

الجمهورية الجزائرية الديمقراطية الشعبية
وزارة التعليم العالي والبحث العلمي
جامعة محمد بوضياف - المسيلة



ميدان: علوم المادة
فرع: الفيزياء.
تخصص: الفيزياء الطاقوية و
الطاقات المتجددة

كلية: العلوم.
قسم: الفيزياء.
رقم: Ph/ENR/21/2021

مذكرة مقدمة لنيل شهادة الماستر أكاديمي

إعداد الطالبتين:

دربال سمية

جعيجع سلمى

تحت عنوان

دراسة أداء التناقص للمردود الطاقوي لخلية كهروضوئية

تمت المناقشة يوم: 27 / 06 / 2021 أمام اللجنة المكونة من:

رئيسا

جامعة المسيلة

بن حميدة محمد

مؤظرا

جامعة المسيلة

تركي زهير

ممتحنا

جامعة المسيلة

مقلالي عمر

السنة الجامعية: 2021/2020

شكر و تقدير

بسم الله الرحمن الرحيم

قال الله تعالى : « وإذ تأذن ربكم لئن شكرتم لأزيدنكم »

سورة ابراهيم - 7-

و عملا بقوله صلى الله عليه وسلم « من لم يشكر الناس لم يشكر الله »

رواه أحمد و الترمذي

بادئ الشكر لله جل جلاله وعظم سلطانه و نشكره على نعمه علينا والتي لا يعدها لسان ، ولا يقوم بحق شكرها إنسان ، و نحمده على توفيقه و إيمانه لنا لإنجاز هذا العمل المتواضع .
نتقدم بالشكر و العرفان بالجميل إلى كل من ساعدنا و أسهم في تكويننا طيلة مشوارنا الدراسي .

و نتقدم بجزيل الشكر للأستاذين " تركي زهير " و " بعبي نجيب " اللذان تكرما بأشرفهما علينا فكانا خير مرشد في هذا العمل .



الفهرس:

1..... مقدمة عامة

الفصل الأول: عموميات

- 3..... تمهيد
- 3..... 1.I. الخلايا الكهروضوئية:
- 3..... 1.1.I. نبذة تاريخية
- 4..... 2.1.I. بنية الخلية الكهروضوئية
- 5..... 3.1.I. مبدأ عمل السيليكون في الخلية الكهروضوئية
- 8..... 4.1.I. الفعل الكهروضوئي
- 10..... 5.1.I. الخصائص الكهربائية للخلية الكهروضوئية
- 10..... 1.5.1.I. الأشعة الشمسية الساقطة
- 10..... 2.5.1.I. التيار وفرق الجهد المطلوب للحمل
- 11..... 3.5.1.I. القدرة الكهربائية القصوى MPP
- 11..... 4.5.1.I. القدرة الكهربائية النظرية P_{opt}
- 12..... 5.5.1.I. عامل التعبئة FF لخلية الكهروضوئية
- 13..... 6.5.1.I. مردود التحويل η
- 14..... 6.1.I. العوامل المؤثرة على مردود الخلية الشمسية
- 14..... 1.6.1.I. عوامل خارجية
- 15..... 2.6.1.I. العوامل الذاتية
- 15..... 2.I. أنواع الخلايا الكهروضوئية:
- 15..... 1.2.I. الخلايا السيليكونية
- 15..... 1.1.2.I. الخلايا السيليكونية أحادية البلورة
- 16..... 2.1.2.I. الخلايا السيليكونية الشريطية
- 17..... 3.1.2.I. الخلايا السيليكونية متعددة البلورية
- 17..... 2.2.I. الخلايا ذات الأغشية الرقيقة
- 17..... 1.2.2.I. خلايا السيليكونية العشوائية
- 19..... 2.2.2.I. خلايا الغاليوم أرسنايد GaAs

19.....	3.2.2.I	خلايا الكوبرانديوم ديسلنايد CIS
19.....	4.1.2.I	خلايا الكادميوم تيلورايد CdTe
20.....	3.I	الألواح الشمسية
20.....	1.3.I	مفهوم الألواح الشمسية
21.....	2.3.I	تجميع الخلايا
21.....	1.2.3.I	تجميع الخلايا على التسلسل
22.....	2.2.3.I	تجميع الخلايا على التوازي
24.....	3.2.3.I	تجميع الخلايا على التسلسل والتوازي في وقت واحد

الفصل الثاني: نظرية الكثافة الوظيفية DFT

25.....		تمهيد :
25.....	1.II	معادلة شرودينغر
26.....	2.II	تقريب بورن_اوبرهايمر (Born-Oppenheimer)
27.....	3.II	تقريب هارترى - فوك (Hartry-Fock)
27.....	1.3.II	تقريب هارترى (Hartry)
28.....	2.3.II	تقريب فوك (Fock)
28.....	4.II	تعريف
28.....	1.4.II	الدالة الوظيفية
29.....	2.4.II	الكثافة الالكترونية
29.....	3.4.II	الكثافة الالكترونية لزوج من الالكترونات
29.....	5.II	نظرية الكثافة الوظيفية
29.....	1.5.II	تعريف
30.....	2.5.II	دالة الكثافة الوظيفية: DFT Functional
30.....	1.2.5.II	نظرية توماس فيرمي (Thomas Fermi)
31.....	2.2.5.II	نظرية هوهنبرغ - كوهن (HK)
32.....	3.2.5.II	نظرية كون - شام
34.....	4.2.5.II	دالة الارتباط التبادلي
35.....	5.2.5.II	تقريب الكثافة المحلية LDA

35.....	6.2.5.II. تقريب التدرج المعمم GGA
35.....	3.5.II. حدود دالة الكثافة الوظيفية.
36.....	6.II. برنامج المحاكاة VASP
36.....	1.6.II. تعريف برنامج VASP
37.....	2.6.II. إعداد حساب VASP
40.....	3.6.II. أهم العمليات التي يقوم بها VASP
40.....	4.6.II. طريقة الموجة المعززة لجهاز العرض PAW
41.....	1.4.6.II. الكمون الزائف pseudo potencial
44.....	2.4.6.II. تعريف طريقة PAW
44.....	3.4.6.II. مدارات PAW
46.....	4.4.6.II. الطاقة الحركية.
47.....	5.4.6.II. المؤثرات المحلية.
47.....	6.4.6.II. طاقة هارترى The Hartry energy
48.....	7.4.6.II. طاقة PAW الكلية
49.....	7.II. الخصائص الضوئية

الفصل الثالث: النتائج والمناقشة

52.....	تمهيد
52.....	1.III. البنية البلورية
53.....	2.III. التوزيع الالكتروني للسليكون
53.....	3.III. الخصائص الالكترونية لبلورة السليكون
55.....	1.3.III. بنية عصابة الطاقة الالكترونية لبلورة السليكون
57.....	2.3.III. كثافة الحالات لبلورة السليكون
	1.4.III. تغير ثابت العزل الكهربائي بدلالة طاقة الموجة الضوئية الممتصة لذرة
58.....	السليكون
59.....	4. III. الخصائص الضوئية لبلورة السليكون
60.....	1.4.III. الجزء التخيلي لثابت العزل الكهربائي لبلورة السليكون
61.....	1.4.III. الجزء الحقيقي لثابت العزل الكهربائي لبلورة السليكون

62.....	III. 5. خلاصة
63.....	الخلاصة العامة
65.....	المراجع
.....	الملخص

يمر العالم في عصرنا الحالي بما نسميه بالتقدم التكنولوجي في العديد من المجالات، حيث استطاع الإنسان تطوير أساليب وطرق متنوعة للحصول على أنواع مختلفة من الطاقات التي لا تتضب، فلجأ إلى الطاقات المتجددة وهي الأكثر إفادة من الناحية الاقتصادية والاجتماعية وكذا البيئية، فهي تقلل من التأثير السلبي الناتج عن استخدام الطاقات غير المتجددة كالبترول والغاز الطبيعي، والذي يتسبب في التلوث البيئي وكذا الأضرار التي تفتك بالكائنات الحية والعديد من المشاكل البيئية كتوسع طبقة الأوزون وانتشار غاز ثنائي أكسيد الكربون وغيرها.....

من بين هذه الطاقات المتجددة الأكثر أهمية هي الطاقة الشمسية، حيث أضحت في عصرنا الحالي دخلاً قومياً للكثير من الدول من بينها دول الخليج العربي رغم غناها بالنفط فإنها تعتمد على الطاقة الشمسية بشكل رئيسي وفعال.

يتم استخدام الطاقة الشمسية في العديد من المجالات كالأقمار الصناعية ومحطات الفضاء ونظم التسخين والتبريد خلال التصميمات المعمارية، والاتصالات في المناطق النائية التي يصعب تغذيتها بالمصادر الكهربائية التقليدية. كما أصبحت تلعب دوراً أساسياً في تصنيع العديد من الأجهزة الإلكترونية كالساعات والآلات الحاسبة والثلاجات وغيرها وذلك عن طريق تحويلها إلى طاقة كهربائية بواسطة أنظمة تدعى الخلايا الكهروضوئية.

ولأن مردود الخلايا الكهروضوئية متعلق بالكثير من العوامل منها ما هو بيئي بحت ومنها ما هو ذاتي متعلق بمادة الصنع وخصائصها فان تناقص هذا المردود انطلاقاً من أول استعمال للخلايا الكهروضوئية الى غاية زمن متقدم وهذا ماثبتته دراسات تجريبية ميدانية سابقة، أو من خلال البيانات المتعلقة بقيمة المردود والمجال الزمني لاستمرار هذه القيمة والممنوحة من طرف المصنع والحقيقة الفعلية المثبتة من خلال دراسات تجريبية والتي تفر عكس ذلك بمعنى تناقص المردود في مجالات زمنية ضيقة.

وفي هذا الإطار قمنا بدراسة احد العوامل الذاتية المتعلقة بالمادة المكونة للخلية الكهروضوئية ومدى تاثيرها على مردود الخلية الكهروضوئية باستعمال برنامج محاكاة يعتمد على DFT

وللإجابة على الإشكال المطروح تضمنت هذه الدراسة ثلاث فصول كالآتي:

الفصل الأول يدرس عموميات حول مفهوم الخلية الكهروضوئية ومكوناتها والخصائص المميزة لها، وأهم العوامل التي تدخل في تحديد مردود الخلايا الكهروضوئية .

والفصل الثاني يتناول التطبيقات والبرمجيات التي تمكننا من المعرفة الدقيقة لبنية الجسم الصلب بعيدا عن استخدام الوسائل التجريبية أو الخوض في بعض التجارب المعقدة، والتذكير بالنظرية دالة الكثافة *DFT* وبعض التقريبات كتقريب هارترى- فوك و... والتعريف ببرنامج *VASP* الذي تمت بواسطته محاكاة الإشكال المطروح.

أما في **الفصل الثالث** تطرقنا إلى تحليل وتفسير النتائج النظرية واستنتاج مختلف الخصائص الالكترونية والضوئية لبلورة السيليكون، والخلاصة إلى العلاقة المباشرة لأحد العوامل الذاتية للخلية الكهروضوئية والمتمثل في معامل الامتصاص بمردود الخلية.



الفصل الأول
عموميات

تمهيد :

تستخدم عدة طرق اليوم لاستغلال طاقة الشمس وتحويلها الى طاقة كهربائية لتلبية حاجيات الانسان المختلفة منها الخلايا الكهروضوئية، محركات حرارية أو باستخدام معدات لتجميع أشعة الشمس وغيرها... سنتطرق في هذا الفصل الى دراسة الخلايا الكهروضوئية التي تقوم بالتحويل المباشر للأشعة الشمسية إلى كهرباء، وذلك من خلال التعرف على بنيتها، طريقة عملها وأنواعها.

1.1. الخلايا الكهروضوئية (Photovoltaic Cells):**1.1.1. نبذة تاريخية:**

كلمة فوتوفولتيك (Photovoltaic) هو اسم مشتق من طبيعة عمل الخلية، فكلمة فوتو(photo) تعني ضوء وفولتيك (voltaic) تعني كهرباء، وهذا يعني التحويل المباشر لأشعة الشمس إلى كهرباء [1].

➤ تعود فكرة الخلايا الشمسية إلى عام 1839، عندما اكتشف العالم الفرنسي ألكسندر إدموند بيكريل (Becquerel) أنه في حال تعرض قطب كهربائي للضوء ومغموس في محلول موصل ينتج تيار كهربائي [2].

➤ ثم في عام 1877 أدخل العالمان ادم وسميث (Adams & Smith) لأول مرة مفهوم الناقلية الكهربائية الضوئية.

➤ تم تركيب عام 1883 أول خلية شمسية وظيفية مصنوعة من مادة السيلينيوم والذهب من قبل تشارلز فريتز (Charles Fritts)، من جهة أخرى ساهم تطور نظريات ميكانيكا الكم من تفسير العديد من الظواهر الفيزيائية وخاصة المرتبطة بالكهرباء الضوئية [3] من بينها ظاهرة الحساسية الضوئية لمواد السيليكون، أكسيد النحاس، كبريت الرصاص وكبريت التاليوم.

➤ تمكن المخترع الأمريكي روسل أوهلفي عام 1941 من انتاج أول خلية شمسية مصنوعة من السيليكون بكفاءة لا تتجاوز 1%.

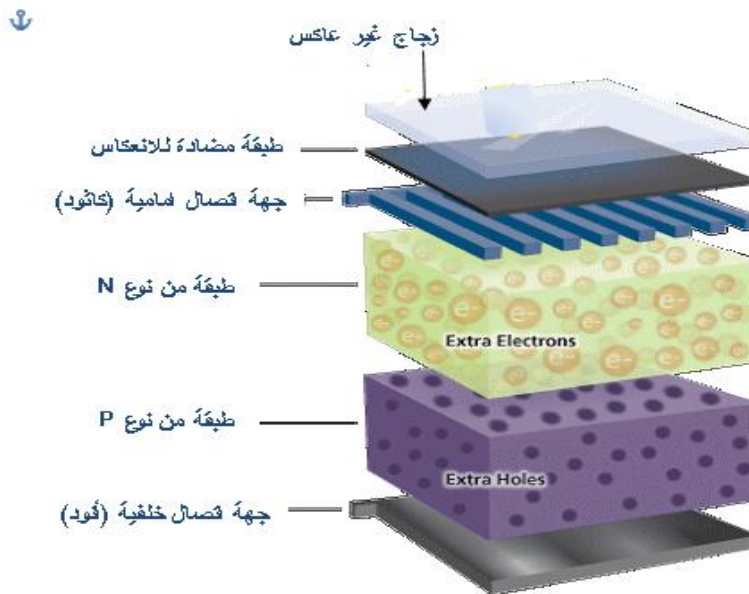
➤ ثم أتبع ذلك تصنيع بطارية شمسية من قبل مختبرات بل الأمريكية (Bell Lab) عام 1954 بكفاءة بلغت 6% استخدمت آنذاك في التطبيقات الفضائية [4]. كما تم في نفس الفترة تركيب أول خلية شمسية من مواد كبريت الكاديوم وكبريت النحاس وأطلق عليها (Thin Film Solar)، وازداد بعدها التسارع نحو تطوير الخلايا الكهروضوئية وتقنياتها لتحسين كفاءتها وخفض كلفتها.

