582.
- [85] H. Tan, A. Jain, O. Voznyy, X. Lan, F. P. G. de Arquer, J. Z. Fan, R. Quintero-Bermudez, M. Yuan, B. Zhang, Y. Zhao, F. Fan, P. Li, L. N. Quan, Y. Zhao, Z.-H. Lu, Z. Yang, S. Hoogland and E. H. Sargent, *Science*, 2017, 355, 722–726 .

الفصل الثالث

محاكاة نمط إشتغال خلية

شمسية محسّنة بنقاط كمية

بـسلفاكو-أطلس

1.3 مقدمة:

تعد المحاكاة العددية للخلايا الشمسية طريقة ضرورية لإيجاد الوسائط أو المعايير المثالية للخلايا واختبار تأثيرات الخصائص الفيزيائية على أدائها.

في هذا الفصل سنتناول أولاً مفاهيم بسيطة حول برنامج المحاكاة **SILVACO – ATLAS** ثم نستخدم البرنامج لمحاكاة نمط إشتغال خلية شمسية متحسسة بنقاط كمية. تنقسم الدراسة إلى مرحلتين:

- في الخطوة الأولى سنحاكي الخلية الشمسية بمواد مختلفة للنقاط الكمية تحت قيم ابتدائية لكل من سمك أكسيد التيتانيوم TiO_2 ، سمك منطقة النقاط الكمية و عمل الإنتزاع للأنود/الكاثود.
- الخطوة الثانية دراسة تأثير كل من سمك أكسيد التيتانيوم TiO_2 ، سمك منطقة النقاط الكمية و عمل الإنتزاع للأنود/الكاثود على الخلية ذات مادة النقاط الكمية التي أعطت أحسن مردود.

2.3 برنامج المحاكاة :

يتضمن برنامج **SILVACO** مجموعة واسعة من الدراسات المتكاملة في إعداد وتوصيف الخلايا الشمسية. سنقوم بتطبيق الجزء الخاص بالخلايا الشمسية **SILVACO – ATLAS** لمحاكاة الخصائص الكهربائية للخلايا الشمسية المقترحة.

1.2.3 تعريفات

"**SILVACO International**" هي شركة برمجيات تقدم برامج لتصميم جميع مجالات الإلكترونيات ، بما في ذلك الدوائر التناظرية والرقمية. تمتلك هذه الشركة برامج تتراوح من نمذجة الأنواع البسيطة إلى مخططات الدوائر المتكاملة المتقدمة وأدوات الإستخراج [2,1].

برنامج **"SILVACO – ATLAS"** هو برنامج محاكاة أنصاف النواقل يعتمد على مبادئ فيزيائية ثنائية وثلاثية الأبعاد ، مما يعني أنه يمكنه التنبؤ بالخصائص الكهربائية المرتبطة بالبنى الفيزيائية المحددة جيداً وظروف الإستقطاب. يتم الحصول على ذلك من خلال تقريب إشتغال المركب بشبكة ثنائية أو ثلاثية الأبعاد ، تشتمل على عدد معين من نقاط الشبكة تسمى العقد. من خلال تطبيق مجموعة من المعادلات التفاضلية ، المستمدة من قوانين ماكسويل **Maxwell** ، على هذه الشبكة ، يمكننا محاكاة إنتقال حاملات الشحنة الحرة من خلال البنية. هذا يعني أنه يمكن نمذجة الكفاءة الكهربائية للمركب في نظام التيار المباشر أو التيار المتناوب أو في أوضاع التشغيل العابرة [1,2].

تم تصميم **ATLAS** ليتم استخدامه مع الأدوات التفاعلية لتصنيع الرقاقة الافتراضية (« VIRTUALWAFER FAB « vwf »). هذه الأدوات هي **DECKBUILD** ، **TONYPLOT** ، **OPTIMIZER** ، **MASKVIEWS** ، **DEVEDIT**

❖ **DECKBUILD**: يوفر بيئة تشغيل تفاعلية.

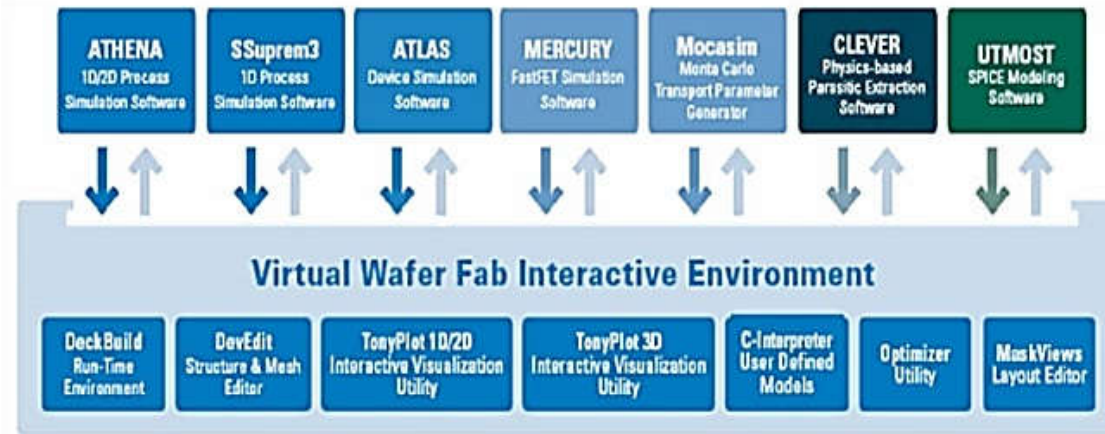
❖ **TONYPLOT**: يوفر إمكانيات تمثيل نتائج المحاكاة ابتداءً من البنية إلى الخواص الكهربائية.

❖ **DEVEDIT**: هو أداة تفاعلية لتحديد البنية والشبكة بالإضافة إلى التحسين.

❖ **MASKVIEWS**: هو محرر قناع للدائرة المتكاملة IC.

❖ **OPTIMIZER**: يدعم التحسين عبر محاكيات متعددة.

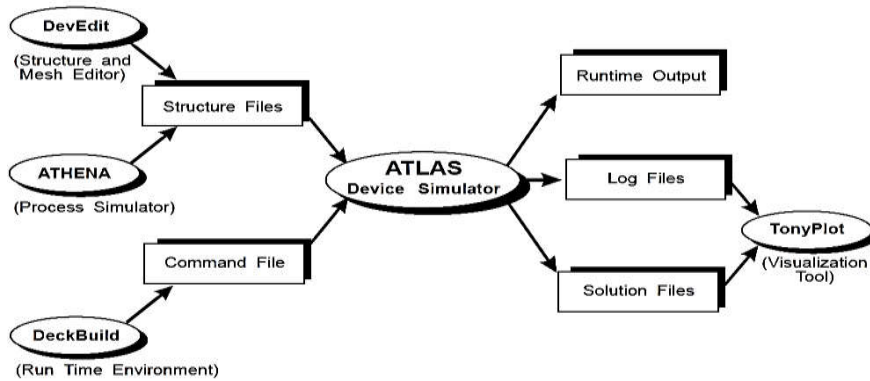
يساعد تصنيع الرقاقة الافتراضية (**VWF**) على أداء المحاكاة بكفاءة دون الحاجة إلى برامج تابعة لجهات خارجية. من الشكل 1.3، نرى أن **Silvaco** مع **VWF** يقدم برنامج محاكاة قوي.



الشكل 1.3: بيئة تصنيع الرقاقة الافتراضية [2,1].

2.2.3. المداخل و المخرج في SILVACO-ATLAS :

الشكل 2.3 يوضح أنواع المعلومات التي تدخل وتخرج من **ATLAS**. تستخدم معظم عمليات المحاكاة على **ATLAS** مدخلين: ملف نصي يحتوي على أوامر لتنفيذ **ATLAS** وملف هيكل يحدد الهيكل الذي سيتم محاكاته. ينتج **ATLAS** ثلاثة أنواع من المخرج. يوفر إخراج وقت التشغيل دليلاً لتقدم تشغيل عمليات المحاكاة ، وهنا تظهر رسائل الخطأ والتحذير. تخزن ملفات السجل جميع الجهود والتيارات عند الحدود و التيارات الداخلية في المركب ، وتخزن ملفات الحل البيانات ثنائية وثلاثية الأبعاد المتعلقة بقيمة متغيرات الحل ضمن المركب من أجل كل قيمة إستقطاب [2,1].