2.1.1. بنية الخلية الكهروضوئية:

الخلية الكهروضوئية عبارة عن وصلة ثنائية من أشباه النواقل والمسماة بالديود (diode)، يعتمد مبدأ عملها على ظاهرة فيزيائية تسمى التأثير الكهروضوئي، بحيث لها القدرة على امتصاص الضوء وتحويل جزء منه إلى حوامل التيار الكهربائي (ثقوب و الكترونات). الجهد المتولد قد يختلف بين 0.3V و 0.7V اعتمادًا على المواد المستخدمة وترتيبها بالإضافة إلى درجة حرارة [5] وقدم الخلية.

تتكون الخلايا الكهروضوئية من المكونات التالية وحسب الترتيب الآتي كما هو موضح

في الشكل (1.I):



الشكل (1.I): الهيكل الأساسي لخلية شمسية.

- طبقة من الزجاج غير العاكس للأشعة الشمسية.
- طبقة مضادة للانعكاس تسمح بأقصى اختراق للأشعة شمسية.
- طبقة من الأسلاك النحاسية الموصلة للكهرباء وتسمى بالكاثود.
- طبقة من بلورات السيلكون سالبة الشحنة مضاف إليها عنصر الفسفور.
- طبقة من بلورات السيلكون موجبة الشحنة مليئة بالثقوب مضاف إليها عنصر البورون.
- طبقة من الأسلاك النحاسية الموصلة للكهرباء وتسمى بالأنود .

3.1.I. مبدأ عمل السيلكون في الخلية الكهروضوئية:

تصنع الخلايا الشمسية من مواد شبه موصلة وهي عناصر رباعية التكافؤ (تحتوي طبقتها الخارجية على 4 إلكترونات) مثل السيلكون Si_{14} والجرمانيوم Ge_{32} ، ترتبط ذراتها فيما بينها بروابط تساهمية تكون:

← عازلة تماما في درجة الصفر المطلق [6].

← وتزداد درجة توصيلها إما ب: - ارتفاع درجة حرارتها.

- تسليط فرق جهد كهربائي عليها.

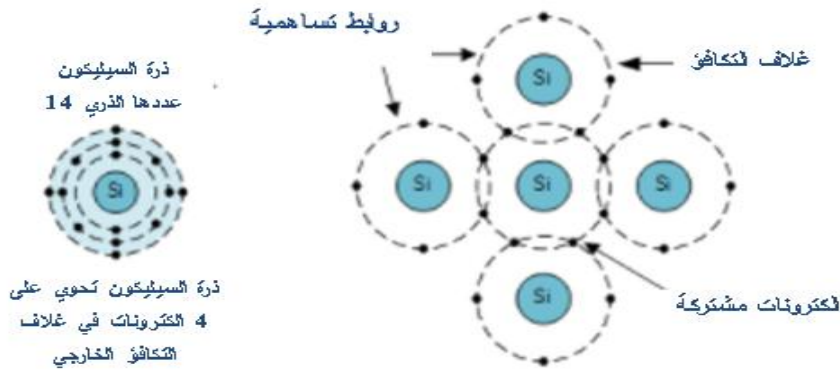
- تعرضها لإشعاع بطاقة كافية [4].

• تنقسم أشباه الموصلات إلى نوعين:

أ- مواد شبه ناقلة ذاتية :

إن لهذه المواد ترتيبا بلوريا خاصا، إذ تترتب ذراتها وفق نظام هندسي منظم، فمثلا السليكون يحتوي على 14 إلكترون؛ 10 منها موزعة في المستوى الأول والثاني بصورة مشبعة، و4 منها تكون في الغلاف الخارجي فترتبط بالإلكترونات ذرات السيلكون المجاورة على شكل تركيب بلوري (شبكة) لا تحوي على إلكترونات حرة.

إن المواد شبه ناقلة الذاتية غير قادرة على توصيل التيار الكهربائي بكفاءة لعدم احتوائها على إلكترون حر لهذا توجب إجراء تعديل في سيلكون الخلية الشمسية والمتمثل في التطعيم لانتاج النوع الثاني من المواد شبه ناقلة والمسماة بالغير ذاتية.



الشكل (2.I): هيكل المواد شبه ناقلية الذاتية

ب - مواد شبه ناقلية غير ذاتية :

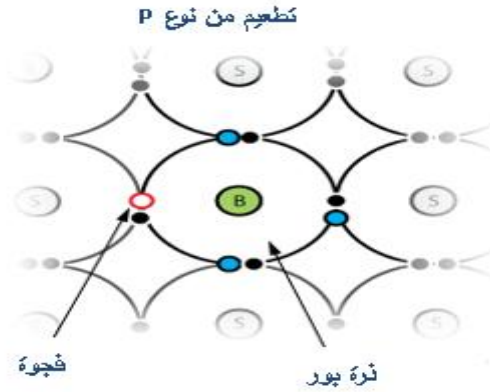
من أجل تحسين عملية التوصيل الكهربائي ليكون بمقدار ملبي للأغراض العملية، يقوم المصنعون بإضافة نسبة من الشوائب والتي تحتوي على عدد من الإلكترونات المحيطة أقل أو أكبر من 4 إلكترونات لأشباه النواقل (السيليكون). وبالتالي تنقسم هذه المواد إلى قسمين موضح في المخطط التالي [7]:



➤ تطعيم من نوع P :

يتم ارتباط ذرات السيليكون بذرات المادة غير الذاتية ثلاثية التكافؤ (البور B مثلا) بروابط تساهمية ويصبح دائما الكترولون مفقود لتكملة الرابطة في التركيب البلوري للسيليكون، هذا الالكترولون يتم اقتراضه من الذرات المجاورة وبالتالي يتغير موقع الالكترولون المفقود، هذا

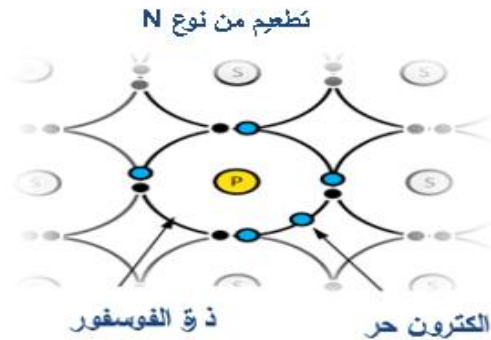
الآخر نعتبره فجوة Hole بشحنة موجبة متحركة ومنتقلة وبهذا تسمى هذه المنطقة الموجبة بالمنطقة P (positive). ويوجد عدد كبير جدا من الفجوات في هذه المنطقة وبهذا تسمى الإلكترونات فيها بحاملات الشحنة الأقلية بينما الفجوات بحاملات الشحنة الأغلبية.



الشكل (3.1): تطعيم السيليكون بذرات البور

➤ تطعيم من نوع N:

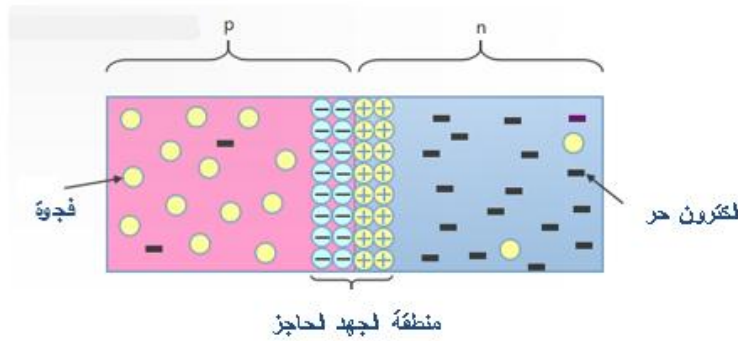
يتم إضافة مواد غير ذاتية بذرات خماسية التكافؤ (الفسفور P_{15} مثلا) إلى السيليكون، فتشارك 4 إلكترونات منها في التركيب البلوري للسيليكون ويكون الإلكترون الخامس فائضا حر الحركة، وبالتالي يوجد في هذه المنطقة من البلورة عدد كبير من الشحنات الحرة السالبة وبهذا تسمى هذه المنطقة السالبة بالمنطقة N (Negative) وتكون فيها الإلكترونات هي حاملات الشحنة.



الشكل (4.1): تطعيم السيليكون بذرات الفوسفور

➤ الوصلة الثنائية PN:

عندما يتم الوصل بين المنطقتين، بعض إلكترونات أشباه النواقل ينتقل من المنطقة N إلى المنطقة P فيولد أيونات موجبة في المنطقة N بينما فجوات أشباه النواقل تتحرك في نفس الوقت في الاتجاه المعاكس فتولد أيونات سالبة في المنطقة P على جانبي الملتقى وبذلك يتكون فرق جهد كهربائي يسمى بالحاجز الجهدي Potential Barrier على جانبي الملتقى مولدا مجالا كهربائيا معاكسا لحركة نواقل الشحنة ويزداد هذا المجال حتى يصبح كافيا لايقاف هذا الانتقال فيحصل التوازن. يعمل هذا المجال عمل الديود حيث يسمح بمرور الإلكترونات من الجزء الموجب الى الجزء السالب والعكس غير صحيح. يكون فرق الجهد غالبا في هذه الحالة يساوي 0,7V للسيليكون عند درجة الحرارة الاعتيادية، ويتغير بتغير درجة الحرارة ونسبة الشوائب المضافة.

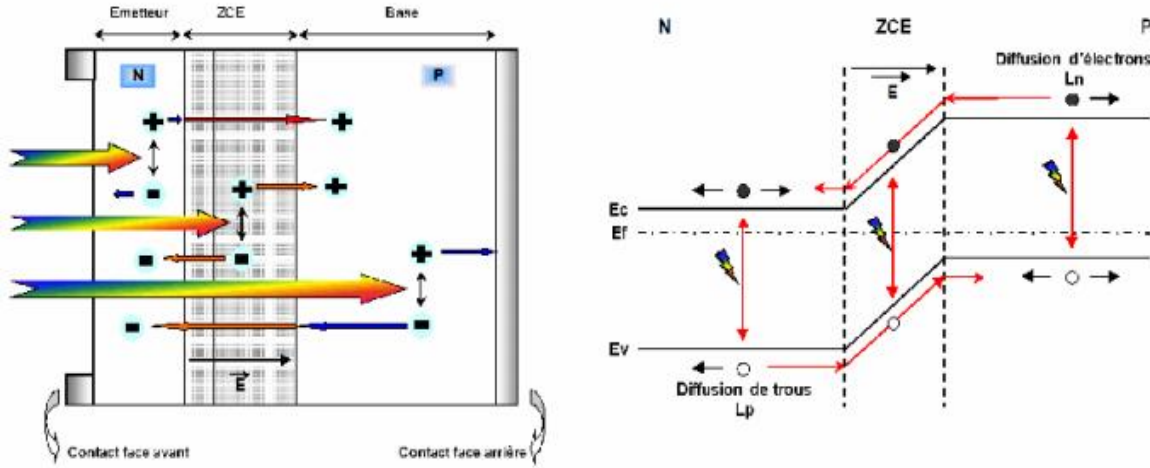


الشكل (5.I): الجهد الحاجز في الوصلة الثنائية [8]

4.1.I. الفعل الكهروضوئي:

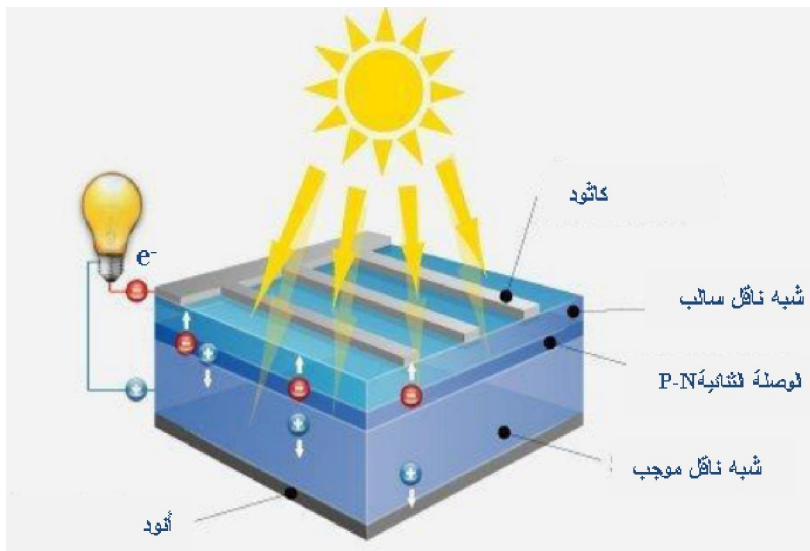
عند تهيج الإلكترونات في منطقة الاتصال بواسطة فوتونات الإشعاع الشمسي، يكسبها طاقة تسمح لها بالانتقال إلى منطقة التوصيل (Conduction Band) تاركة وراءها ثقباً في منطقة التكافؤ (Valance Band) وبذلك ستتولد حوامل من الشحنة المزدوجة (إلكترون وثقب)، وتحت تأثير المجال الكهربائي المعاكس تنتج الإلكترونات نحو جهة N وتنتج الثقب نحو جهة P. يمكن تصوير العملية كمستويات طاقة في المادة [9] كما يوضحه الشكل (6.I)، حيث تدخل الإلكترونات المثيجة بواسطة الفوتونات منطقة الاتصال، ويمكن تصورها

تندرج إلى الأسفل نحو جهة N تحت تأثير المجال الكهربائي، وكذا الثقوب حيث يتم تصورها في منطقة الإتصال وكأنها تطفو إلى جهة P تحت تأثير المجال الكهربائي.



الشكل (6.I): مخطط وهيكل توضيحي لخلية كهروضوئية تحت الإشعاع الشمسي [10]

وهذا السريان للإلكترونات هو ما يسمى بالتيار الكهربائي. إذا كانت الخلية موصولة بدارة فإن الإلكترونات الحرة تغادر الخلية نحو أحد الأسلاك وكذلك الثقوب ولكن في الإتجاه المعاكس، كما هو موضح في الشكل (7.I).



الشكل (7.I): آلية عمل الخلية كهروضوئية [7]

5.1.I. الخصائص الكهربائية للخلية الكهروضوئية:

تختص الخلايا بعناصر مميزة تقيم أداء الخلية تحت ظروف قياسية مستخرجة من خصائص جهد-تيار وهي تعتمد على:

1.5.1.I. الأشعة الشمسية الساقطة:

يصل فرق الجهد المنتج من خلية شمسية مساحتها 100cm^2 إلى $0,5\text{V}$ وتيار يتراوح ما بين $A [2,5-3]$ في حالة الإشعاع الشمسي الأقصى. تعرف الخلية في هذه الحالة بالبطارية الشمسية.

2.5.1.I. التيار وفرق الجهد المطلوب للحمل:

في حالة اشعاع مقداره $1000\text{W}/\text{m}^2$ ودرجة حرارة $T = 25^\circ\text{C}$:

• تيار الدارة المستقصرة I_{sc} :

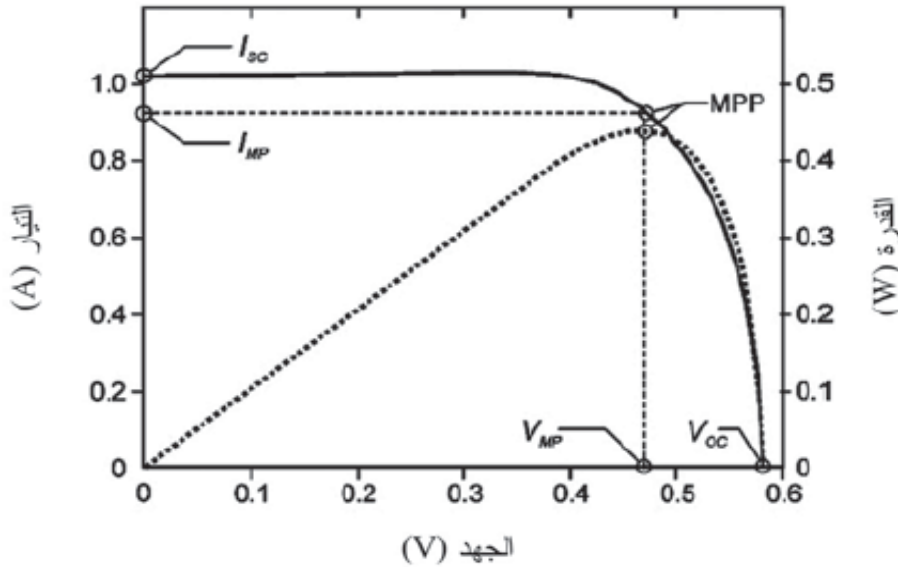
هو التيار الأعظمي المار عبر الخلية عند قصر الدارة ($V = 0$) [11] (أي مربوطة بمقاومة معدومة) هذا التيار يتناسب خطياً مع شدة إضاءة الخلية، ويعتمد على السطح المضيء، الطول الموجي للإشعاع، حركة الناقل ودرجة الحرارة.

• فرق جهد الدارة المفتوحة V_{co} :

هو فرق الجهد الذي تعطيه الخلية الكهروضوئية عندما لا تكون متصلة بأي حمل أو عند توصيلها بمقاومة لانتهائية أي التيار المار فيها يكون معدوماً.

❖ إذا قمنا بتغيير المقاومة بين الصفر ومالا نهاية فإن التيار وفرق الجهد سيتغيران حسب منحنى الخصائص الفولطية والتيار الموضح في الشكل (8.I)، كما يمكن استنتاج نقطة القدرة القصوى MPP.

3.5.1.I القدرة الكهربائية القصوى MPP:



الشكل (8.I): منحنى خصائص الجهد والتيار لخلية سيليكونية وكذا نقطة القدرة

العظمى MPP

أهم مفهوم ضمن تقنيات الطاقة الشمسية هو نقطة الاستطاعة العظمى، وهي اختصار للمصطلح (Maximum Power Point)، وتمثل النقطة التي تكون عندها الطاقة المتولدة من الخلية الكهروضوئية أكبر ما يمكن أي هي نقطة أعلى ارتفاع بين خط التيار وخط الجهد. [12]

I.1

$$P_{\max} = I_{mpp} \times V_{mpp}$$

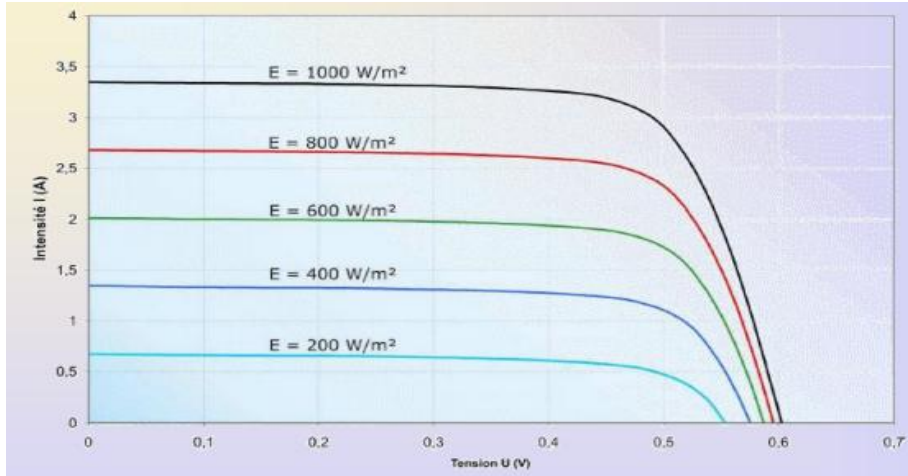
4.5.1.I القدرة الكهربائية النظرية P_{opt} :

هي حاصل ضرب تيار دائرة القصر وجهد الدائرة المفتوحة وتعطى بالعلاقة :

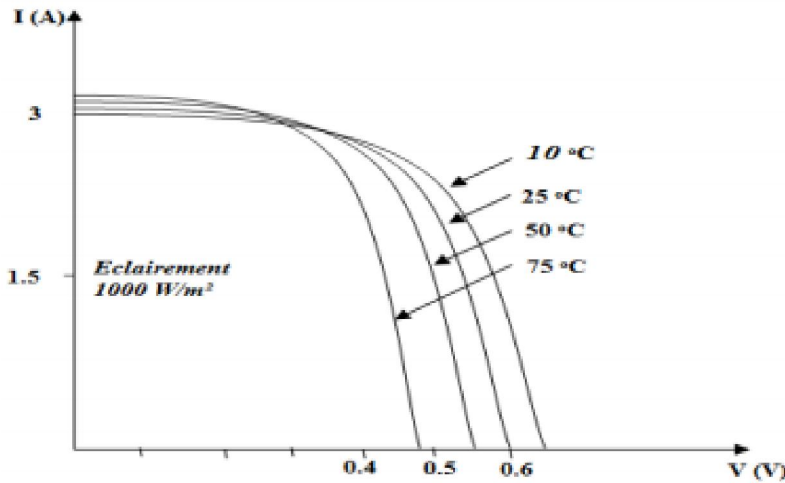
I.2

$$P_{opt} = I_{sc} \cdot V_{co}$$

إن تغير شدة الاشعاع الشمسي الساقط ودرجة حرارة الخلية الكهروضوئية يؤدي إلى تغيير نقطة القدرة العظمى MPP كما هو موضح في الشكلين (9.I) و (10.I).



الشكل (9.I): تأثير شدة الإشعاع الساقط على نقطة القدرة العظمى MPP



الشكل (10.I): تأثير درجة الحرارة على نقطة القدرة العظمى MPP [13]

5.5.1.1 عامل التعبئة FF للخلية الكهروضوئية: (Fill Factor)

يشير إلى المنطقة الفعالة من السيليكون القادرة على تحويل الفوتونات الساقطة إلى إلكترونات عن طريق التأثير الكهروضوئي. كما يعرف على أنه نسبة القدرة القصوى التي توفرها الخلية الكهروضوئية P_{max} والقدرة الكهربائية النظرية P_{opt} (حاصل جداء تيار الدارة القصيرة I_{sc} وجهد الدارة المفتوحة V_{co}).

I.3

$$FF = \frac{P_{max}}{I_{sc} \cdot V_{co}}$$

6.5.1.I.1. مردود التحويل η :

يشير مردود الخلايا الكهروضوئية إلى مردود التحويل إلى طاقة كهربائية، وهي النسبة بين القدرة القصوى التي توفرها الخلية P_{max} و شدة الإشعاع الساقط P_{in} .

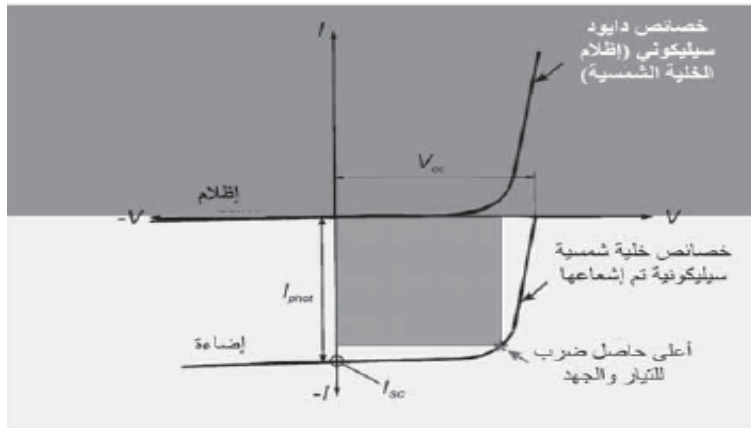
$$I.4 \quad \eta = \frac{P_{max}}{P_{in}} = \frac{FF \cdot I_{sc} \cdot V_{co}}{G \cdot S}$$

حيث: G كثافة تدفق الإشعاع الساقط على الخلية (W/m^2)

S مساحة الجزء الماص للإشعاع الشمسي (m^2) [14].

• خاصية الإظلام:

إن الخاصية المميزة للخلية الكهروضوئية من دون أي إشعاع ضوئي (خاصية الإظلام) التي تتوافق مع الخاصية المميزة للدايود كما هو موضح في الشكل (11.I).

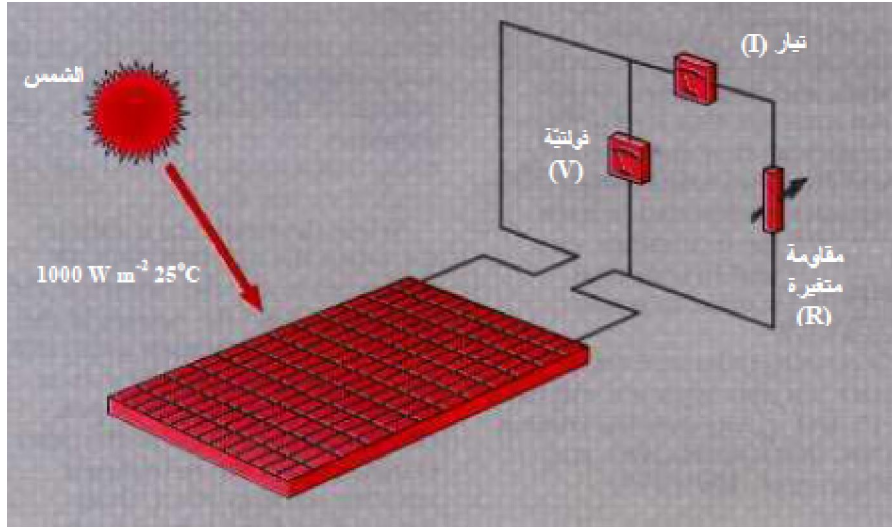


الشكل (11.I): خصائص التيار والجهد لدايود (خلية كهروضوئية) في الإظلام وتحت

إشعاع ضوئي

وعند سقوط الأشعة الشمسية على الخلية تتزحزح هذه الخاصية بمقدار التيار الضوئي I_{Photon} في الاتجاه المانع لمرور التيار (خاصية الإضاءة).

يتم إيجاد هذه الخاصية بتوصيل مقاومة حمل متغيرة إليها الشكل (12.I) والرسم بيانياً بين التيارات والجهود الكهربائية الناتجة لقيم مختلفة للأحمال. [15]



الشكل (12.I): تحويل الطاقة الكهروضوئية لخلية كهروضوئية، القدرة الكهربائية المتولدة يتم توصيلها الى مقاومة أومية متغيرة

6.1.I. العوامل المؤثرة على مردود الخلية الشمسية:

1.6.1.I. عوامل خارجية:

- الغبار: والذي يعتبر من أهم المشاكل التي تواجه الباحثين في مجال استخدام الطاقة الشمسية حيث بينت البحوث أن هناك أكثر من 50 بالمئة من فعالية الطاقة الشمسية تفقد في حالة عدم تنظيف الألواح الشمسية لمدة شهر، وبالتالي يجب استخدام طرق التنظيف المستمر على فترات لا تتجاوز ثلاثة أيام لكل فترة وتختلف هذه الطرق من بلد لآخر حسب نوع الغبار وطبيعة الطقس.
- تخزين الطاقة الشمسية والاستفادة منها أثناء الليل أو الايام الغائمة والمغبرة: حيث يعتمد هذا التخزين على كمية الحرارة ونوع وطريقة الاستخدام ويفضل الاستفادة من الطاقة الشمسية مباشرة حين وجودها فقط.
- حدوث التآكل والصدأ في المجمعات الشمسية بسبب المياه المستخدمة في دورات التسخين.
- بالإضافة الى عوامل أخرى مثل سرعة الهواء، العواصف والرياح والبرق التي قد تتلف الألواح الشمسية.

2.6.1.I. العوامل الذاتية:

- السيليكون معروف بأنه شبه موصل غير مباشر وهذا ما يجعل امتصاص الفوتون يعتمد على ظهور الفوتون (الاهتزاز الشبكي) حيث يحدث هذا نسبيا بشكل نادر وبالتالي فان معامل امتصاصه يكون منخفض نسبيا.
 - طاقة شريط الفجوة للسيليكون مقدارها 1.1eV : الفوتونات ذات الطاقة الأقل لا يتم امتصاصها إطلاقا بينما الفوتونات ذات الطاقة الأعلى تقوم بتحويل الفائض منها إلى فوتونات كاهتزازات شبكية أي على شكل حرارة، هذه العملية وبالإضافة إلى عمليات الفقد الأخرى تعرف ما يسمى بالحساسية الطيفية أو الاستجابة الطيفية للخلية الشمسية.
 - الجهد الكهربائي الأقصى (جهد الدائرة المفتوحة) V_{oc} يعتمد على فرق الجهد المعطى بواسطة الانتقال N-P ويبلغ مقداره 0.7V للسيليكون.
- كفاءة التحويل النظرية هذه تنخفض في الحقيقة بآليات فقد مختلفة تتضمن :
- عمليات الفقد الضوئية، مثل الفقد بالانعكاس والتظليل الناتجان من التلامسات الأمامية والفقد بالإشعاعية غير الممتصة (النافذة).
 - عمليات الفقد الأومية من المقاومات المتصلة على التوالي وعلى التوازي.
 - عمليات الفقد بإعادة الاتحاد (Recombination).