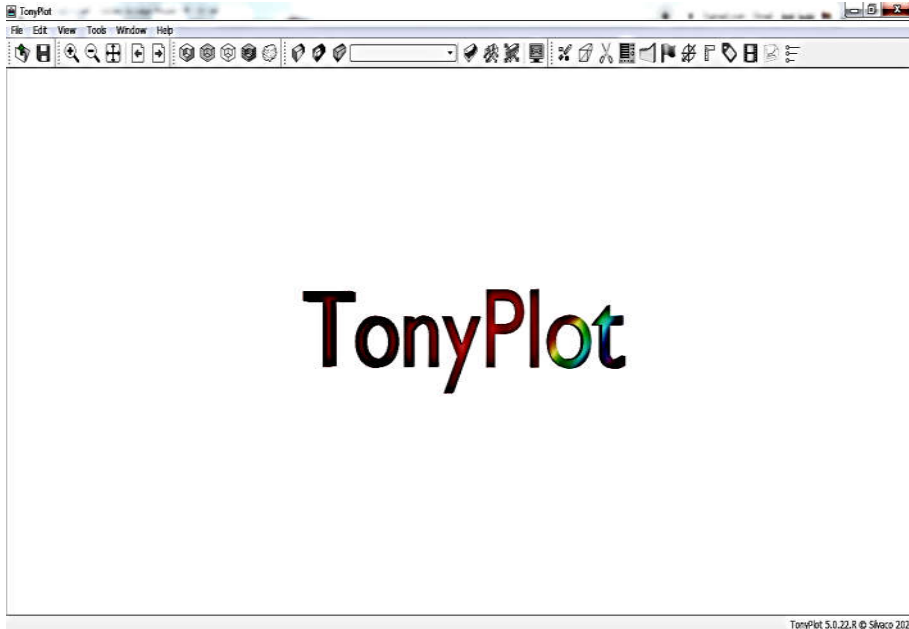
الشكل 2.3: مداخل ومخارج Atlas [2,1].

1.2.2.3. DeckBuild :

DeckBuild هي بيئة تشغيل رسومية تفاعلية ، لتطوير العمليات ومدخلات نظام المحاكاة. يتكون من نافذة لإنشاء منصة الإدخال و نافذة لإستخراج وسائط و نتائج المحاكاة ومجموعة من النوافذ المنبثقة التي توفر لغة كاملة و دعما للتنفيذ [2,1].

2.2.2.3. Tonyplot :

TonyPlot هي أداة معالجة رسومات تستخدم مع جميع محاكيات **SILVACO** وهي جزء لا يتجزأ من **VWF** ، فهي توفر إمكانيات كاملة لعرض وتحليل خصائص الإخراج (هيكل المكون الإلكتروني ، وملف تعريف التطعيم ، والخصائص الكهربائية). يمكن أن يعمل **TONYPLOT** بشكل مستقل أو مع أدوات **VWF** التفاعلية الأخرى ، مثل **DECKBUILD** أو **VWF** أو **SPDB** انظر الشكل [2,1]3.3.



الشكل 3.3: النافذة الأساسية **TonyPlot**.

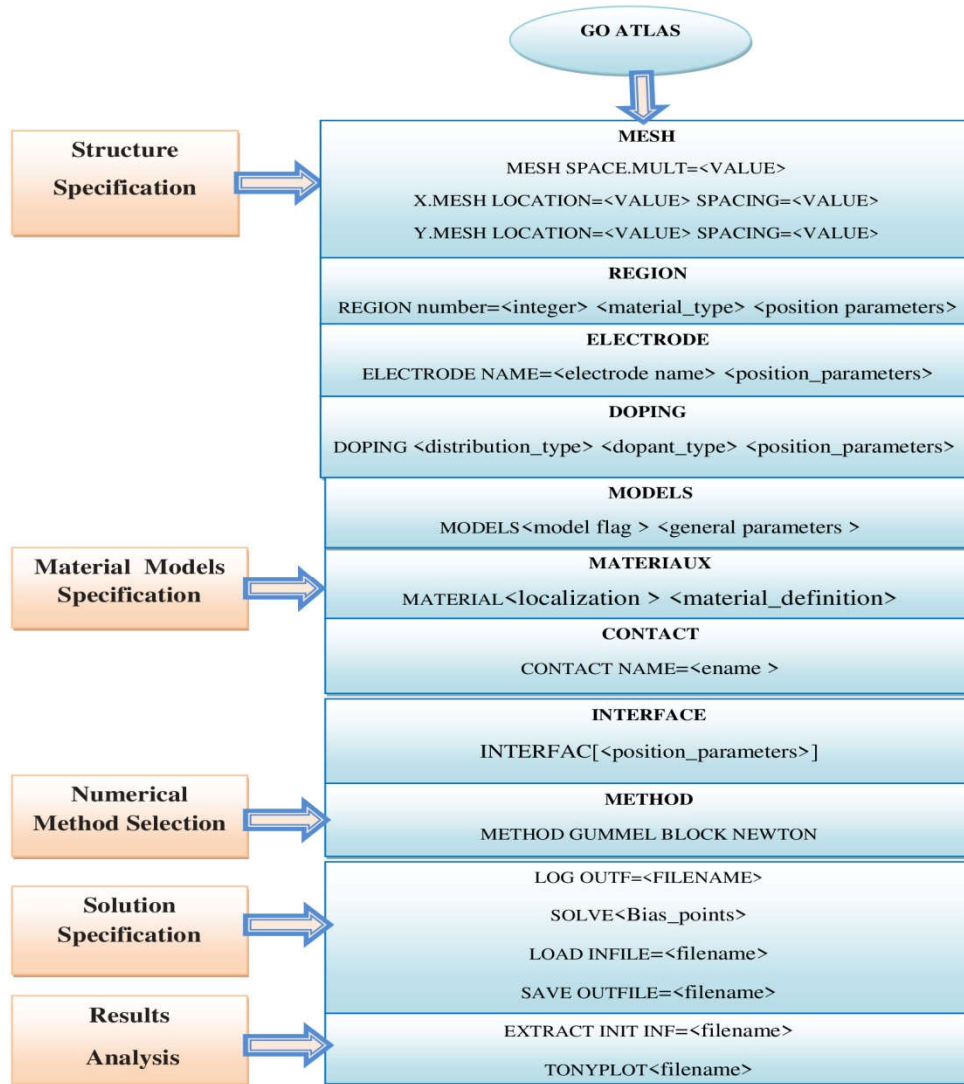
3.2.3 . بنية الإدخال في **SILVACO – ATLAS** :

ملف أوامر **ATLAS** هو عبارة عن قائمة بأوامر **ATLAS** ليتم تنفيذها. يتم تخزين هذه القائمة كملف نصي **ASCII** والذي يمكن تحضيره في **DECKBUILD** أو باستخدام أي محرر نصوص. يفضل إعداد ملف الإدخال في **DECKBUILD**، ويمكن تسهيل ذلك من خلال الاستخدام المناسب لقائمة أوامر **DECKBUILD**. يحتوي ملف الإدخال على سلسلة من التعليمات. تتكون كل عبارة من كلمة أساسية تحدد التعليمة ومجموعة من الإعدادات المكتملة لها. التنسيق العام هو:

<STATEMENT><PARAMETER>=<VALUE>

4.2.3 . مخطط البناء العام لـ **ATLAS** :

في هذه المحاكاة ، يتم تعريف الخلية الشمسية بشكل رسومي في **ATLAS** عبر واجهة **Deckbuild**. من أجل تحديد الخلية بشكل صحيح، من الضروري إدخال خصائص المواد ليس فقط الأبعاد.



الشكل 4.3: مخطط انسيابي لمراحل بناء نموذج في ATLAS.

Mesh. 1.4.2.3.

الخطوة الأولى في تصميم المركب بعد الأمر **go atlas** هي تحديد الشبكة , الشبكة عبارة عن شبكة تغطي المنطقة المادية التي يتم فيها بناء المركب ومحاكاته ؛ يتم إنشاء الشبكة ببساطة عن طريق سلسلة من الخطوط الأفقية والشاقولية التي يحددها المستخدم مع مسافة بينها [2,1] .

وتلعب الشبكة دورًا مهمًا في الحصول على محاكاة جيدة. يجب أن يتم ذلك بعناية فائقة لضمان موثوقية النتائج, يجب أن يتم اختيار الشبكة بطريقة تؤدي إلى حل وسط بين سرعة التنفيذ و دقة النتائج [2,1].

2.4.2.3. Region (المناطق) :

يتم استخدام أمر المنطقة لفصل التعليمات من الشبكة الأولية إلى كتل مميزة وتحديد إعدادات المواد الأولية التي يمكن تعيينها لاحقاً بواسطة أرقام المنطقة. يجب تعيين جميع مجالات الشبكة الخاصة بالبنية بمنطقة ويجب ترتيب المناطق من الأدنى إلى الأعلى. على سبيل المثال، لا يمكن تحديد المنطقة 5 قبل المنطقة 4 [2,1].

3.4.2.3. Electrode (القطب الكهربائي) :

يسمح تعريف الأقطاب الكهربائية بتكوين اتصالات الشبكة والأنود والكاثود [2,1] ، ومع ذلك فإن **SILVACO ATLAS** له حد 50 قطباً يمكن تعريفه [2,1].

4.4.2.3. Doping (التطعيم) :

إن الجانب الأخير من إنشاء البنية هو التطعيم. يمكن أن يكون التطعيم من النوع n أو p ، كما يمكن أن يكون التوزيع منتظماً ، **Gaussian** ، إلخ... [2,1].

5.4.2.3. Material (المواد) :

بمجرد تجميع البنية بالكامل، يجب تحديد المواد المستخدمة في بناء المركب. يسمح أمر الأجهزة بتحديد بعض المعلمات الأساسية. يمكن أن تنطبق هذه القيم على مادة أو منطقة [2,1].
إن القدرة الأكثر أهمية التي تسمح بها أوامر المواد هي إنشاء مواد يحددها المستخدم. يمكن للمستخدم استخدام أي مادة بشكل تحكيمي عند تعريف بنية، ثم تعديل جميع خصائصه لتتوافق مع تلك الموجودة في المادة المطلوبة. على الرغم من تسمية المادة على اسم المادة المختارة إلا أنها ستعمل وظيفياً مثل أي مادة يرغبها المستخدم [2,1].