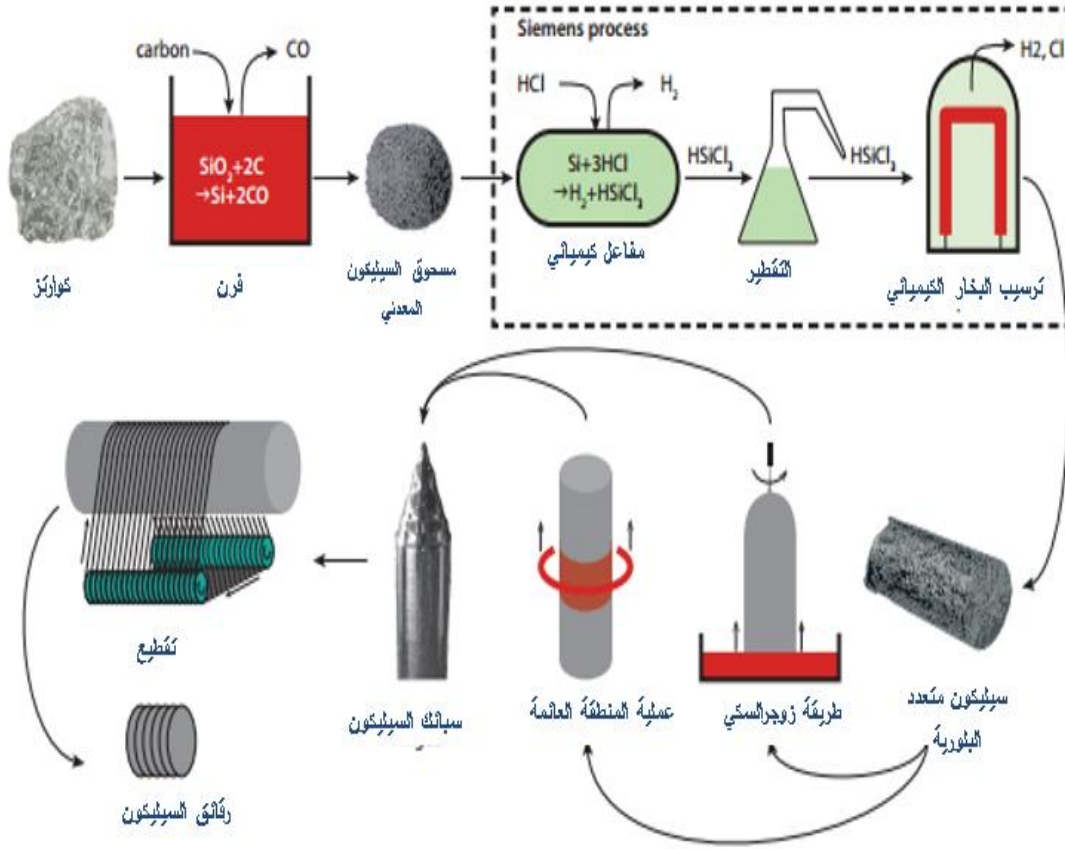
2.I. أنواع الخلايا الكهروضوئية:

1.2.I. الخلايا السيليكونية:

1.1.2.I. الخلايا السيليكونية أحادية البلورة:

معظم الخلايا الكهروضوئية المصنعة لغاية فترة قريبة كانت من سيليكون نقي ذو هيكل مستمر أحادي البلورية (single crystal) وبدون شوائب (Impurities)، والسيليكون أحادي البلورية يصنع عادة من حبوب صغيرة من البلور مسحوبة ببطء من كتلة مذابة من سيليكون متعدد البلورية بطريقة متقدمة ومكلفة تدعى بعملية زوجرالسكي (Czochralski Process). أغلب الخلايا السيليكونية الأحادية البلورية المتوفرة في الأسواق تتراوح عائدات التحويل التي تم

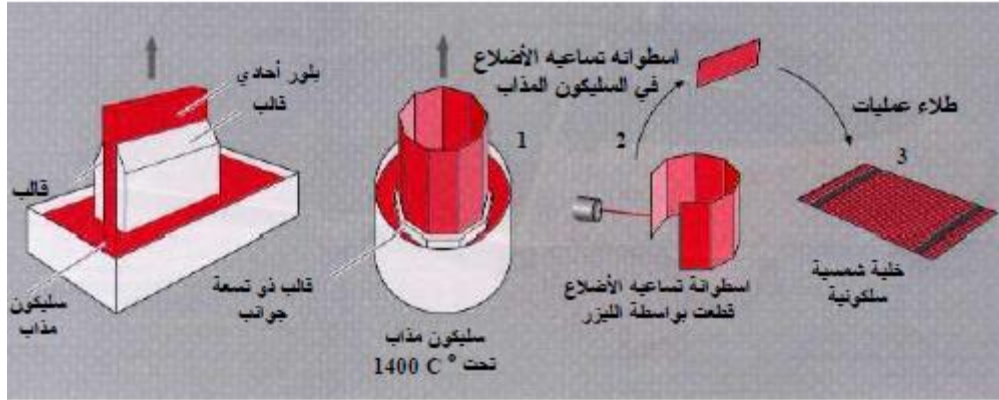
الحصول عليها (كفاءتها) بين 14 و 16% [16] ، كما أن سعرها مرتفع جدا لكونها مصنوعة من سليكون متعدد البلورية وعالي النقاوة.



الشكل (13.I): خطوات إنتاج خلية سليكونية أحادية البلورة واللوح الشمسي [17].

2.1.2.I. الخلايا السليكونية الشريطية:

يتم في هذه الطريقة إنتاج شريط من السليكون الأحادي البلورية من سليكون متعدد البلورية أو من سليكون بلوري أحادي مذاب، والعملية الرئيسية المستخدمة في ذلك تعتمد على تحديد الحافة وعملية إنماء تغذية الرقيقة (Edge-defined ,film fed growth process) وقد تم استخدامها من قبل شركة سولار موبيل الأمريكية (Solar Mobile) .



الشكل (14.I) : خطوات إنتاج خلية سليكونية شريطية [9]

3.1.2.I. الخلايا السليكونية متعددة البلورية:

يتكون السيليكون متعدد البلورية من حبيبات صغيرة من البلور الأحادي، ويمكن إنتاج طبقة رقيقة من السيليكون المتعدد البلورية بعدة طرق أحدها يتضمن تكوين سبيكة من السيليكون المتعدد البلورية المذاب، ومن ثم يتم تقطيعها بمنشار حاد إلى رقائق مربعة خفيفة، ويتم بعد ذلك تصنيعها بنفس طريقة تصنيع السيليكون الأحادي البلورية.

يتميز هذا النوع من الخلايا بأنه أرخص وأسهل تصنيعاً مقارنة مع الخلايا أحادية البلورية إلا أنها أقل كفاءة وذلك لكون حاملات الشحنة من الكترونات وفجوات المولدة من قبل فوتونات الإشعاع الشمسي يمكن أن تتجمع على الحدود بين الحبيبات داخل السيليكون متعدد البلورية وللتخلص من هذا العائق اقترحت عملية تصنيع المادة بطريقة تكون فيه الحبيبات كبيرة الحجم ويتم توجيهها من الأعلى إلى الأسفل، وذلك للسماح للإشعاع الشمسي بالتغلغل بعمقها. وقد تصل كفاءة هذه الصفائح الرقيقة تتراوح بين 11% إلى 15%.

2.2.I. الخلايا ذات الأغشية الرقيقة:

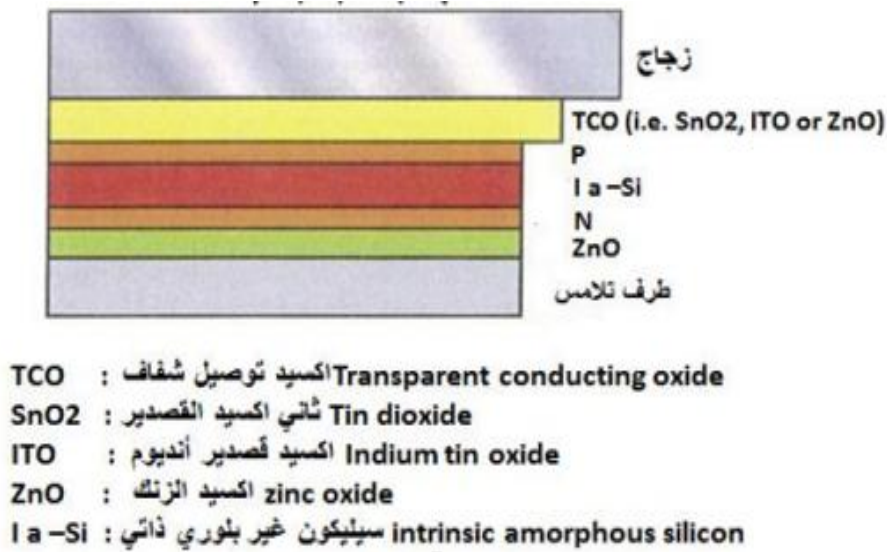
1.2.2.I. الخلايا السليكونية العشوائية:

هذا النوع من الخلايا السليكونية غير بلورية لوجود عنصر الهيدروجين أو بعض العناصر الأخرى، يرمز لها بـ (A-Si) وتكون ذرات السيليكون فيها أقل ترتيباً من النوع البلوري حيث لا ترتبط فيها كل ذرة ارتباطاً كاملاً مع الذرات المجاورة وإنما تترك ما يسمى بالرباط

المتدلي (Dangling Bands) وتستطيع امتصاص الكترونات اضافية عند اجراء عملية الطلاء.

تتم عملية التصنيع بواسطة خليط من غاز يحتوي على السليكون والهيدروجين (SiH_4) وكمية قليلة من الشوائب مثل البورون التي تتحلل كهربائيا بطريقة يمكن أن تكون طبقة رقيقة من السليكون العشوائي على قاعدة من مادة مناسبة كالفولاذ المرن (Elastic Stainless-steel).

وتختلف خلايا السليكون العشوائية عن باقي الخلايا المصنعة في منطقة الارتباط (P-N junction) فهي تتكون من طبقة رقيقة جدا P من السليكون العشوائي ثم طبقة داخلية I أكثر سما تليها طبقة أخرى رقيقة N من السليكون العشوائي كما هو موضح في الشكل (15.I) كما أن سمك حيز الارتباط (Band Gap) في هذا النوع من الخلايا اكبر مقارنة مع الخلايا الأخرى.



الشكل (15.I): مقطع لخلية سيليكونية غير بلورية

تتميز الخلايا السليكونية العشوائية بكفاءة ضعيفة جدا تصل الى 12% وتتناقص مع ازدياد تعرضها للشمس ومن سلبياتها أن مخلفاتها تحول الى الأرسنيد (الزرنخ) المضر بالبيئة.

2.2.2.I. خلايا الغاليوم أرسنايد:

هي خلايا تتكون من ذرات متعاقبة من الغاليوم والأرسنايد (GaAs) ، تمتلك هيكلًا بلورياً مشابهًا للسليكون، ولكنها ذات معامل امتصاص عالٍ جدًا للضوء فهي ملائمة للاستخدام في تطبيقات الخلايا الشمسية ويمكن أن تعمل تحت درجات حرارة عالية بدون انخفاض في أدائها.

تتمتع خلايا الغاليوم أرسنايد بكفاءة جيدة، ولكن كلفة تصنيع هذه الخلايا أعلى من كلفة تصنيع الخلايا الشمسية السليكونية وذلك لكون عمليات إنتاجها غير متطورة حاليًا، فتستخدم عند الحاجة إلى خلايا ذات كفاءة عالية في تطبيقات الفضاء مثلًا أو في تشغيل سيارات ...Sun Racer

3.2.2.I. خلايا الكوبرانديوم ديسلنايد:

هي مواد شبه موصلة مركبة من النحاس والأندنيوم والسيلينايد (CIS) وقد استخدمت في تصنيع خلايا وصلت كفاءتها مخبريًا إلى 12%. هذا النوع من الخلايا لا يعاني من مشكلة نقصان الكفاءة عند الاستخدام عكس الخلايا السليكونية العشوائية إنما مشكلته تنحصر في سمك الغشاء الرقيق لهذه الخلايا، وبما أن مادة الأندنيوم مادة غالية الثمن فذلك يؤثر على سعرها، ومن مساوئ تصنيع هذا النوع من الخلايا هو استخدام غازي الهيدروجين والسيلينايد السامين جدًا وقد يسبب مشاكل صحية كبيرة في حالة حدوث خلل عند التصنيع.

4.2.2.I. خلايا الكادميوم تليرايد (CdTe):

هي مواد أخرى شبه موصلة مناسبة لاستخدام الخلايا الفولتوضوئية تتألف من الكادميوم والتيليرايد، طريقة تصنيع هذا النوع من الخلايا بسيطة ورخيصة وذلك باستخدام الطلاء الكهربائي، وقد وصلت كفاءة هذه الخلايا إلى حوالي 10% وبدون تناقص عند الاستخدام لكن من مساوئ هذه الخلايا هو أن الكادميوم مادة سامة جدًا ولهذا يجب أخذ الاحتياطات اللازمة أثناء التصنيع.

3.I الألواح الشمسية (Solar Panels):

1.3.I مفهوم الألواح الشمسية:

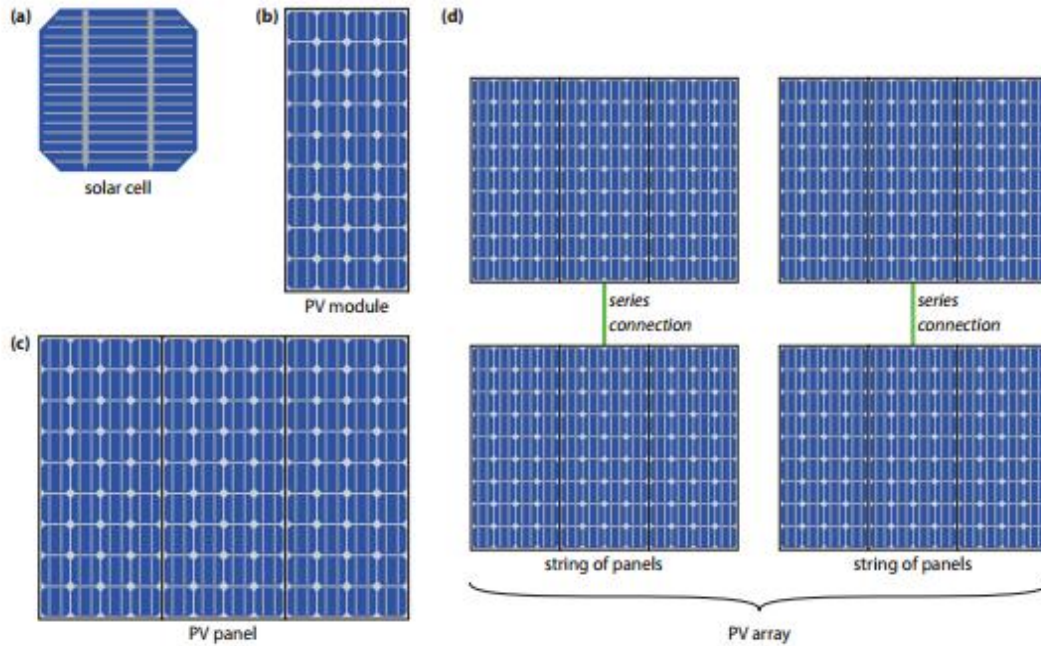
هي المكون الرئيسي في الأنظمة الشمسية التي تقوم بتوليد الكهرباء وعبرة عن مجموعة من الخلايا الكهروضوئية (PV cells) المتصلة مع بعضها في إطار واحد وتنقسم إلى:

- ألواح الـ 255-285 واط: تحتوي على 60 خلية (6×10) ومقاسها 164×99 سم
- ألواح الـ 315-335 واط: تحتوي على 72 خلية (6×12) ومقاسها 196×99 سم [18]



الشكل (16.I): أقسام الألواح الشمسية.

❖ نظرا لأن الخلية الشمسية هي أصغر وحدة في الأنظمة الكهروضوئية بالإضافة إلى أن الجهد المتولد منها صغير جدا مقارنة بالاحتياجات العادية، فإنه يتم تجميع الخلايا مكونا لواقط كهروضوئية (PV modules)، ثم بتجميع اللواقط الكهروضوئية يتم تكوين ألواح شمسية (PV panel) وبتجميع الألواح في منظومة شمسية يتم الحصول على المصفوفة الكهروضوئية (Solar Array) كما هو موضح في الشكل (17.I).



الشكل (17.I): (a) خلية شمسية، (b) لاقط PV، (c) لوحة شمسية، و (d) مصفوفة PV. [17]

2.3.I. تجميع الخلايا:

بما أن الجهد والتيار الذي تولده الخلية صغيرا جدا، فإنه يتم تجميع الخلايا على التسلسل لزيادة الجهد وبالتوازي لزيادة التيار.

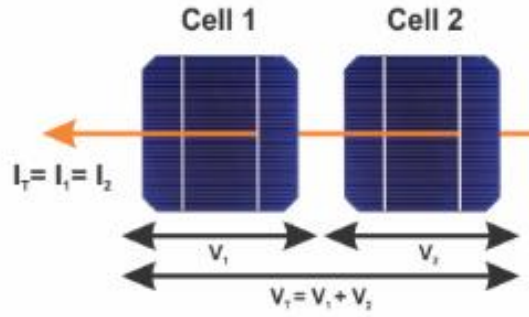
1.2.3.I. تجميع الخلايا على التسلسل:

عند ربط مجموعة من الخلايا المتماثلة على التسلسل عددها n_s فإن تيار الحمل المار في الخلية الواحدة هو نفسه المار في كافة الخلايا الموصولة معها، والتوتر الكلي على طرفي اللوح يساوي مجموع توترات الخلايا كافة. يعطى التيار والتوتر بالعلاقات التالية:

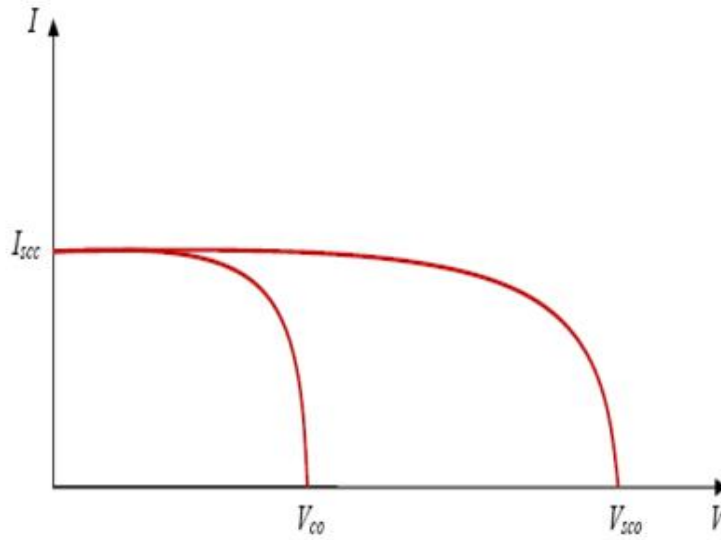
$$I.5 \quad I_{Sc} = I_{cc}$$

و

$$I.6 \quad V_{Sc} = n_s V_{co}$$



الشكل (I.18): توصيل الخلايا على التسلسل



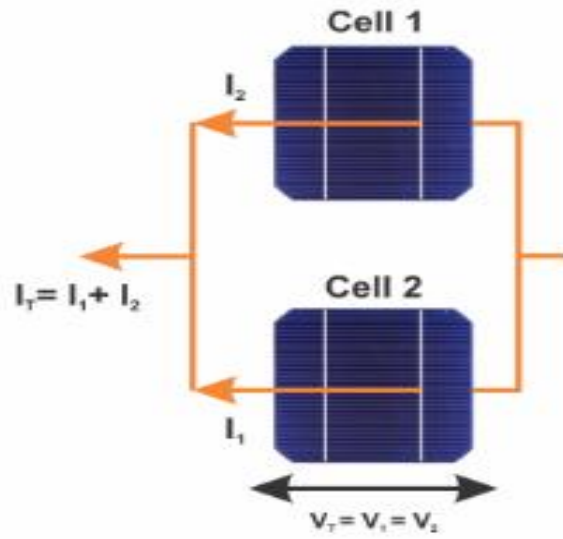
الشكل (I.19): خاصية توصيل الخلايا على التسلسل [19]

I.2.2.3.1. تجميع الخلايا على التوازي:

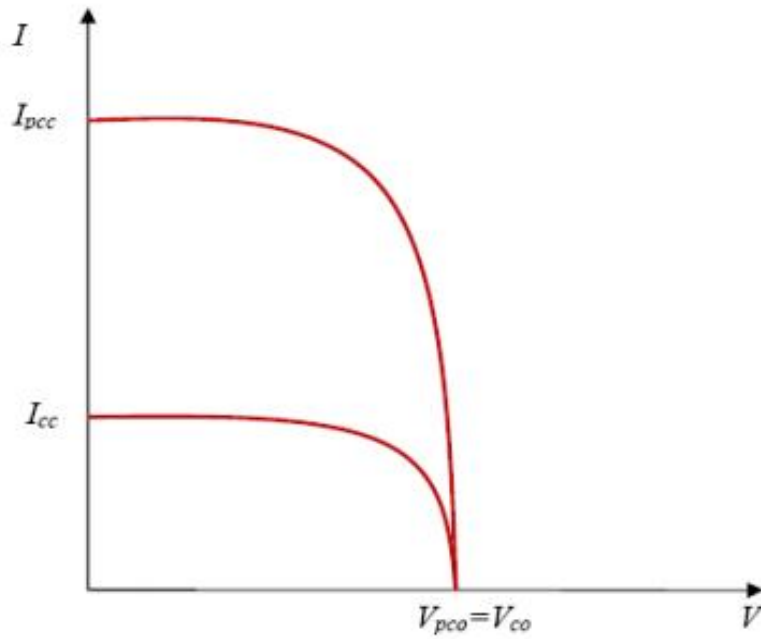
عند ربط مجموعة من الخلايا المتماثلة على التوازي عددها n_p ، فإن التوتر بين طرفي الخلية الواحدة هو نفسه التوتر بين طرفي كافة الخلايا الموصولة معها، أما التيار المار في اللوح يساوي مجموع تيارات المارة في الخلايا كافة. يعطى التيار والتوتر بالعلاقات التالية:

$$I.7 \quad I_{Pcc} = n_p \cdot I_{cc}$$

$$I.8 \quad V_{Pco} = V_{co}$$



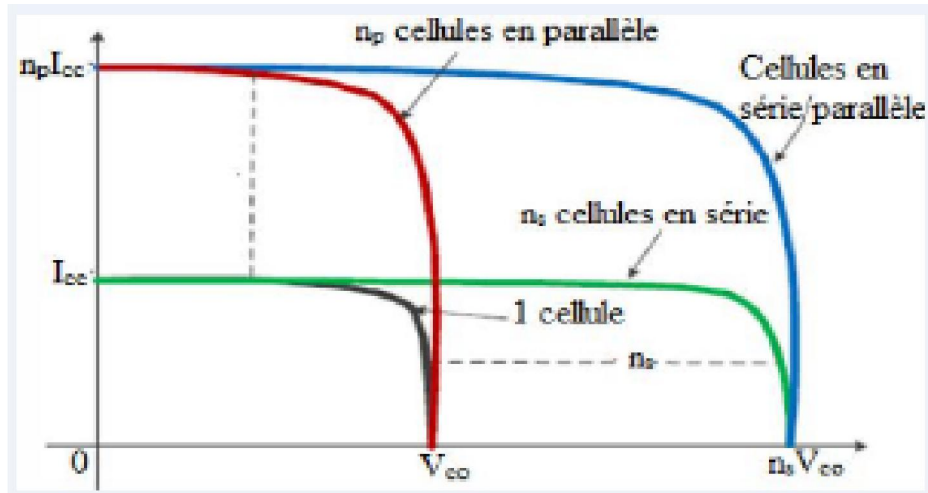
الشكل (20.I): توصيل الخلايا على التوازي



الشكل (21.I): خاصية توصيل الخلايا على التوازي [19]

3.2.3.I. تجميع الخلايا على التسلسل والتوازي في وقت واحد:

للحصول على استطاعة أكبر يتم تجميع الخلايا على التسلسل والتوازي في آن واحد وتحصيل ميزات كلا الوصلين فينتج تيار كبير وجهد مرتفع نسبيا كما هو موضح في الشكل(22.I):



الشكل(22.I): خاصية توصيل الخلايا على التسلسل والتوازي في آن واحد



الفصل الثاني
نظرية الكثافة

الوظيفية DFT

تمهيد :

سنتعرف في هذا الفصل على مختلف التطبيقات والبرمجيات التي تمكننا من المعرفة الدقيقة لبنية الجسم الصلب بعيدا عن استخدام الوسائل التجريبية أو الخوض في بعض التجارب المعقدة.

II.1. معادلة شرودينغر:

المعادلة الأساسية التي يتعين حلها لوصف نظام يتكون من العديد من الجزيئات والذرات هي معادلة أرفين شرودينغر (1887-1961) المعروفة بمعادلة شرودينغر وتكتب على الشكل التالي:

II.1

$$H\psi = \left[-\sum_i^N \frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 - \sum_I^A \frac{\hbar^2}{2M} \nabla_I^2 - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_{i,r} \frac{Z_I e^2}{|\vec{r}_i - \vec{R}_I|} + \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_{i<j} \frac{1}{2} \frac{e^2}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} + \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_{I<J} \frac{1}{2} \frac{Z_I Z_J e^2}{|\vec{R}_I - \vec{R}_J|} \right] \psi = E\psi$$

مع: $H = T_e + T_n + V_{e-e} + V_{e-n} + V_{n-n}$

بحيث:

H : (Hamiltonian operator) المؤثر الهاميلتوني الكمي للمجموعة قيد الدراسة والمكونة من N إلكترون ذات الأساس i و A لنوى الذرات ذات الأساس I.

مؤثر الطاقة الحركية للإلكترونات: $T_e = -\sum_{i=1}^{N_e} \frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla_i^2$

مؤثر الطاقة الحركية لنوى الذرات: $T_n = -\sum_I^A \frac{\hbar^2}{2m_n} \nabla_I^2$

مؤثر الطاقة الوضعية أو الجهد لتفاعل إلكترون-إلكترون: $V_{e-e} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_{i<j} \frac{1}{2} \frac{e^2}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|}$

مؤثر الطاقة الوضعية أو الجهد لتفاعل إلكترون-نواة: $V_{e-n} = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_{i,r} \frac{Z_I e^2}{|\vec{r}_i - \vec{R}_I|}$

مؤثر الطاقة الوضعية أو الجهد لتفاعل نواة-نواة: $V_{n-n} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_{I<J} \frac{1}{2} \frac{Z_I Z_J e^2}{|\vec{R}_I - \vec{R}_J|}$

ويمثل:

i و J معاملات خاصة بالالكترونات.

I و J معاملات خاصة بالنوى.

m_e و m_n كتل النوى والالكترونات على التوالي.

Z_I و Z_J الأعداد الذرية للأنوية I و J على التوالي.

$|r_i - R_I|$ المسافة بين الالكترون i والنواة I .

$|R_I - R_J|$ المسافة بين النواتين I و J .

$|r_i - r_j|$ المسافة بين الالكترونين i و j .

حل هذه المعادلة على حالتها هذه معقد جدا، لذلك وضعت عدة تقريبات لتبسيط هذه المعادلة نذكر منها:

II.2. تقريب بورن_اوبنهايمر: (Born-Oppenheimer):

بما أن كتلة الالكترونات صغيرة جدا مقارنة بكتلة النواة وسرعتها أكبر بكثير فإنه يتم حل المعادلات بإهمال حركة النوى مقارنة مع حركة الالكترونات أي باعتبار أن الأنوية غير متحركة (ساكنة)، وهذا يمكننا من عزل حركة الالكترونات عن حركة النوى، وتكون النتيجة الإبقاء على الحدود التي تمثل طاقة الإلكترون الحركية والوضعية بالإضافة إلى طاقة الوضع الناتج عن تفاعل الإلكترون مع النواة.

مع هذه التقريبات تصبح المعادلة السابقة كالتالي:

$$\text{II.2} \quad H\psi = [H_e + V_{n-n}]\psi = E\psi$$

سنقتصر في دراستنا المتبقية على دراسة H_e والذي يحدد معادلة شرودينغر متعددة الالكترونات حيث:

$$\text{II.3} \quad H_e = T + V_{ee} + V_{e-n}$$

يمثل H_e الهاملتون الالكتروني ويكتب بالشكل التالي:

$$\text{II.4} \quad H_e\psi = [T + V_{ee} + V_{e-n}]\psi = E_e\psi$$

وبالرغم أن هذا التقريب سهل حل المشكلة إلا أن الإلكترونات لا تتحرك بشكل مستقل عن بعضها بسبب وجود تفاعلات قوية الكترون-الكترن وبالتالي فإن الشكل الجديد المحصل عليه لا يمكن حله بطرق رياضية لذلك وجب استخدام تقريبات أخرى تعتمد على أسس رياضية سنذكر منها ما يلي:

II.3.1. تقريب هارترى- فوك (Hartry-Fock):

II.3.1.1. تقريب هارترى (Hartry):

يعرف هذا التقريب بتقريب الحقل المتوسط بحيث يتم افتراض أن كل الكترون يتحرك بصورة مستقلة في حقل متوسط خلقته الإلكترونات والانبوية الأخرى وبالتالي اهمال حد التفاعل الكترون-الكترن فيحول مشكلة جسيمات متعددة إلى مشكلة إلكترون واحد (مفرد) ويكتب الهاملتونيان بالشكل التالي:

$$H = \sum_i H_i \quad \text{II.5}$$

وتكتب معادلة شرودينغر ذات الجسيم الواحد والتي تسمى معادلة هارترى كالتالي:

$$H_i = \frac{-\hbar^2}{2m} \Delta_i + U_i(r_i) + V_i(r_i) \quad \text{II.6}$$

• $U_i(r_i)$ تمثل الطاقة الكامنة للإلكترون i في حقل الأنوية k وتكتب بالشكل:

$$U_i(r_i) = -\sum_k \frac{Z_k e^2}{4\pi |r_i - R_k^0|} \quad \text{II.7}$$

حيث R_k^0 يمثل موضع الأنوية.