6.4.2.3 Models (النماذج الفيزيائية) :

تنقسم النماذج المادية إلى خمس فئات الحركية، الالتحام، وحركية الحاملات، والتأين الناتج عن التأثير والنفق، ويعتمد اختيار النموذج على المواد المختارة للمحاكاة. المثال أدناه ينشط العديد من النماذج:

❖ نماذج CONMOB FLDMOB SRH

- **CONMOB** : هو نموذج الحركية اعتمادًا على تركيز التطعيم.
- **FLDMOB** : وهو نموذج التنقل الذي يعتمد على الحركية المتأثرة بالحقل الكهربائي.
- **SRH** : هو نموذج **ShockleyRead – Hall** لإحصائيات حاملات الشحنة [2,1].

Contacts. 7.4.2.3 (جهات الإتصال):

تشير إلى الخصائص الفيزيائية للقطب الكهربائي (المقاومة ، أعمال الإنتزاع...)[2,1].

8.4.2.3 Interface (الواجهة) :

يشير إلى معلمات الواجهة في حدود أنصاف النواقل أو العوازل على العقد الحدودية [2,1].

9.4.2.3 Light (الضوء) :

عندما تكون الإضاءة مهمة للمركب (كما هو الحال في الخلايا الشمسية)، هناك إمكانية لاستخدام عدد من مصادر الضوء وتعديل موقعها واتجاهها وشدتها. يمكن وصف طيف الضوء بكل التفاصيل الضرورية [2,1].

10.4.2.3 solution method (طريقة الحل) :

يحتوي **ATLAS** على العديد من الطرق العددية لتحديد الحلول في مركبات أنصاف النواقل ، وهناك ثلاثة أنواع رئيسية من الطرق العددية. الطريقة الأولى هي طريقة **GUMMEL** وهي مفيدة عندما يكون

نظام معادلات مستقلة ولكن له تقارب خطي فقط. الطريقة الثانية هي طريقة نيوتن ، وهي مفيدة عندما يقترن نظام المعادلات بقوة ولديه تقارب تربيعي. تستغرق هذه الطريقة مزيدًا من الوقت لتحديد الحلول التي تكون مستقلة وتتطلب أيضًا أن تكون التقديرات الأولية للحلول مقارنة للحلول الفعلية لضمان للحصول على التقارب. الطريقة الأخيرة تمزج بينهما هي طريقة الكتلة التي يمكن أن توفر أوقات محاكاة أسرع [1,2].

11.4.2.3 solution Specification (تحديد وتخصيص الحل) :

هذا القسم من منصة الإدخال هو المكان الذي تجرى فيه المحاكاة حساباتها لحل المركب المحدد.

وهي مقسمة إلى أربعة أجزاء : **Log ، Solve ، Load ، Save**.

الأمر log يقوم بإنشاء ملف حفظ لحالة التوازن أو الحالة الديناميكية، DC (التيار المباشر أو التيار المستمر (يرمز له باللاتينية DC أي Direct Current)). أي البيانات المحددة من خلال الأمر solve بعد الأمر log.

الأمر solve يتبع بأمر log ويحسب المعلومات المتعلقة بنقطة أو أكثر من نقاط الاستقطاب لأوامر load و Save تستعمل معا للمساعدة على إنشاء أفضل التقديرات الأولية من اجل نقاط الاستقطاب . يتم استخدام الأمر Save أولا لتخزين جميع المعلومات حول نقاط الاستقطاب، وبعد ذلك يتم استخدام الأمر load لاسترداد هذه المعلومات والمساعدة في الحل [1,2].

12.4.2.3 Extraction and plott (استخراج البيانات وتعقيبها) :

بمجرد العثور على الحلول التي تحاكي المركب يمكن عرض المعلومات بشكل رسومي باستخدام

Tonyplot. بالإضافة إلى ذلك يمكن استخراج وسائط الأجهزة عن طريق الأمر **EXTRACT**.

3.3 نتائج المحاكاة:

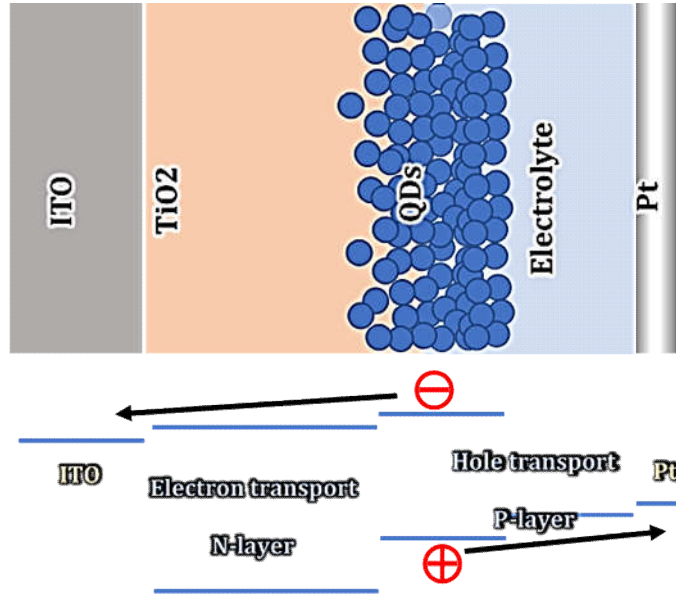
1.3.3 بنية الخلية الشمسية ومخطط الطاقة في حالة الإتزان:

نوضح في الجدول 1.3 مدخلات تعريف المواد التي تشكل بنية الخلية الشمسية حيث إعتدنا في البداية على النقاط الكمية QDs من $CdTe$ وأهملنا وجود العيوب البنيوية.

الجدول 1.3 : معطيات تعريف المواد المستخدمة في الخلية الشمسية.

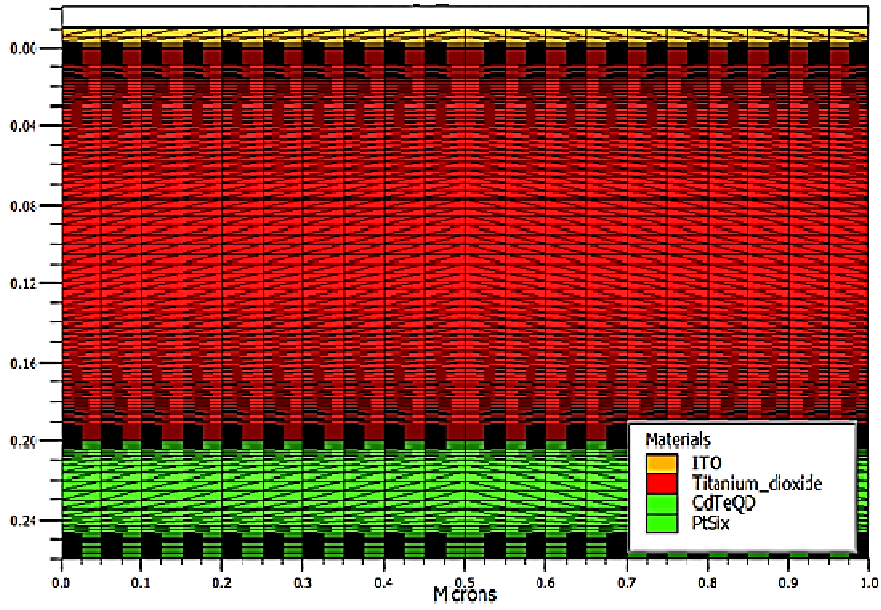
Parameter	Designation	ITO [3]	TiO ₂ [4]	QD CdTe [5]
E_g (eV)	Gap energy	3.75	3.2	1.5
$q\chi_s$ (eV)	Affinity	4.8	4.1	4.7
N_c (cm ⁻³)	Effective density of Conduction band ($\times 10^{19}$)	0.58	20	0.08
N_v (cm ⁻³)	Effective density of Valence band ($\times 10^{19}$)	0.1	10	1.8
μ_n (cm ² V ⁻¹ s ⁻¹)	Electron mobility	45	0.3	32
μ_p (cm ² V ⁻¹ s ⁻¹)	Hole mobility	4.5	0.1	10
ϵ_r	Relative dielectric constant	8.9	12.3	9.4

نوضح في الشكل 5.3 مخططا مبسط يشرح نمط إشتغال الخلية ، والنموذج المبسط للبنية التي سوف تحاكي لاحقا بسلفاكو.