• $V_i(r_i)$ الكمون الفعلي لهارترى ويكتب بالشكل:

$$V_i(r_i) = -\frac{1}{2} \sum_j \frac{e^2}{4\pi \epsilon_0 |r_i - r_j|} \quad \text{II.8}$$

وتكتب دالة الموجة للنظام على الشكل التالي :

$$\psi(r_1, r_2, \dots) = \prod_{i=1}^N \psi_i(r_i) \quad \text{II.9}$$

والطاقة الكلية للنظام تعتبر كمجموع الطاقات الموافقة لكل حالة الكترونية :

$$E = \sum E_i \quad \text{II.10}$$

ومنه فان معادلة شرودينغر تصبح على الشكل :

$$\text{II.11} \quad \left[\frac{-\hbar^2}{2m} \Delta_i + U_i(r_i) + V_i(r_i) \right] \psi_i(r) = \varepsilon_i \psi_i(r)$$

والحلول الناتجة تمثل الطاقة المتوسطة لاختيار كفي لـ ψ_i وذلك حسب مبدأ التغيرات الذي ينص على أن أحسن قيمة لـ ψ_i التي تجعل من قيمة E أصغرية.

اذن من خلال تقريب هارترى يصبح الالكترون j في الموضع r_j يخضع لكمون الشبكة U_j والكمون الكولومبي ودالة الموجة تكون ضد تناظرية بالنسبة لتبادل العنصرين أي:

$$\text{II.12} \quad \psi(r_1, r_2, \dots, r_j, r_k, \dots) = -\psi(r_1, r_2, \dots, r_k, r_j, \dots)$$

II.2.3. تقريب فوك (Fock):

أضاف فوك بعض التعديلات والتحسينات لتقريب هارترى وذلك بادخال مبدأ السبين

(Spin) لنظام الالكترونات، أي أنه يوجد $N!$ احتمال لوضع N الكترون على N موضع.

فنجد في أول إمكانية : $\psi_1(r_1)\psi_2(r_2)\psi_3(r_3)\dots\psi_N(r_N)$

وفي ثاني إمكانية : $\psi_1(r_1)\psi_3(r_2)\psi_2(r_3)\dots\psi_N(r_N)$

ولما نواصل في عملية تطبيق كل التبديلات نحصل على $N!$ حد لنفس النوع في حين أن دالة الموجة هي مجموع كل الحدود وذلك باخذ الاشارتين (+) و (-) بعين الاعتبار لتصبح

بشكل محدد يدعى محدد سلانتر (slater).

$$\text{II.13} \quad \psi_1(r_1, r_2, r_3, \dots, r_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \psi_1(r_1) & \dots & \psi_N(r_1) \\ \psi_1(r_N) & \dots & \psi_N(r_N) \end{vmatrix}$$

حيث يدعى الثابت $\frac{1}{\sqrt{N!}}$ بثابت النظامية [20].

II.4. تعاريف :

II.1.4. الدالة الوظيفية:

كائن رياضي يمثل علاقة رياضية تربط بها دالة بدالة أخرى عكس الدالة العادية التي تربط

بها دالة بعدد معين له قيمة محددة ، فمثلا الدالة الموجية $\psi(\vec{r})$ هي دالة عادية أما الطاقة

فيمكن التعبير عنها بدلالة $E[\psi(\vec{r})]$ فهي دالة وظيفية.

II.2.4. الكثافة الإلكترونية :

احتمال العثور على إلكترون متمركز في موضع \vec{r} من بين العدد الإجمالي للإلكترونات N في حيز من الفضاء $d\vec{r}$ هو: $n(r)d\vec{r}$

$$\text{II.14} \quad n(r) = \int |\psi(\vec{r}s, \vec{r}_2s_2, \vec{r}_3s_3, \dots, \vec{r}_Ns_N)|^2 ds_1 ds_2 d\vec{r}_2 \dots ds_N d\vec{r}_N$$

حيث $n(r)$: هو احتمال الكثافة الوظيفية والذي يعرف بأنه احتمال الكثافة الوظيفية وله خاصيتان أساسيتان:

$$\text{II.15} \quad \text{أ. } n(r \rightarrow \infty) = 0$$

$$\text{II.16} \quad \text{ب. } n(r)d\vec{r} = N$$

II.3.4. الكثافة الإلكترونية لزوج من الإلكترونات:

كثافة زوج من الإلكترونات هو احتمال العثور في وقت واحد على اثنين من بين N من الإلكترونات والتموضعين في وحدتي الحجم $d\vec{r}$ و $d\vec{r}'$ هي: $n(r, r')drdr'$ حيث:

$$\text{II.17} \quad n(r, r')drdr' = N(N-1) \int |\psi(\vec{r}s, \vec{r}'s', \vec{r}_3s_3, \dots, \vec{r}_Ns_N)|^2 ds_1 ds_2 ds_3 d\vec{r}_3 \dots ds_N d\vec{r}_N$$

II.5. نظرية الكثافة الوظيفية:

II.1.5. تعريف:

نظرية الكثافة الوظيفية (DFT) اختصار لـ Density Functionnel Theory: هي إحدى أهم الطرق المستعملة في الفيزياء والكيمياء النظريين، وبواسطتها نستطيع أن نحدد خصائص نظام متعدد الجزيئات (الطاقة الكلية للنظام، عصابات الطاقة، الكثافة الإلكترونية للمدارات، الخصائص الفيزيائية والضوئية للمادة...)

وهي واحدة من أكثر الطرق استخداما في العمليات الحسابية الكمومية بسبب إمكانية تطبيقها على أنظمة معينة وبتكلفة وسرعة عالية. وهدف هذه النظرية هو استبدال الدالة الموجية بالدالة الوظيفية للكثافة ذات ثلاثة متغيرات فقط وجعلها كقاعدة للحساب، لذلك التعامل معها كمفهوم رياضي أو فيزيائي أسهل بكثير.

II.2.5. دالة الكثافة الوظيفية: DFT Functional

- الطاقة الكلية: لحساب الطاقة الكلية E للنظام يتم اختيار الكمون ودالة الموجة وهذا في جميع طرق حساب بنية عصابات الطاقة ونستخدم في ذلك الكثافة الإلكترونية $n(r)$ لكتابة هذه المؤثرات وتكتب الطاقة الكلية على الشكل [21]:

$$E[n] = T[n] + E^H[n] + E^{xc}[n] + \int V(\vec{r})n(\vec{r})d^3r \quad \text{II.18}$$

$T[n]$: الطاقة الحركية.

$E^H[n]$: طاقة هارترتي للتناظر الإلكتروني .

$E^{xc}[n]$: طاقات التبادل والارتباط.

$V(\vec{r})$: الكمون الخارجي

ملاحظة: الشكل الدقيق بالنسبة لطاقات التبادل والارتباط والطاقة الحركية غير معروف لذلك في الحسابات العددية لا يمكن تطبيق نظرية الكثافة الوظيفية إلا بالرجوع الى عدد من التقريبات نذكر منها:

II.1.2.5. نظرية توماس فيرمي (Thomas Fermi):

صاغ توماس وفيرمي الطاقة الكلية لغاز الإلكترونات اللامتجانسة كدالة لكثافة الإلكترونات المعروفة لغاز متجانس [22] وذلك بإجراء عدة تقسيمات على منطقة بريلمان وهو تقريب موضعي لا يأخذ بعين الاعتبار ارتباط الإلكترونات، حيث أنه عند آخر تقسيم تعتبر الكثافة الإلكترونية ثابتة في كل منطقة من مناطق بريلمان المقسمة [23].

فقد اعطت طريقة توماس فيرمي المعتمدة على نموذج إحصائي لتقريب التوزيع الإلكتروني حول الذرات صورة عن إمكانية الاعتماد على الكثافة الإلكترونية لحساب الطاقة الحركية.

- الطاقة الحركية :

$$T[n] = \int t[n(\vec{r})]d^3r \quad \text{II.19}$$

$$t(n) = \frac{3\hbar^2}{10m_e} (3\pi^2)^{2/3} [n(\vec{r})]^{5/3}$$

حيث $t(n)$ هي الطاقة الحركية لإلكترون غاز متجانس غير متفاعل مع كثافة الكترون.

• التفاعل الالكتروني (إلكترون - إلكترون) حسب تناظر كولوم:

$$E^H[n] = \frac{e^2}{2} \int \int \frac{n(\vec{r})n(\vec{r}')}{|\vec{r}-\vec{r}'|} d^3r d^3r' \quad \text{II.20}$$

أضيف مصطلح ارتباط التبادل في الاصدارات الحديثة الى التفاعل الالكتروني لنتحصل في الأخير على معادلة توماس فيرمي كالتالي:

$$\frac{5}{3}C[n(\vec{r})]^{2/3} + e^2 \int \frac{n(\vec{r})}{|\vec{r}-\vec{r}'|} d^3r' + V(\vec{r}) = 0 \quad \text{II.21}$$

II.2.2.5. نظرية هوهنبرغ-كوهن (Hohenberg-Kohn):

التقريب الذي وضعه هوهنبرغ-كوهن (Hohenberg-Kohn) مكن من إعادة صياغة الدالة الوظيفية للكثافة المقترحة من طرف توماس فيرمي ووضع نظرية دقيقة لنظام متعدد الجسيمات تنص على أنه لحساب الخصائص الفيزيائية لجملة يجب تحديد السوية الالكترونية التي تعطينا الحد الأدنى لطاقة كون-شام التي سنتعرف عليها لاحقاً وللحصول على ذلك يتم العمل بشكل تكراري على تابع موجي أحادي تجريبي حتى الحصول على الطاقة الكلية الدنيا، هذا التقريب ينطبق على أي نظام من الجسيمات المتفاعلة تتحرك في جهد خارجي.

❖ نص النظرية: وتنقسم إلى شقين:

• طاقة الحالة الدنيا لنظام متعدد الجسيمات E_0 هي الدالة الوظيفية الوحيدة لكثافة

$$E_0 = E[n(\vec{r})] \text{ ونكتب :}$$

• تأخذ الدالة الوظيفية $E[n(\vec{r})]$ الحد الأدنى بالنسبة الى المتغيرات $\delta n(\vec{r})$ لكثافة

الجسيمات عند كثافة التوازن $n_0(\vec{r})$

$$E_0 = E[n_0(\vec{r})] = \min \{ E[n(\vec{r})] \} \quad \text{II.22}$$

$$\left. \frac{\delta E[n(\vec{r})]}{\delta n(\vec{r})} \right|_{n(\vec{r})=n_0(\vec{r})=0}$$

II.3.2.5. نظرية كون-شام:

تتلخص نظرية كون-شام بتحويل جملة الإلكترونات غير المتفاعلة ضمن الكمون الحقيقي إلى جملة افتراضية غير متفاعلة تتحرك الإلكترونات من خلالها ضمن كمون كون-شام الناشئ عن جسيم وحيد.

II.1.3.2.5. عبارة الطاقة الكلية:

لتكن: [24]

$$\text{II.23 } E[n(\vec{r})] = \int n(\vec{r})V(\vec{r})d^3r + \frac{e^2}{2} \int \int \frac{n(\vec{r})n(\vec{r}')}{|\vec{r}-\vec{r}'|} d^3r d^3r' + T[n(\vec{r})] + E^{xc}[n(\vec{r})]$$

✓ تحديد كثافة الجسيمات من حيث مجموعة من المدارات أحادية الإلكترون والتي تمثل نظام انعكاس غير متفاعل.

$$\text{II.24 } n(\vec{r}) = \sum_i |\Phi_i(\vec{r})|^2$$

✓ حساب الطاقة الحركية غير المتفاعلة حيث: $T[n] \sim T_0[n]$

$$\text{II.25 } T_0[n] = \sum_i \int \Phi_i^*(\vec{r}) \left(\frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 \right) \Phi_i(\vec{r}) d^3r$$

✓ تقريب الكثافة المحلية لطاقة ارتباط-التبادلية:

$$\text{II.26 } E^{xc}[n(\vec{r})] = \int n(\vec{r}) \varepsilon_{xc}[n(\vec{r})] d^3r$$

✓ إذا كانت $\varepsilon_{xc}[n(\vec{r})]$ هي طاقة الارتباط-التبادلية لغاز الكترولون متجانس مع الكثافة المحلية $n(\vec{r})$ بالنسبة لجزء التبادل فان حساب هارترى فوك لغاز الكترولون متجانس يؤدي إلى أن:

$$\text{II.27 } \varepsilon_{xc}[n(\vec{r})] = \frac{-3e^2}{4\pi} (3\pi^2 n(\vec{r}))^{1/3}$$

✓ تحديد المدارات المثلى للإلكترون الواحد باستخدام الشرط المتغير وفقا لقيد التعامد:

$$\text{II.28 } \delta \left\{ E[n(\vec{r})] - \sum_{i,j} \varepsilon_{i,j} \langle \Phi_i | \Phi_j \rangle - \delta_{i,j} \right\}$$

II.2.3.2.5. معادلات كون-شام بعد القطر ε_{ij} :

$$\text{II.29} \quad \left\{ \frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{r}) + e^2 \int \frac{n(\vec{r}')}{|\vec{r}-\vec{r}'|} d^3r' + \mu_{xc}[n(\vec{r})] \right\} \Phi_i(\vec{r}) = \varepsilon_i \Phi_i(\vec{r})$$

ومع كمون الارتباط التبادلي: $\mu_{xc}[n(\vec{r})] = \frac{\delta E_{xc}[n(\vec{r})]}{\delta n(\vec{r})}$ فإن الطاقة الكلية تكتب من الشكل:

$$\text{II.30} \quad E = \sum_i \varepsilon_i - \frac{1}{2} \iint \frac{n(\vec{r})n(\vec{r}')}{|\vec{r}-\vec{r}'|} d^3r d^3r' + \int n(\vec{r}) \varepsilon_{xc}[n(\vec{r})] d^3r - \mu_{xc}[n(\vec{r})] d^3r$$

حيث: الحد الأول يمثل مجموع طاقات الالكترن الواحد.

والحد الثاني يمثل طاقة العد المزدوج.

II.3.3.2.5. الشروط المتغيرة:

✓ الطاقة الكلية E_n [24]:

$$\text{II.31} \quad \frac{\delta E[n(\vec{r})]}{\delta n(\vec{r})} \Big|_{n(\vec{r})=n_0(\vec{r})} = 0$$

✓ القيم الذاتية لكون-شام:

$$\text{II.32} \quad \delta \langle \phi_i | H^{ks} | \phi_i \rangle = 0 \quad \langle \phi_i | \phi_j \rangle = 0 \quad \text{فإن} \quad \varepsilon_i \langle \varepsilon_j | R_i \rangle$$

✓ معيار المتجه المتبقي $|R_i\rangle$:

$$\text{II.33} \quad |R(\phi_i)\rangle = (H^{ks} - \varepsilon_i^{app}) |\phi_i\rangle; \quad \varepsilon_i^{app} = \langle \phi_i | H^{ks} | \phi_i \rangle$$

$$\delta \langle R(\phi_i) | R(\phi_i) \rangle = 0$$

✓ تفسير طاقات الالكترن الواحد:

نظرية هارترلي فوك وكومبان:

$$\text{II.34} \quad \varepsilon_i^{HF} = E^{HF}(n_i=1) - E^{HF}(n_i=0)$$

ε_i^{HF} : طاقة التآين اذا تم اهمال استرخاء مدارات الالكترن الواحد.

حسب كون-شام فان الطاقة الكلية هي دالة غير خطية وبالتالي نظرية كومبان غير صالحة.

$$n_i(\vec{r}) = \phi_i^*(\vec{r}) = \phi(\vec{r}) \quad , \quad \frac{\delta E[n(\vec{r})]}{\delta n(\vec{r})} = \varepsilon_i$$

II.4.2.5. دالة الارتباط التبادلي:

II.4.2.5.1. تعريف :

تمثل طاقة الارتباط التبادلي الفرق بين طاقة الحالة الدنيا وطاقة المحسوبة في تقريب هارترى مضاف إليها الطاقة الحركية غير المتفاعلة $T_0[n]$ وتعطى بالعلاقة التالية:

$$E^{xc}[n] = T[n] - T_0[n] + U^{xc}[n] \quad \text{II.35}$$

$T[n]$ و $T_0[n]$: الطاقة الحركية الدقيقة والطاقة الحركية غير المتفاعلة على الترتيب.

$U^{xc}[n]$: طاقة تفاعل الإلكترونات مع الفجوة الخاصة بها n_{xc} (ρ_2 هي مصفوفة كثافة الجسمين).

II.2.4.2.5. خصائص فجوة الارتباط التبادلي n_{xc} :

- ✓ الموقع: $\lim_{|\vec{r} \rightarrow \vec{r}'|} n_{xc}(\vec{r}, s; \vec{r}', s') = 0$
- ✓ مبدأ باولي للإلكترونات ذات الدوران المتوازي: $n_{xc}(\vec{r}, s; \vec{r}', s') = -n_s(\vec{r})$
- ✓ دالة موجية اللامتماثلة غير متفاعلة: $\int n_{xc}(\vec{r}, s; \vec{r}', s') d^3 r' = -\delta_{s,s'}$
- ✓ تطبيع مصفوفة كثافة الجسمين: $\int n_{xc}(\vec{r}, s; \vec{r}', s') d^3 r' = 0$
- ✓ صيغة الاتصال الأديباتيكي: $E^{xc}[n] = \frac{1}{2} \int d^3 r n(\vec{r}) \int d^3 r' \int_0^1 d\lambda \frac{n_{xc,\lambda}(\vec{r}, \vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|}$
- ✓ حدود ليب - أكسفورد (Leib Oxford): $E^{xc}[n] \geq -D \int n^{4/3}(\vec{r}) d^3 r$ (مع: $1.44 \leq D \leq 1.68$)

بالإضافة إلى عمليات القياس.

II.5.2.5. LDA تقريب الكثافة المحلية

II.36

$$E^{xc} [n] = \int n(r) \varepsilon_{xc} [n(\vec{r})] d^3r$$

✓ دالة التبادل للأنظمة المستقطبة الدورانية:

$$n(\vec{r}, \uparrow) \neq n(\vec{r}, \downarrow), n = n \uparrow + n \downarrow$$

$$\begin{aligned} \varepsilon_{xc} [n(\vec{r}, \uparrow), n(\vec{r}, \downarrow)] &= -\frac{3e^2}{4\pi} (3\pi^2)^{1/3} \left\{ \frac{n(\vec{r}, \uparrow)^{4/3} + n(\vec{r}, \downarrow)^{4/3}}{n(\vec{r})} \right\} \\ &= \varepsilon_x^p + (\varepsilon_x^f - \varepsilon_x^p) \frac{(n \uparrow/n)^{4/3} + (n \downarrow/n)^{4/3} - (1/2)^{1/3}}{1 - (1/2)^{1/3}} \end{aligned}$$

حيث: $\varepsilon_x^p = \varepsilon_x (n \uparrow = n \downarrow = n/2)$ للبارامغناطيسية غير المستقطبة.

و $\varepsilon_x^f = \varepsilon_x (n \uparrow = n, n \downarrow = 0)$ تمثل النفاذية المغناطيسية المستقطبة بالدوران.

- الارتباط الوظيفي $\varepsilon_c = [n(\vec{r}, \uparrow), n(\vec{r}, \downarrow)]$ يتم تركيبها على طاقة الحالة الدنيا لغاز الكترولون متجانس محسوبة باستخدام محاكاة مونت كارلو الكمومية.

II.6.2.5. GGA تقريب التدرج المعمم

$$II.37 \quad E^{xc} [n(\vec{r}, \uparrow), n(\vec{r}, \downarrow)] = \int f [n(\vec{r}, \uparrow), n(\vec{r}, \downarrow), \nabla n(\vec{r}, \uparrow), \nabla n(\vec{r}, \downarrow)] d^3r$$

توجد استراتيجيتان مختلفتان لتحديد الدالة f:

أ- ضبط f بحيث يلبي جميع أو معظم الخصائص المعروفة لفجوة الارتباط التبادلي والطاقة.

ب- تتناسب f مجموعة البيانات الكبيرة الخاصة بها والتي تمتلك طاقات ربط معروفة تماما لذرات والجزيئات، لكن دائما يفضل استعمال الاستراتيجية (أ) لأن هناك العديد من الاختيارات

المختلفة مثل: PW Perdew-Wang, Lee-yang-Parr.

II.3.5. حدود دالة الكثافة الوظيفية :

• مشكلة فجوة النطاق (Band-gap):

نظرية هوهنبرغ-كون-شام غير صالحة للحالات المثارة، دائما ما يتم التقليل من الفجوات في أشباه الموصلات والعوازل، ومن الحلول الممكنة لهذه المشكلة الوظائف الهجينة (U، GW ، LDA، SCI) التي تؤدي الى الزيادة في فجوات الارتباط.

- التجليد: LSDA ثوابت شبكية صغيرة وطاقات متماسكة كبيرة جدا بمعاملات مجمعة عالية جدا. ومن الحلول الممكنة تقريب التدرج المعمم GGA فهو الخيار الأمثل لحساب طاقات الامتصاص.
- اهمال الارتباطات القوية والتقليل من التقسيم التبادلي للنطاقات الضيقة من الحلول الممكنة استعمال تقريب الكثافة المحلية واهمال روابط فاندر والس....

II. 6. برنامج المحاكاة VASP:

II. 1.6. تعريف برنامج VASP:

VASP هي اختصار The Vienna Ab initio Simulation وهي عبارة عن حزمة معقدة لإجراء عمليات محاكاة الديناميات الجزيئية الميكانيكية الكمومية (MD) باستخدام الكمون الزائف (Pseudo Potentials) أو طريقة الموجة المعززة لجهاز الإسقاط PAW ومجموعة أساس الموجة المستوية. النهج المطبق في VASP يعتمد على تقريب الكثافة المحلية مع الطاقة الحرة ككمية متغيرة وتقييم دقيق للحالة الأرضية الإلكترونية اللحظية في كل خطوة زمنية MD. يستخدم VASP مخططات المصفوفة القطرية الفعالة وفعالية خلط كثافة شحنة Pulay / Broyden. هذه التقنيات تتجنب جميع المشاكل التي قد تحدث في طريقة Car-Parrinello الأصلية، والتي تعتمد على التكامل المتزامن للمعادلات الإلكترونية والأيونية للحركة. يتم وصف التفاعل بين الأيونات والإلكترونات بواسطة الكمون الزائف فائق النعومة (US-PP) أو بواسطة طريقة الموجة المعززة بجهاز العرض (PAW). تسمح US-PP وطريقة PAW بتخفيض عدد كبير من الموجات المستوية لكل ذرة للمعادن الانتقالية وعناصر الصف الأول مثل C و O بشكل عام لا يزيد عن 100 موجة مستوية (PW) لكل ذرة مطلوبة لوصف المواد السائبة، في معظم الحالات، حتى PW50 لكل ذرة ستكون كافية لوصف أدق. يمكن حساب القوى وموثر الإجهاد الكامل باستخدام VASP وتستخدم لإرخاء الذرات في حالتها الأرضية الآتية.

II. 2.6 إعداد حساب VASP :

II. 2.6.1. ملفات الإدخال:

يتطلب VASP 4 ملفات لإدخال لتشغيل عملية حسابية هم:

POTCAR	INCAR
KPOINTS	POSCAR

II. 2.6.1.1. ملف INCAR :

ملف INCAR هو ملف الإدخال المركزي لـ VASP. يحتوي ملف INCAR على معلومات الإدخال التي توجه العملية الحسابية:

- القيم الافتراضية التي حددتها VASP نفسها هي اختيار ذكي لمعظم الحسابات القياسية.
- يمكن تعديل هذه الإعدادات القياسية لتحديد:
- ما نوع الحساب الذي تريد القيام به: حساب SCF، DOS، خصائص العزل، ...
- المدخلات الأساسية مع الدقة المطلوبة، مستوى التقارب المطلوب ...

II. 2.6.1.2. ملف POSCAR :

يحتوي ملف POSCAR على مواضع الأيونات. فمثلا بالنسبة للماس، يحتوي ملف POSCAR على الأسطر التالية [25]:

خط تعليق	comment line	Cubic diamond
عامل التحجيم الشامل	universal scaling factor	3.7
الشعاع الأول لشبكة تبلور برفايه	first Bravais lattice vector	0.5 0.5 0.0
الشعاع الثاني لشبكة تبلور برفايه	second Bravais lattice vector	0.0 0.5 0.5
الشعاع الثالث لشبكة تبلور برفايه	third Bravais lattice vector	0.5 0.0 0.5
عدد الذرات لكل نوع	number of atoms per species	2
إحداثيات ديكرتية أو مباشرة	Cartesian or Direct coordinate	Direct
إحداثيات الذرات	positions of the atoms	0.0 0.0 0.0
		0.25 0.25 0.25

II.3.1.2.6. ملف KPOINTS:

في ملف KPOINTS، تحدد النقاط التي سيستخدمها VASP لأخذ عينات من ملف أول منطقة Brillouin في الفضاء المتبادل (أي إعداد نقاط k).

4x4x4	Comment	تعليق
0	$N_k=0$: automatic generation of k-point	انشاء تلقائي للنقاط
Monkhorst	M use Monkhorst Pack	استخدام حزمة Monkhorst
4 4 4	grid 4x4x4	شبكة 4x4x4
0 0 0	shift the mesh (usually 0 0 0)	تحويل الشبكة

II.4.1.2.6. ملف POTCAR:

يجب أن يحتوي ملف POTCAR على مجموعات بيانات PAW لجميع الأنواع الذرية المحددة في ملف POSCAR السابق:
يحتوي ملف POTCAR على معلومات حول الذرات (أي كتلتها، وتكافؤها، طاقة التكوين المرجعي الذري الذي تم إنشاء الكمون الزائف من أجله وما إلى ذلك).

II.2.2.6.ملفات الإخراج:

II.1.2.2.6.ملف OUTCAR:

الإخراج التفصيلي لتشغيل VASP، بما في ذلك [26]:

- ملخص لاعدادات الإدخال.
- معلومات حول الخطوات الإلكترونية الفردية: إجمالي الطاقة، قيم كوهن شام الذاتية، طاقة فيرمي.
- التوترات الإجهاد.
- القوى في الذرات.
- الشحنات المحلية، العزوم المغناطيسية.
- خصائص عازلة...

- يمكن اختيار مقدار المخرجات المكتوبة على OUTCAR بواسطة علامة NWRITE في ملف INCAR.

II. 2.2.2.6. ملف OSZICAR & stdout:

- إعطاء ملخص قصير لدورة الاتساق الذاتي.
- اختيار خوارزمية SCF.
- تقارب الطاقة وكثافة الشحنات.
- الطاقات الحرة ، العزم المغناطيسي الكلي للخلية.

II. 3.2.2.6. ملف CONTCAR & XDATCAR:

- CONTCAR:

- تحديث البيانات الهندسية في نهاية التشغيل

- إعداد البنية.

- شبكة برافيه Bravais matrix

- الحالات الأيونية.

- السرعات.

- تنسيق CONTCAR هو نفسه تنسيق POSCAR: يمكن استخدامه مباشرة لتشغيل

متابعة (نسخة CONTCAR إلى POSCAR).

- XDATCAR:

- مواضع أيونية محدثة لكل خطوة أيونية.

II. 4.2.2.6. ملف DOSCAR, CHGCAR & WAVECAR:

- DOSCAR: DOS إجمالي و DOS متكامل، (DOS جزئي محلي).

- CHGCAR: كثافة الشحنة.

- WAVECAR: معاملات الموجة المستوية للمدارات.

يمكن استخدامها لإعادة التشغيل من تشغيل سابق.

II.3.6. أهم العمليات التي يقوم بها VASP:

يحسب VASP حلاً تقريبياً لمعادلة شرودنجر متعددة الأجسام، إما ضمن النظرية الوظيفية للكثافة (DFT)، وحل معادلات كوهن شام، أو ضمن تقريب (Hartry-Fock) (HF)، وحل معادلات Roothaan. يتم أيضاً تنفيذ الوظائف الهجينة التي تمزج نهج Hartry-Fock مع نظرية الكثافة الوظيفية. علاوة على ذلك، تتوفر طرق وظائف Green (أشبه الجسيمات GW وACFDT-RPA) ونظرية اضطراب الجسم المتعدد (المرتبة الثانية Møller-Plesset) في VASP.

في VASP، يتم التعبير عن الكميات المركزية مثل مدارات الإلكترون الواحد وكثافة الشحنة الإلكترونية والكمون المحلي في مجموعات أساس الموجة المستوية. يتم وصف التفاعلات بين الإلكترونات والأيونات باستخدام الكمون الزائف والمحافظة على المعايير أو الكمون الزائف فائق النعومة، أو طريقة الموجة المعززة لجهاز الإسقاط.

لتحديد الحالة الإلكترونية، يستخدم VASP تقنيات المصفوفة التكرارية الفعالة، مثل طريقة التقليل المتبقية مع الانعكاس المباشر للفضاء الجزئي التكراري (RMM-DIIS) أو خوارزميات Davidson المحظورة. يقترن هذا بكثافة عالية الكفاءة Broyden و Pulay مخططات خلط لتسريع دورة الاتساق الذاتي.

II.4.6. طريقة الموجة المعززة لجهاز العرض (PAW):

• عدد الموجات المستوية اللازمة لوصفها:

- حالات مقيدة بإحكام.

- التذبذبات السريعة (السمات العقدية) للمدارات القريبة من النواة يتجاوز أي حد عملي، ربما باستثناء Li و H.

• الحل المشترك:

- تقديم تقريب النواة المجمدة:

يتم حساب الإلكترونات الأساسية مسبقاً في بيئة ذرية وتبقى مجمدة في سياق العمليات الحسابية المتبقية.

- استخدام الكمون الزائف بدلاً من الكمون الدقيق:
- ← الكمون الزائف للمحافظة على المعايير.
- ← الكمون الزائف فائق النعومة.
- ← طريقة جهاز العرض المعزز (PAW).