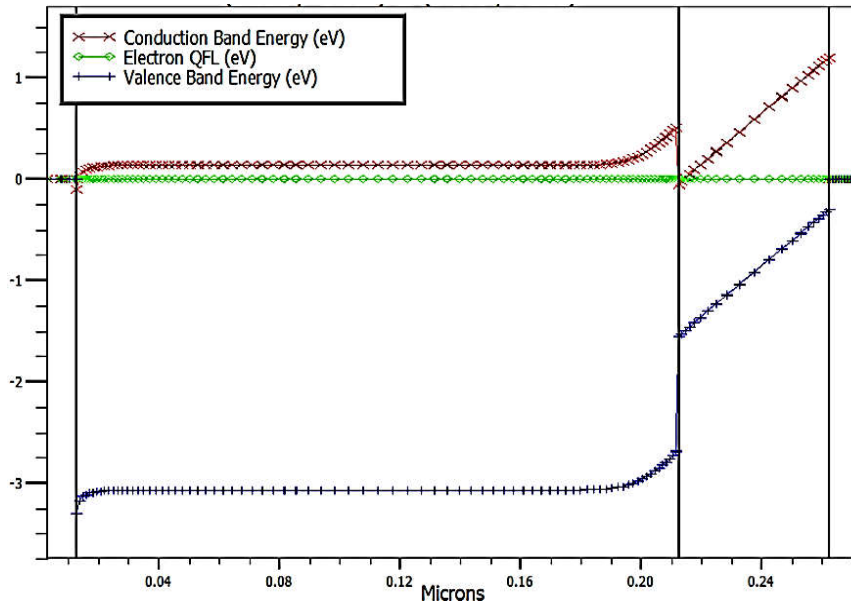


الشكل 5.3 : مخطط مبسط لنمط إشتغال الخلية الشمسية المتحسسة بالنقاط الكمية التي ستحاكي لاحقا بسلفاكو-أطلس.

في البداية نعتبر أن مادة النقطة الكمية هي $QD CdTe$ ، سمكها 50 nm ، أن سمك الطبقة الناقلة للإلكترونات من TiO_2 هو $0.2 \mu m$ و أن عملي الإنتزاع لكل من الكاتود و الأنود على التوالي 5.9 eV ، 4.0 eV . نوضح في الشكل 6.3 بنية سلفاكو المحاكاة وفي الشكل 7.3 مخطط الطاقة في الإتران.



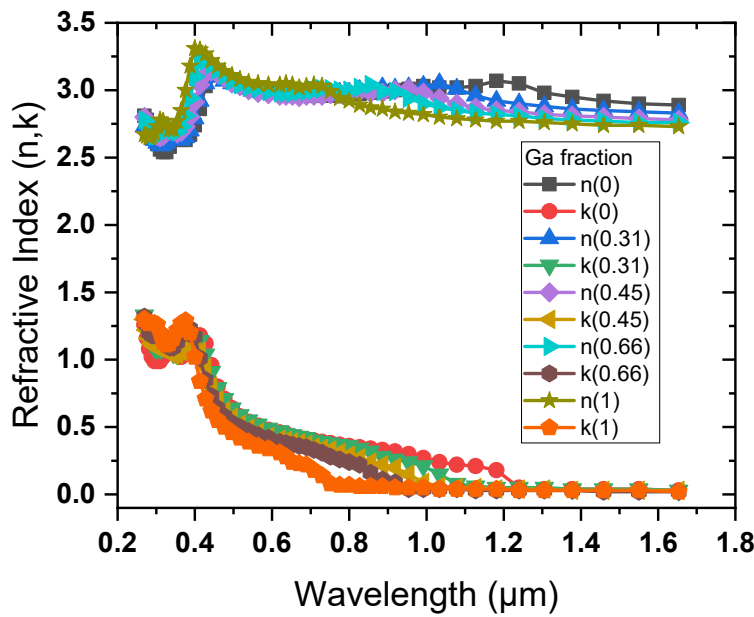
الشكل 6.3 : بنية الخلية المحاكاة بسلفاكو-أطلس.



الشكل 7.3 : مخطط الطاقة في التوازن

2.3.3 تأثير تغيير مادة النقاط الكمية:

نقوم فيما يلي بتغيير مادة النقاط الكمية من $QD CdTe$ إلى $QD CIGS$ ، مع تغيير نسبة الغاليوم في هذه الأخيرة. نوضح في الشكل 8.3 كيف تتغير القرائن الضوئية في $QD CIGS$ مع تغير نسبة الغاليوم و في الجدول 2.3 كيف يتغير كل من النطاق الممنوع و الألفة الإلكترونية [6].



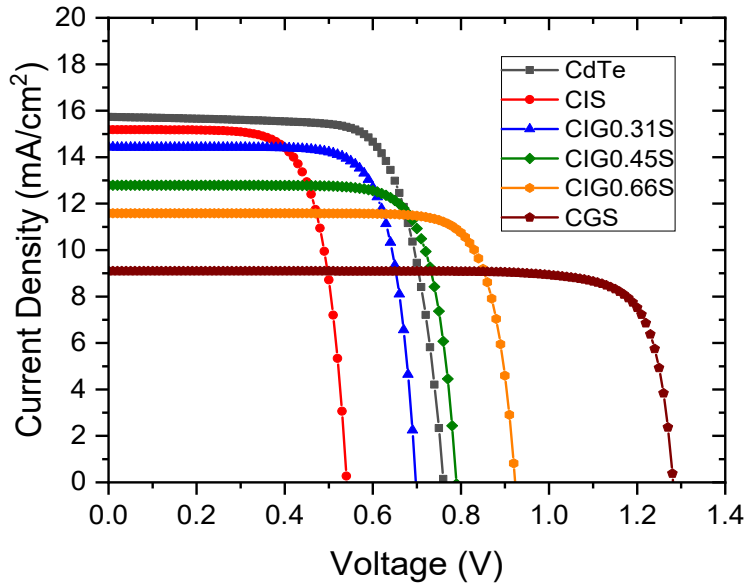
الشكل 8.3 : تغير القرائن الضوئية مع نسبة القاليوم في $QD CIGS$ [6].

الجدول 2.3 : تأثير نسبة الغاليوم على نطاق الطاقة و الألفة الإلكترونية [6].

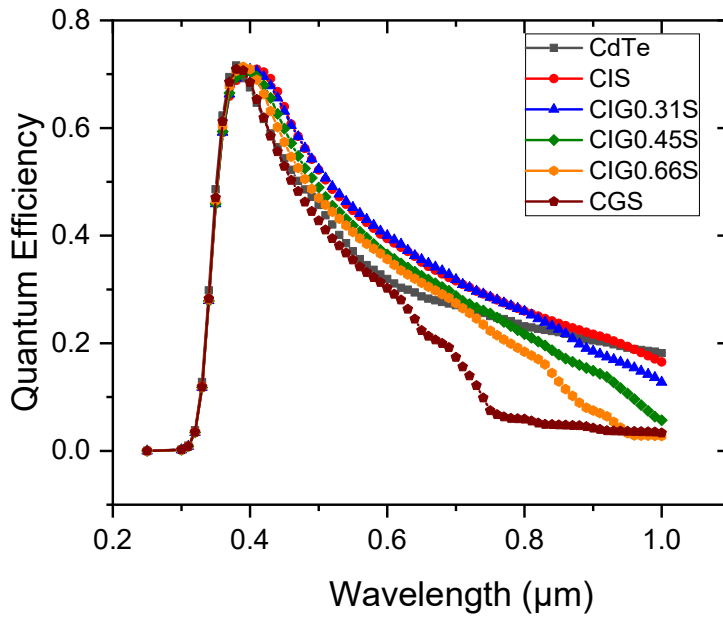
QD material	Band gap energy (eV)	Electronic affinity(eV)
CIS	1.04	4.61
CIG0.31S	1.2	4.45
CIG0.45S	1.3	4.35
CIG0.66S	1.45	4.2
CGS	1.7	3.95

نوضح في الشكل 9.3 الخصائص تيار-جهد حسب مادة النقاط الكمية المختلفة، وفي الشكل 10.3

المردود الكوانتي، بينما نلخص في الجدول 3.3 وسائط الخروج المحصل عليها.



الشكل 9.3: الخاصية تيار-جهد لمادة النقاط الكمية المختلفة.



الشكل 10.3: خاصية المردود الكوانتي لمادة النقاط الكمية المختلفة.

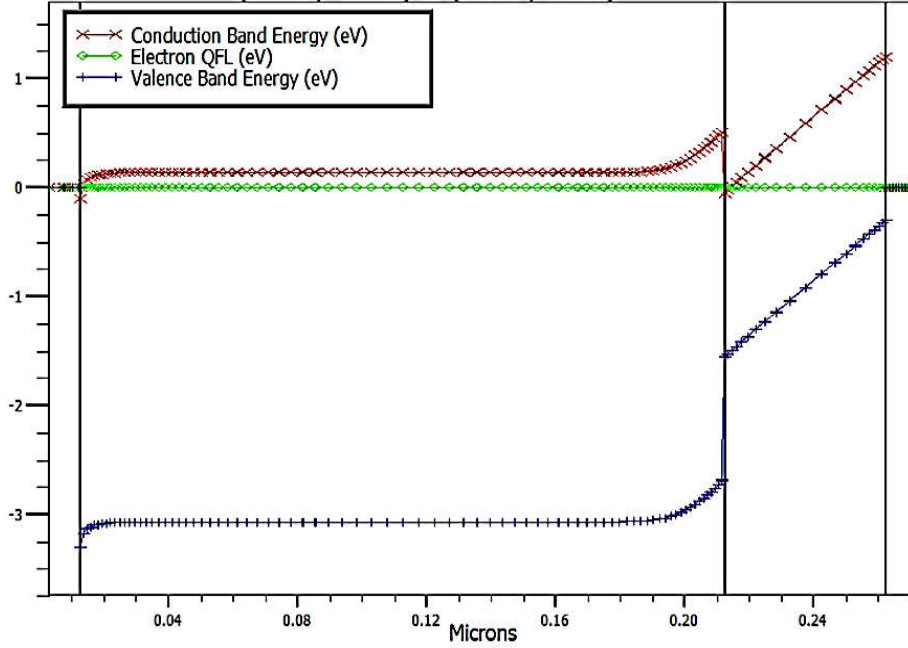
تتميز مادة الـ $QD CdTe$ بنطاق طاقي في حدود $1.5 eV$ وهو ملائم جدا للقيمة العظمى للطيف الشمسي، بينما في $QD CIGS$ فإن زيادة الغاليوم تؤدي إلى رفع قيمة نطاق الطاقة من $1.04 eV$ إلى $1.7 eV$ ، ويظهر تأثير ذلك جليا على منحنيات تيار-جهد، حيث نلاحظ إنخفاضا في قيمة التيار الضوئي مقابل ارتفاع في جهد الدارة المفتوحة. إنخفاض قيمة التيار الضوئي تظهر أيضا في خاصية المردود الكوانتي التي تنخفض إيجابتها في أطوال الموجة الكبيرة منحاذاة إلى أطوال الموجة القصيرة. من خلال جدول وسائط الخروج نستنتج أن مادة $QD CGS$ هي الأحسن بما أنها أعطت أحسن قيمة للمردود في حدود 9.58% .

الجدول 3.3: وسائط الخروج حسب مادة النقاط الكمية.

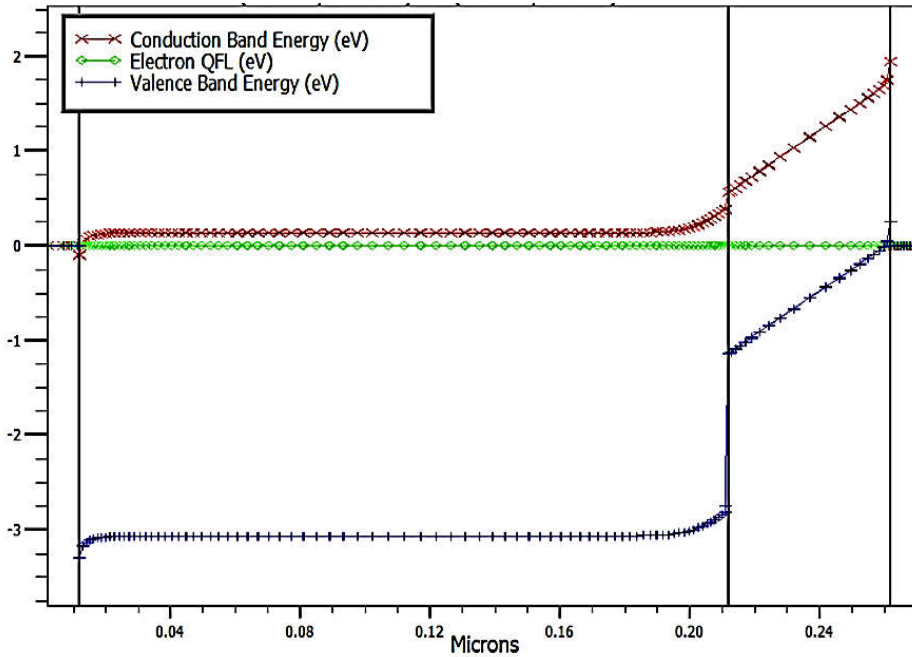
مادة النقاط الكمية	$J_{sc}(mA/cm^2)$	$V_{oc}(V)$	$FF\%$	$PCE\%$
CdTe	15.73	0.760	73.63	8.81
CIS	15.18	0.540	71.82	5.89
$CIG_{0.31}S$	14.42	0.697	76.69	7.71
$CIG_{0.45}S$	12.79	0.789	78.29	7.91
$CIG_{0.66}S$	11.58	0.923	80.54	8.61
CGS	9.09	1.28	82.26	9.58

نوضح في الشكلين 11.3 و 12.3 مخطط الطاقة في التوازن لكل من $CdTe$ و CGS حيث نلاحظ غياب حاجز كموني أمام الثقوب بين طبقة النقاط الكمية و الأنود في حالة $CdTe$ بينما يوجد تقطع واضح على

مستوى E_c بين طبقة النقاط الكمية و الطبقة الناقلة للإلكترونات. العكس تماما يحدث لما تكون مادة النقاط الكمية من CGS. وهو مايفسر إنخفاض التيار وإرتفاع الجهد عندما نقارن بين الخليتين.



الشكل 11.3: مخطط الطاقة في التوازن بالنقاط الكمية من CdTe .



الشكل 12.3: مخطط الطاقة في التوازن بالنقاط الكمية من CGS.

3.3.3 المقارنة مع بعض النتائج التجريبية:

نذكر أن المحاكاة التي أجريناها هي في الحالة المثالية، أي أهملنا تأثير العيوب التي تتواجد سواء في مادة النقاط الكمية أو المنطقة الناقلة للإلكترونات أو السطوح البينية، و إعتدنا فقط على مدة حياة حاملات الشحنة الصغيرة والتي تتميز بها الحاملات في البنى النانوية.

نوضح في الجداول 4.3 - 5.3 - 6.3 بعض القيم التجريبية لوسائط الخروج حيث كانت مادة النقاط الكمية من **QD - CIS** ، وتم دراسة تأثير درجة حرارة ترسيب الشرائح ، النسبة بين نحاس و أنديوم مادة النقاط الكمية أو كمية التحميل بالنقاط الكمية، وكما يمكن ملاحظته فإن قيمة المردود تتراوح من 1 إلى 3 إلى 8% (أحسن مردود تم الوصول إليه هو 8%) . في المحاكاة المردود الذي حققته مادة **QD - CIS** هو 5.89% و هي ضمن المجال التجريبي V_{oc} التي تحصلنا عليها كانت أخفض قليلا من القيم التجريبية ، بينما **FF** كانت أعلى. يبقى أنه يمكن مستقبلا التعمق في دراسة مدى تأثير العيوب وأماكن تواجدها على أداء هذا النوع من الخلايا الشمسية الحديثة وكذلك تقريب نتائج المحاكاة أكثر من القيم التجريبية.

الجدول 4.3: وسائط الخروج الكهربائية لخلية شمسية بنقاط كمية من **QD - CIS** على شكل طبقة متوضعة على شريحة من **TiO2** من أجل عدة درجات حرارية للتحمية أثناء الترسيب [7] .

Temperatures	$V_{oc}(V)$	$I_{sc}(mA/cm^2)$	FF	PCE %
200 °C	0.5	5.63	0.37	1.04
300 °C	0.53	7.76	0.41	1.68
400 °C	0.68	11.33	0.41	3.13
500 °C	0.68	8.58	0.42	2.44

الجدول 5.3: تأثير زيادة نسبة الإنديوم على وسائط الخروج [8].

	$V_{oc}(V)$	$I_{sc}(mA/cm^2)$	FF	PCE %
QD1	0.5	3.51	0.57	1.0
QD2	0.594	20.8	0.44	5.55
QD3	0.622	21.8	0.48	6.52
QD4	0.630	25.2	0.47	7.53
QD5	0.624	23.9	0.46	6.95
QD6	0.644	26.5	0.46	8.0

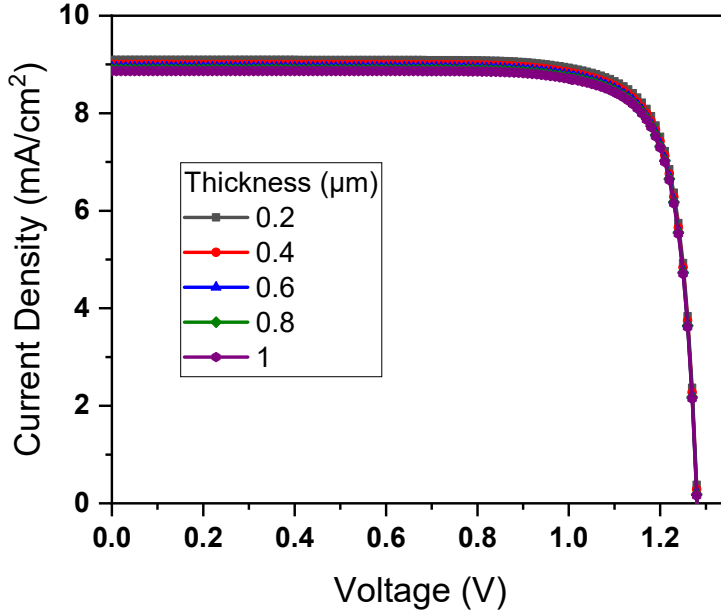
الجدول 6.3: تأثير كمية النقاط الكمية على وسائط الخروج [9].

J-V Characteristic	$I_{sc}(mA/cm^2)$	$V_{oc}(V)$	FF(%)	η (%)	Amount of CIS-d QDs loading on different TiO ₂ photo anode (mg/cm ²)
CIS-d QDs loading on photo anode made of different morphology and composite TiO ₂					
P2S	4.5	758	61	2.1	0.50 ±0.05
S μ S	4.6	840	85	3.2	0.39 ±0.05
F μ S	3.3	765	66	1.6	0.63 ±0.1
S μ S+ P2S	6.2	926	66	3.8	0.47 ±0.05
F μ S+ P2S	4.8	773	68	2.5	0.70 ±0.1
CIS QDs of different sizes loading on photo anode made of S μ S+ P2S(80+20) composite TiO ₂					
					Amount of CIS QDs of different sizes loading on S μ S+ P2S

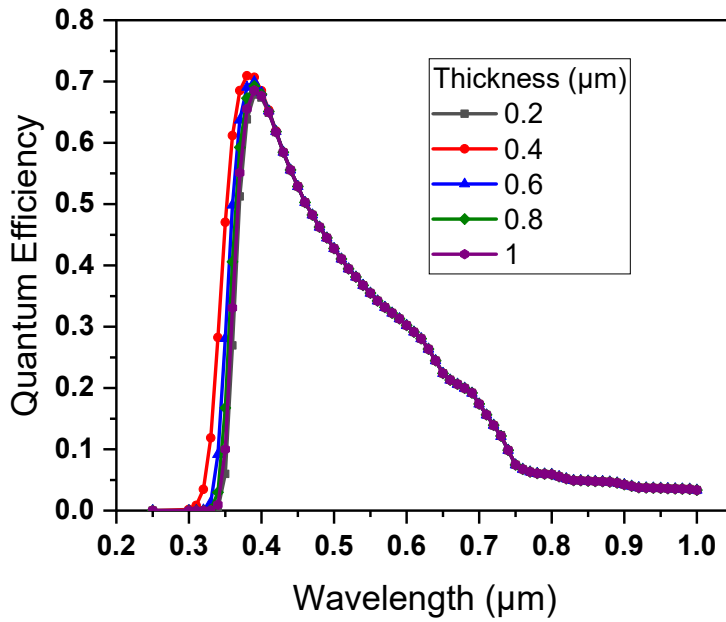
4.3 الدراسة التحسينية :

بما أن مادة CGS أظهرت أحسن مردود للتحويل ، فالدراسة التحسينية سوف تقتصر عليها.

1.4.3 تأثير سمك الطبقة الناقلة للإلكترونات لـ $ETL(TiO_2)$:



الشكل 13.3: منحنيات الخاصية تيار-جهد



الشكل 14.3: منحنيات المردود الكوانتي

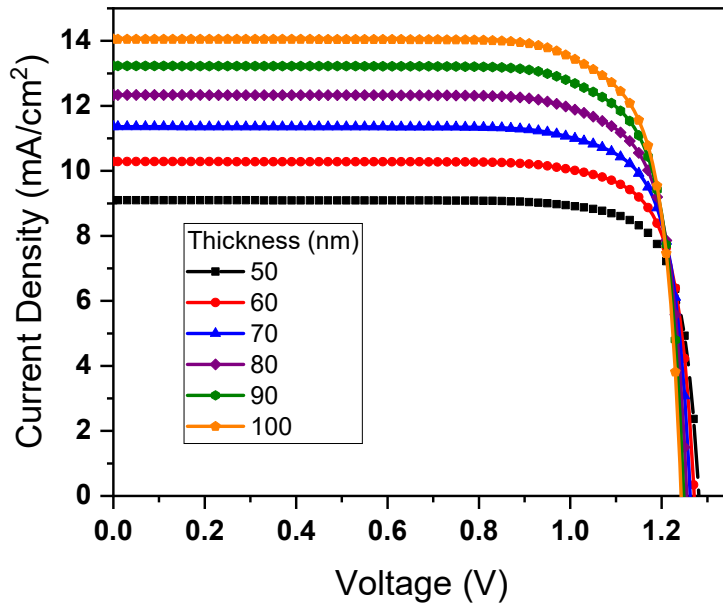
الجدول 7.3: وسائط الخروج الكهربائية

سمك طبقة ETL	$J_{sc} (mA/cm^2)$	$V_{oc} (V)$	$FF\%$	$PCE \%$
0.2	9.096	1.281	82.26	9.58
0.4	9.000	1.2810	82.26	9.48
0.6	8.939	1.2808	82.25	9.41
0.8	8.896	1.2806	82.24	9.37
1	8.867	1.2805	82.23	9.33

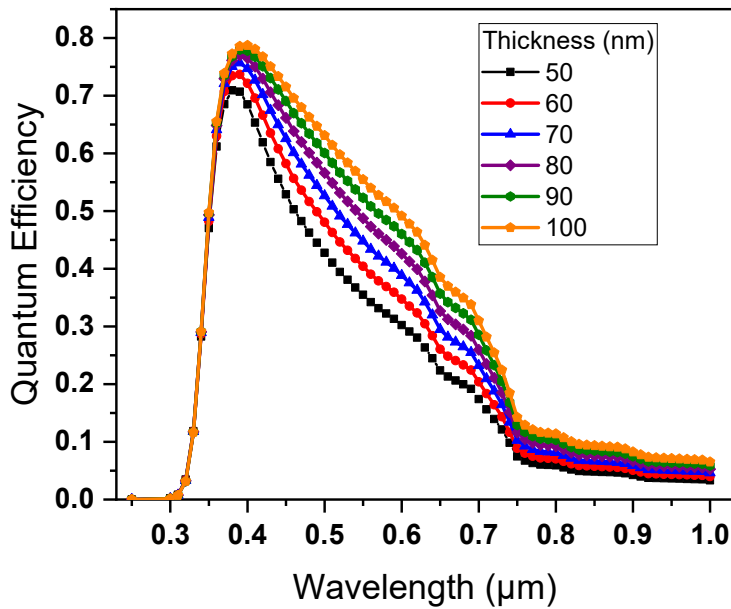
من خلال الجدول 7.3 والشكلين 13.3-14.3 نلاحظ أن V_{oc} تثبت في قيمه **1.28 V** و تناقص طفيف جدا في معامل الشكل ، رغم تغير سمك طبقة **ETL**.التناقص الملحوظ في المردود الكوانتي ، تيار الدارة القصيرة وكفاءة التحويل بزيادة السمك, ومنه نستنتج أن زيادة سمك الطبقة **ETL** يؤثر سلبا على الخلية نظرا لمحدودية طول إنتشار الإلكترونات الحرة مقارنة مع سمك الطبقة.

2.4.3 تأثير سمك طبقة النقاط الكمية :

نقوم الآن بتغيير سمك النقاط الكمية **QDs** من **50 nm** إلى **100 nm** كحد أقصى وفي العادة لا يمكن تجاوز ذلك الحد لأنه المجال المعروف عادة للبنى النانوية.



الشكل 15.3: منحنيات الخاصية تيار-جهد



الشكل 16.3: منحنيات المردود الكوانتي

الجدول 8.3: وسائط الخروج الكهربائية

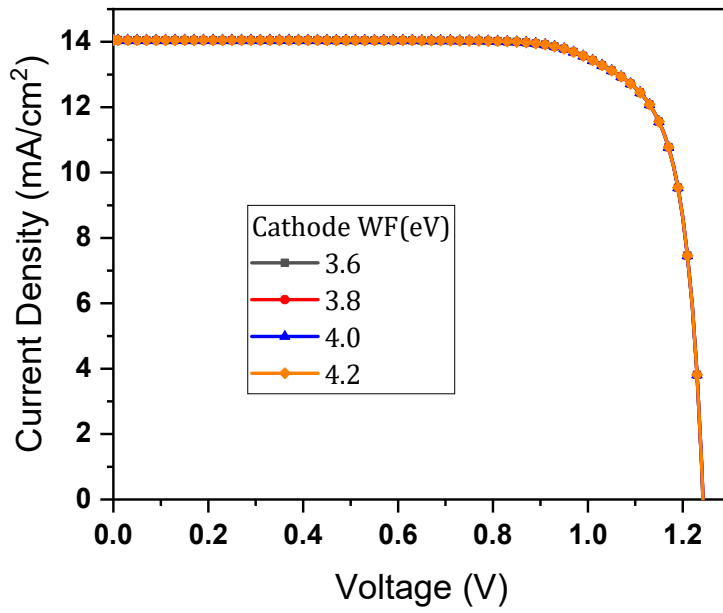
سمك طبقة QD	$J_{sc} (mA/cm^2)$	$V_{oc} (V)$	$FF\%$	$PCE \%$
0.05	9.09	1.281	82.26	9.58
0.06	10.28	1.271	81.44	10.64
0.07	11.35	1.262	80.78	11.58
0.08	12.33	1.254	80.23	12.41
0.09	13.22	1.248	79.76	13.17
0.1	14.05	1.245	79.41	13.86

من خلال الجدول 8.3 و الشكل 15.3-16.3 نلاحظ أن بزيادة سمك طبقة QDs يتناقص جهد الدارة المفتوحة ومعامل الإمتلاء في حين يزدادتيار الدارة القصيرة والمردود . الزيادة المحسوسة في التيار تغلب على النقصان في V_{oc} ، FF وتؤدي إلى الإرتفاع الملحوظ في المردود.

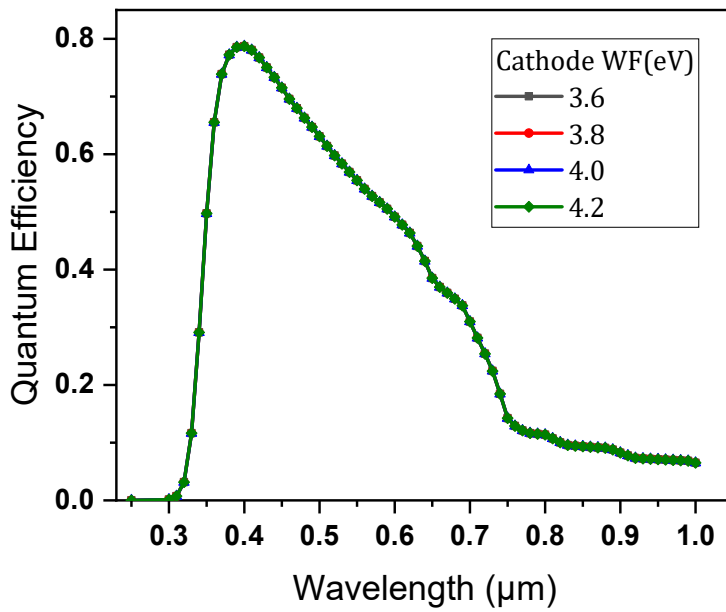
هذا التحسن الملحوظ في كفاءة التحويل وتيار الدارة القصيرة بشكل رئيسي من خلال تحسين الامتصاص الخلية للضوء مع زيادة سمك المنطقة النشطة QDs و الذي يظهر أيضا جليا في المردود الكوانتي. الامتصاص الجيد يحفز المنطقة على توليد الحاملات الحرة و يعود إيجابا على مردود الخلية.

3.4.3 تأثير عمل الإنتزاع للكاثود:

نغير عمل الإنتزاع للكاثود في المجال المعروف غالبا من $3.6eV$ إلى $4.2eV$.



الشكل 17.3: منحنيات الخاصية تيار-جهد



الشكل 18.3: منحنيات المردود الكوانتي

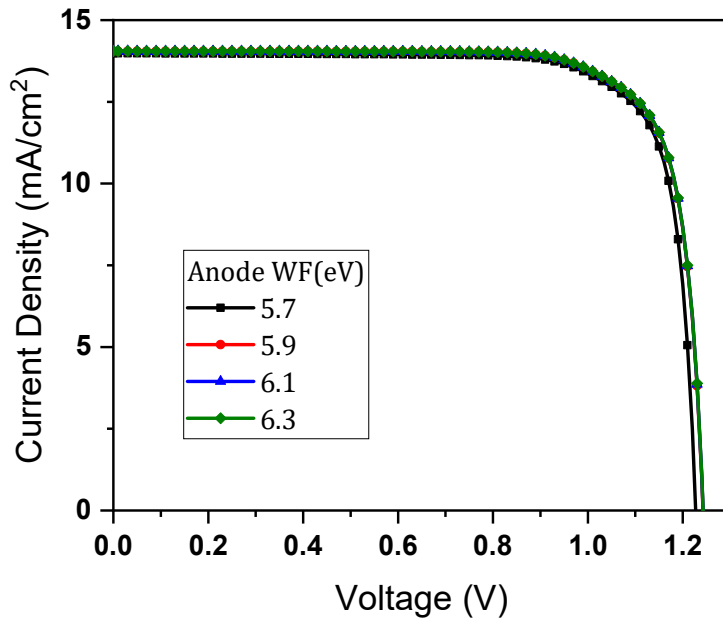
الجدول 9.3: وسائط الخروج الكهربائية

عمل الإنتزاع للكاثود	$J_{sc} (mA/cm^2)$	$V_{oc} (V)$	$FF\%$	$PCE \%$
3.6	14.05	1.242	79.414	13.865
3.8	14.05	1.242	79.414	13.865
4	14.05	1.242	79.414	13.865
4.2	14.05	1.242	79.414	13.865

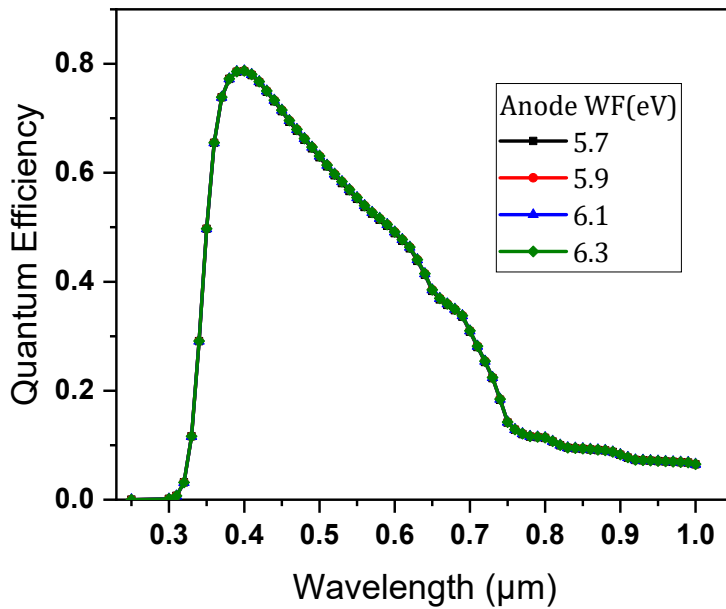
من خلال الجدول 9.3 والشكلين 17.3 و 18.3 نلاحظ أن جميع وسائط الخروج الكهربائية ثابتة رغم زيادة عمل الإنتزاع للكاثود حيث بقي مردود الخلية ثابتا في **13.86%** بالعودة لمخطط الطاقة في التوازن (الشكل 12.3) نلاحظ إنحطاط نصف الناقل على مستوى السطح ITO/TiO_2 وغياب أي حاجز كموني أمام الإلكترونات وهو مايفسر عدم تأثر وسائط الخروج للخلية بتغير عمل الإنتزاع للكاثود ضمن مجاله المعهود.

4.4.3 تأثير عمل الإنتزاع للأنود:

نغير عمل الإنتزاع للأنود (البلاتينيوم) ضمن المجال التجريبي لقيمه من $5.7 eV$ إلى $6.3 eV$.



الشكل 19.3: منحنيات الخاصية تيار-جهد



الشكل 20.3: منحنيات المردود الكوانتي

الجدول 10.3: وسائط الخروج الكهربائية

عمل الإنتزاع للأنود	$J_{sc} (mA/cm^2)$	$V_{oc} (V)$	$FF\%$	$PCE \%$
5.7	13.985	1.227	79.61	13.66
5.9	14.051	1.2425	79.41	13.86
6.1	14.051	1.2427	79.42	13.87
6.3	14.051	1.2428	79.43	13.87

من خلال الجدول 10.3 والشكلين 19.3 - 20.3 و مع تثبيت عمل الانتزاع للكاثود في القيمة 4.0eV نلاحظ أن جميع وسائط الخروج الكهربائية (بخلاف معامل الإمتلاء) تزداد بشكل طفيف بزيادة عمل الإنتزاع للأنود حيث تحسنت قيمة المردود من 13.66% إلى 13.87% . التناقص الطفيف في معامل الإمتلاء يعود إلى عدم زيادة المردود بنفس قيمة زيادة الجداء $V_{oc} \cdot J_{sc}$.

5.3 الخلاصة

قمنا في هذا الفصل بإستخدام برنامج سلفاكو-أطلس لمحاكاة نمط إشتغال خلية شمسية متحسسة بنقاط كمية . المواد التي إعتدنا عليها كنقاط كمية هي $CdTe$ و $CIGS$ بنسب مختلفة من الغاليوم. تبين أن CGS كمادة نقاط كمية أعطت أحسن مردود تحويل (9.58%). أيضا قيم مردود التحويل التي تحصلنا عليها لمختلف مواد النقاط الكمية هي ضمن المجال التجريبي ($8 - 1\%$) و الإختلاف يعود إلى عدم إعتبار العيوب خاصة تلك المتركرة في السطوح البينية بسبب عدم توفر معلومات كافية حول نوعيتها وكتافتها وكذلك محاكاة إشتغال محلول الإلكتروليت الذي إعتبرناه أنه أدى دوره بشكل مثالي.

الدراسة التحسينية للخلية بإعتبار *CGS* كمادة النقاط الكمية ، سمحت بالوصول للمردود **13.87%** وذلك من أجل سمك منطقة TiO_2 ، $0.2\mu m$ ، سمك منطقة النقاط الكمية 100 nm ، عملي الإنتزاع لكل من الكاتود و الأنود 4.0 eV ، 6.3 eV مع ملاحظة أن التأثير الغالب يعود لسمك منطقة النقاط الكمية ، أو ما يكافئه تجريبيا بمصطلح التحميل بالنقاط الكمية. سبق وأنه في الفصل الثاني أشرنا إلى أن أحسن مردود تحويل تم الوصول إليه **13.49 – 13.84%**، مع قيم تيار دارة قصيرة في حدود $20(mA/cm^2)$ ، جهد دارة مفتوحة 0.8 V و معامل إمتلاء 0.7 وذلك بإستعمال التصميم غلاف قلب (*ZCISe/ZnSe*) لمادة النقاط الكمية والتي تكون بحد ذاتها عبارة عن وصلة $P - N$ غير متجانسة. محاكاة هذا التصميم ، وكيفية أيضا تجسيد الإلكترولايت إضافة للعيوب يشكل هدفا شيقا لدراسة مستقبلية تحاكي آخر تصميمات هذا النوع من الخلايا الشمسية.

المراجع

[1] ATLAS User's Manuel, Device simulation software", SILVACO International, California. 2011.

[2]بحري نوال و بوطبة فوزية،دراسة خلية شمسية p-n بوصلة غير متجانسة مذكرة الماستر،جامعة محمد خيضر بسكرة

(الجزائر) ،، 2019-2020

[3]:R. Islam, K. N. Nazif, and K. C. Saraswat, "Si heterojunction solar cells: A simulation study of the design issues," IEEE Transactions on Electron Devices, vol. 63, pp. 4788-4795, 2016.

[4]:Anusit Kaewprajaka, Pisist Kumnorkaew, Takashi Sagawa, "Improved photovoltaic performance and device stability of planarheterojunction perovskite solar cells using TiO_2 and TiO_2 mixed with $AgInS_2$ quantum dots as dual electron transport layers", Organic Electronics 69 (2019) 26–33

- [5]: Yunfei Chen, Xuehai Tan, Shou Peng, Cao Xin, Alan E. Delahoy, Ken K. Chin, And Chuanjun Zhang, "The Influence of Conduction Band Offset on CdTe Solar Cells", Journal Of Electronic Materials Doi: 10.1007/S11664-017-5850-9.
- [6] Md. Asaduzzaman, Mehedi Hasan and Ali Newaz Bahar, An investigation into the effects of band gap and doping concentration on Cu(In,Ga)Se₂ solar cell efficiency, SpringerPlus (2016) 5:578.
- [7] Bowen Fu, Chong Deng, and Lin Yang, "Efficiency Enhancement of Solid-State CuInS₂ Quantum Dot-Sensitized Solar Cells by Improving the Charge Recombination", Nanoscale Research Letters (2019) 14:198 <https://doi.org/10.1186/s11671-019-2998-7>.
- [8] Ya-Han Chiang, Kuan-Yu Lin, Yu-Hsuan Chen, Keiko Waki, Mulu Alemayehu Abate, Jyh-Chiang Jiang, Jia-Yaw Chang, "Aqueous solution-processed off-stoichiometric Cu-In-S and their application in quantum dots-sensitized solar cell", J. Mater. Chem. A, 2018, DOI:10.1039/C8TA01064A.
- [9] P. Ilaiyaraja, Benadict Rakesh, Tapan Kumar Das, Pavana S.V. Mocherla, C. Sudakar, "CuInS₂ quantum dot sensitized solar cells with high VOC \approx 0.9 V achieved using microsphere-nanoparticulate TiO₂ composite photoanode", Solar Energy Materials and Solar Cells 178 (2018) 208–222.

الخلاصة العامة

الطاقة الشمسية هي المورد الواعد للطاقة المتجددة نظراً لإمدادها الذي لا ينضب وطبيعتها الصديقة للبيئة و من بين المركبات التي تستفيد منها تتفرد ميزة الخلايا الشمسية في تحويل الطاقة الشمسية مباشرة إلى طاقة كهربائية اعتماداً على التأثير الكهروضوئي ويمكن استخدامها في كل مكان دون الحاجة إلى مرافق كبيرة، كما يمكن صناعتها بشكل كبير لإنتاج طاقة ضخمة.

تصنف الخلايا الشمسية القائمة على النقاط الكمية في الجيل الثالث للخلايا الشمسية وتتميز عند مقارنتها مع الصبغية أنها تستبدل الأصباغ محدودة الإمتصاص بمواد صلبة قابلة لتعديل نطاقها الطاقى بما يلائم الطيف الشمسي الأعظمي.

في هذا العمل قمنا بدراسة خلية شمسية متحسسة بالنقاط الكمية بإستعمال برنامج المحاكاة سلفاكو-أطلس حيث إشتملت المذكرة على ثلاث فصول إضافة لمقدمة و خلاصة عامة. في الفصل الأول قدمنا نبذة عن مختلف أجيال الخلايا الشمسية ، مبدأ عمل الخلية الشمسية بشكل عام وكذا وسائط الخروج الكهربائية التي تستعمل في التشخيص. في الفصل الثاني عرضنا أهم مميزات والمواد المستعملة في الخلايا الشمسية المتحسسة بالنقاط الكمية (QDSC). في الفصل الثالث عرضنا برنامج المحاكاة سلفاكو-أطلس وأيضاً نتائج المحاكاة.

المواد التي إعتدنا عليها كنقاط كمية هي $CdTe$ و $CIGS$ بنسب مختلفة من الغاليوم. تبين أن CGS كمادة نقاط كمية أعطت أحسن مردود تحويل (9.58%). قيم مردود التحويل التي تحصلنا عليها لمختلف مواد النقاط الكمية هي ضمن المجال التجريبي (1-8%) و الإختلاف يعود إلى عدم إعتبار العيوب

خاصة تلك المتركزة في السطوح البينية بسبب عدم توفر معلومات كافية حول نوعيتها وكثافتها وكذلك محاكاة طبقة محلول الإلكتروليت الذي إعتبرناه أنه أدى دوره بشكل مثالي.

الدراسة التحسينية للخلية بأعتبر CGS كمادة النقاط الكمية تمت بتغيير كل من سمك المنطقة الناقلة للإلكترونات، سمك منطقة النقاط الكمية وعملي الإنتزاع لكل من الكاتود و الأنود. سمحت الدراسة التحسينية بالوصول للمردود **13.87%** و باقي الوسائط : $V_{oc}=1.243V, J_{sc} = 14.051(mA/cm^2)$ ، **FF=79.43%** ، وذلك من أجل سمك منطقة TiO2 ، $0.2\mu m$ ، سمك منطقة النقاط الكمية 100 nm ، عملي الإنتزاع لكل من الكاتود و الأنود 4.0 eV ، 6.3 eV مع ملاحظة أن التأثير الغالب يعود لسمك منطقة النقاط الكمية ، أو ما يكافئه تجريبا بمصطلح التحميل بالنقاط الكمية. تجريبا أحسن مردود تحويل تم الوصول إليه بحدود **13.49-13.84%** ، مع قيم تيار دارة قصيرة في حدود 20 mA/cm^2 ، جهد دارة مفتوحة 0.8 V و معامل إمتلاء 0.7 وذلك بإستعمال التصميم غلاف قلب لمادة النقاط الكمية (ZCISE/ZnSe) والتي تكون بحد ذاتها عبارة عن وصلة P-N غير متجانسة. محاكاة هذا التصميم ، وكيفية أيضا تجسيد الإلكتروليت إضافة للعيوب بشكل هدفا شيقا لدراسة مستقبلية تحاكي آخر تصميمات هذا النوع من الخلايا الشمسية.

الملخص

في عملنا هذا قمنا بمحاكاة خلية شمسية محسنة بنقاط كمييه (QDSCs) والتي أصبحت بديلا واعدة للخلايا الشمسية التقليدية بفضل مميزات الفريدة التي تجسدت في انخفاض تكلفتها وسهولة تصنيعها وقد استعملنا في هذا العمل برنامج سيففاكو - اطلس الذي يقوم بمحاكاة الخصائص الكهربائية المرتبطة بالبنية الفيزيائية المدروسة. تمت هذه الدراسة على خلية شمسية محسنة بنقاط كمييه من المواد CdTe و CIGS بنسب مختلفة للغاليوم و كانت نتائج المحاكاة لوسائط الخروج الكهربائية مقارنة للقيم التجريبية. تم الحصول على أعلى مردود لخلية CGS الذي بلغ 9.58%.

تمكنا من تحسين هذا المردود وذلك عن طريق التحسين في سمك الطبقة الناقلة للإلكترونات $ETL(TiO_2)$ ($0.2\mu m$) و سمك طبقة النقاط الكمية QDs ($0.1\mu m$) وعملي الانتزاع للكاثود ($4eV$) والآنود ($6.3eV$) في ظل هذه التحسينات التي قمنا بها تحصلنا على وسائط خروج جيدة وهي كالاتي: $V_{oc}=1.243V$, $FF=79.43\%$, $PCE=13.87\%$, $J_{sc} = 14.051(mA/cm^2)$.

الكلمات المفتاحية : الخلايا الشمسية، النقاط الكمية، سلفاكو-أطلس، محاكاة .

Abstract :

In this work, we simulated a quantum dot sensitized solar cell (QDSCs), which has become a promising alternative to traditional solar cells due to its benefit advantages like as a low cost and ease of manufacture.

We used the Silvaco-Atlas program, which simulates the electrical properties associated with the studied physical structures. This study was carried out on a solar cell sensitized with quantum dots of CdTe and CIGS (with different ratios of gallium) materials, and the simulation results for the electrical outputs were close to the experimental values. The highest conversion efficiency was obtained with CGS QDs cell which was 9.58%.

We were able to improve this efficiency by optimizing the thickness of the electron transport layer ($0.2\mu m$), the thickness of the quantum dot layer ($0.1\mu m$) and the workfunction of the cathode and the anode (4 and $6.3 eV$). Under these improvements, we have obtained good electrical outputs, which are as follows: $J_{sc} = 14.051(mA/cm^2)$, $V_{oc}=1.243V$, $FF=79.43\%$, $PCE=13.87\%$.

Keywords : Solar cell, Quantum dots, Silvaco-Atlas, Simulation.