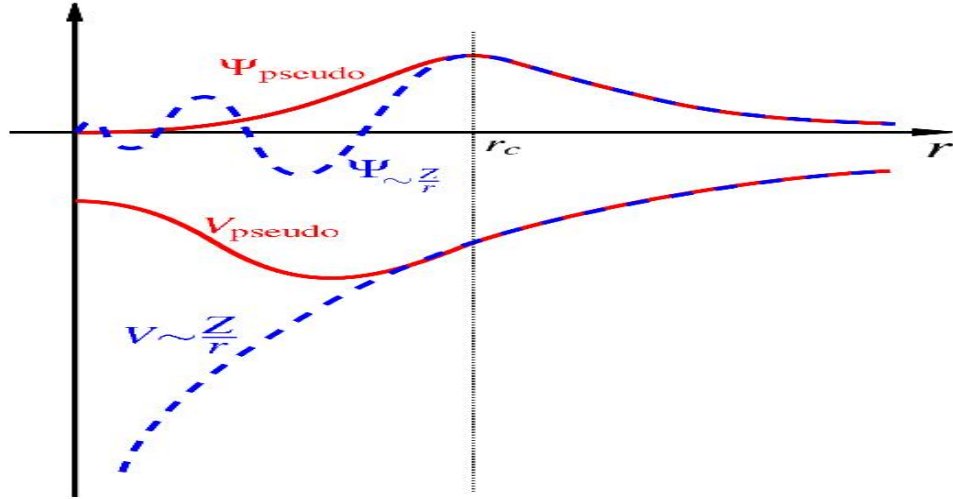
II.1.4.6. الكمون الزائف:

تستخدم قواعد الموجات المستوية نفس الدقة في كل منطقة من الفضاء بحيث لوصف كل من النوى الأيونية (أي النواة المحاطة بالسحابة الإلكترونية الداخلية) والحالات الإلكترونية الموجودة جزئياً حولها، فإن عدد الأشعة G المطلوبة ستكون كبيرة نسبياً لحل معادلات كوهن شام بنجاح.

تتمثل إحدى طرق التغلب على هذه الصعوبة في استخدام طريقة الكمون الزائف، والتي تسمى أيضاً تقريب النواة المجمدة. تعتمد هذه الطريقة على افتراض أن إلكترونات التكافؤ فقط (أي الإلكترونات الخارجية) تساهم بشكل كبير في الخصائص الفيزيائية والكيميائية لنظام معين بينما الإلكترونات الأساسية ليست حساسة للغاية للبيئة الكيميائية. وبالتالي تعتبر النوى الأيونية "مجمدة" في تكويناتها الذرية. وإذن تتكون طريقة الكمون الزائف من معالجة إلكترونات التكافؤ فقط، والتي تتحرك بعد ذلك في كمون خارجي فعال. يحاول هذا الكمون الزائف إعادة انشاء التفاعل الناتج عن الكمونات الحقيقية على إلكترونات التكافؤ دون تضمينها صراحة في حساب الإلكترونات الأساسية.

عدد الإلكترونات التي تظهر حقيقة في الحسابات (وبالتالي عدد المعادلات التي يجب حلها) ينخفض بشكل كبير، يتم أخذ إلكترونات التكافؤ فقط في الاعتبار مما ينتج عنه توفير كبير في وقت الحوسبة. ولكن، كما هو الحال في ميكانيكا الكم، يجب أن تكون جميع دوال الموجة التي تصف الحالات الإلكترونية (أي الإلكترونات) متعامدة مع بعضها البعض. في الواقع، لتبقى متعامدة مع المدارات الأساسية، تتذبذب الدوال الموجية لإلكترونات التكافؤ بسرعة في المنطقة القريبة من النواة. تظل دوال الموجة الناتجة عن قيد التعامد صعبة نسبياً في الوصف من قاعدة موجة مستوية (عدد كبير جداً من متجهات G). ثم نستبدل جزء الدالة الموجية القريب من النواة الأيونية بدوال موجية وهمية، أو دوال الموجة الزائفة، والتي تؤدي

إلى نفس دوال موجة التكافؤ خارج نصف قطر القطع المختار r_c بحيث يشير نصف قطر القطع السابق إلى النقطة التي بعدها تصبح الدالة الموجية الحقيقية والكمون مطابقة للدالة الموجية الزائفة والكمون الزائف (أحمر) (أنظر الشكل 1.II).



الشكل 1.II: مقارنة دالة موجية في جهد كولوم للنواة (أزرق) بتلك الموجودة في الكمون الزائف (أحمر). تتطابق الدالة الموجية الحقيقية والزائفة والكمون فوق نصف قطر قطع r_c معين [27].

بحيث:

ψ_{pseudo} الدالة الموجية الزائفة لكل الإلكترون ونرمز لها بالرمز: $\tilde{\psi}$.

ψ الدالة الموجية لكل الإلكترون.

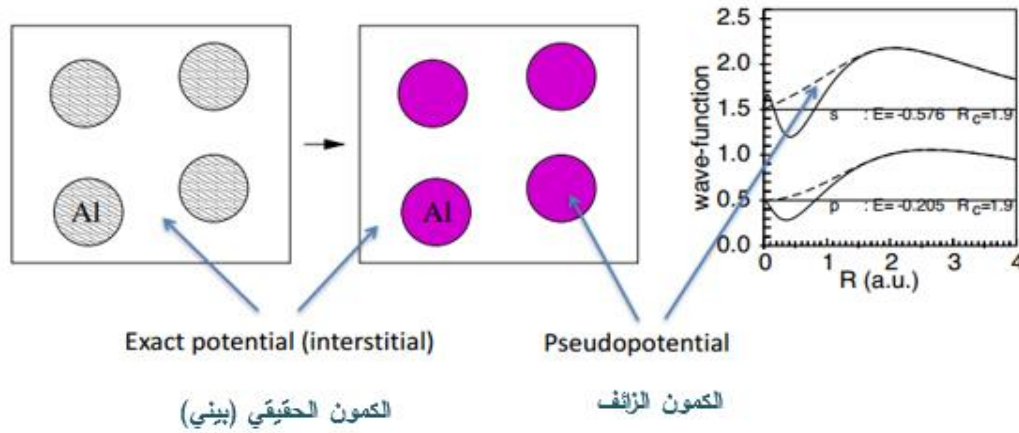
V_{pseudo} الجهد الزائف ونرمز له بالرمز \tilde{V} .

V جهد كل الإلكترون.

تكون دوال الموجة الزائفة هذه أكثر سلاسة من دوال الموجة الحقيقية، وبالتالي يمكن تمثيلها بعدد من الأشعة أقل بكثير من تلك المطلوبة في معالجة دوال الموجة الحقيقية، ولأن الكمونات "الصعبة" للنواة الأيونية يتم استبدالها بكمون زائف "أكثر ليونة"، لذلك يتم تعريف الكمون الزائف على أنه كمون أيوني معتدل نسبياً يعمل فقط على إلكترونات التكافؤ [27].

إذا تم ضبط الكمون الزائف بحيث تكون الشحنة المدمجة في منطقة النواة الأيونية المقابلة لدالة الموجة الزائفة مساوية للشحنة المتكاملة المرتبطة بدالة الموجة الحقيقية، يُقال أن

الكمون الزائف محفوظ بشكل طبيعي. وهكذا، على الرغم من أن طريقة الكمون الزائف تبسط إلى حد كبير وصف إلكترونات التكافؤ، فإن استخدام الكمون الزائف المحفوظ في المعايير يجعل من الممكن ضمان النظر الصحيح لهذا الغلاف الإلكتروني الخارجي. يتم إنشاء مثل هذا الكمون الزائف بطريقة تمكننا من استخدامها للتنبؤ بالخصائص الكيميائية للذرة في مجموعة واسعة من الحالات. نظرًا لأن الكمون الزائف ذات القاعدة المحفوظة لا يعتمد على المعرفة التجريبية الأولية لعنصر كيميائي، فيمكن بناؤه لأي عنصر في الجدول الدوري.



Al	ذرة Al فعالة	ذرة PAW Al
3p		
3s	2p	3p
2p	1s	3s
2s		
1s	عديمة العقد 1s و 2p	تم الاحتفاظ بالهيكل العنقدي

الشكل II. 2: يوضح الكمون الزائف لذرة Al

يتم توليد الكمون الكاذب من ذرة معزولة ونفرض أن الطاقات التي تم الحصول عليها باستخدام الكمون الكاذب تساوي الطاقات الذرية الحقيقية أو "كل الإلكترون". ومن ثم فإن الفرضية الرئيسية هي الاعتراف بأن الكمون الكاذب المصمم لذرة معينة قابل للتحويل، أي أن النتائج التي تم الحصول عليها تظل صحيحة إذا تم وضع الذرة في بيئة كيميائية معينة. يعتبر

بناء مثل هذا الكمون حساسًا للغاية بشكل عام، لأنه من الضروري تقدير نصف قطر القطع r_c المناسب [28] واختيار الإلكترونات التي يمكن اعتبارها خاملة كيميائيًا.

II. 2.4.6. تعريف طريقة PAW:

هي تقنية تستخدم في حسابات الهيكل الإلكتروني منذ البداية. إنه تعميم لطرق الموجة المستوية المعززة والخطية الكامنة الزائفة، ويسمح بإجراء حسابات نظرية الكثافة الوظيفية بكفاءة حسابية أكبر.

تميل دوال التكافؤ الموجية إلى التذبذبات السريعة بالقرب من نوى الأيونات بسبب اشتراط أن تكون متعامدة مع الحالات الأساسية؛ هذا الوضع يعتبر مشكلة لأنه يتطلب العديد من مكونات فورييه لوصف الوظائف الموجية بدقة. تعالج طريقة PAW هذه المشكلة عن طريق تحويل وظائف الموجة المتذبذبة إلى وظائف موجية سلسلة تكون أكثر ملاءمة من الناحية الحسابية، وتوفر طريقة لحساب خصائص كل الإلكترون منها.

ملاحظة: غالبًا ما يشار إلى طريقة PAW على أنها طريقة كل الإلكترون ليس بمعنى أنه يتم التعامل مع جميع الإلكترونات بشكل صريح، ولكن بمعنى أن وظائف الموجة الإلكترونية التكافؤ تظل متعامدة على الدول الأساسية.

II. 3.4.6. مدارات PAW:

في طريقة PAW، يتم اشتقاق الدوال الموجية للإلكترون الواحد $|\psi_n\rangle$ من المدارات الزائفة $|\tilde{\psi}_{nk}\rangle$ عن طريق تحويل يعطى بالشكل [29] [30]:

$$\text{II.38} \quad |\psi_n\rangle = |\tilde{\psi}_n\rangle + \sum_i (|\phi_i\rangle - |\tilde{\phi}_i\rangle) \langle \tilde{p}_i | \tilde{\psi}_n \rangle$$

- $|\tilde{\psi}_n\rangle$ هي المدارات الزائفة (PS)، معبرًا عنها في مجموعة أساس موجة مستوية.
- $|\phi_i\rangle$ ، $|\tilde{\phi}_i\rangle$ و $|\tilde{p}_i\rangle$ هي دوال محلية تركز على الذرة.
- الموجات الجزئية لكل الإلكترون هي حلول لمعادلة شرودينغر النسبية العددية الشعاعية للذرة غير المستقطبة:

$$\text{II.39} \quad \left(-\frac{1}{2} \Delta + v_{eff} \right) |\phi_i\rangle = \epsilon_i |\phi_i\rangle$$

ينتج عن التزييف:

$$\langle \tilde{p}_i | \tilde{\phi}_j \rangle = \delta_{ij} \quad v_{eff} \rightarrow \tilde{v}_{eff} \quad |\phi_i\rangle \rightarrow |\tilde{\phi}_i\rangle$$

الموجات الجزئية الزائفة $|\tilde{\phi}_k\rangle$:

$$\text{II.40} \quad \left(-\frac{1}{2}\Delta + \tilde{v}_{eff} + \sum_{ij} |\tilde{p}_i\rangle D_{ij} \langle \tilde{p}_j| \right) |\tilde{\phi}_k\rangle = \epsilon_k \left(1 + \sum_{ij} |\tilde{p}_i\rangle Q_{ij} \langle \tilde{p}_j| \right) |\tilde{\phi}_k\rangle$$

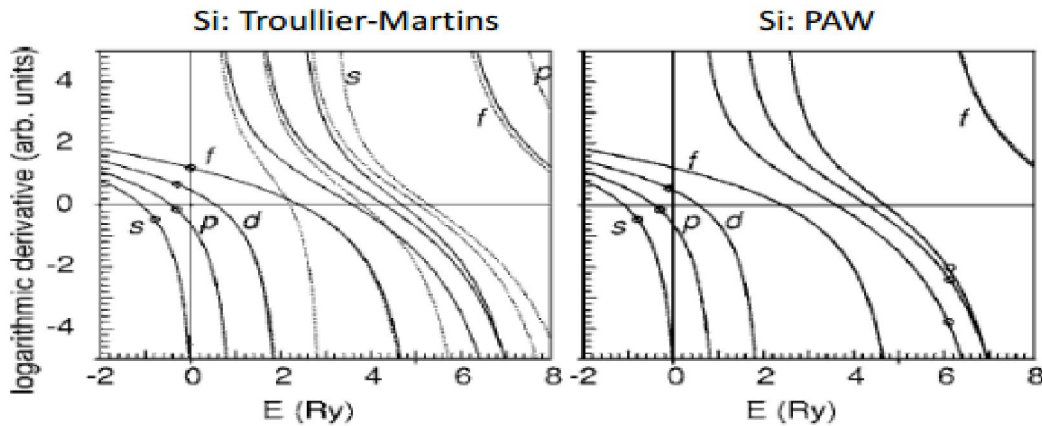
تمثل مع ما يسمى خصائص PAW:

$$Q_{ij} = \langle \phi_i | \phi_j \rangle - \langle \tilde{\phi}_i | \tilde{\phi}_j \rangle$$

$$D_{ij} = \langle \phi_i | -\frac{1}{2}\Delta + v_{eff} | \phi_j \rangle - \langle \tilde{\phi}_i | -\frac{1}{2}\Delta + \tilde{v}_{eff} | \tilde{\phi}_j \rangle$$

كل الالكترون وطيف القيمة الذاتية الزائفة متطابقان!

تتكاثر خصائص تشتت كل الإلكترون على نطاق واسع من الطاقة.



الشكل 3.II: يمثل المشتقات اللوغاريتمية لـ s,p,d,f في ذرة Si [31]

$$\text{II.41} \quad \left. \frac{\partial \tilde{\phi}_l(r, \epsilon)}{\partial r} \frac{1}{\tilde{\phi}_l(r, \epsilon)} \right|_{r=r_c} \approx \left. \frac{\partial \phi_l(r, \epsilon)}{\partial r} \frac{1}{\phi_l(r, \epsilon)} \right|_{r=r_c}$$

ونستخدم تقريب النواة المجمدة:

$$\rho_v(r) = \sum_i a_i |\phi_i(r)|^2$$

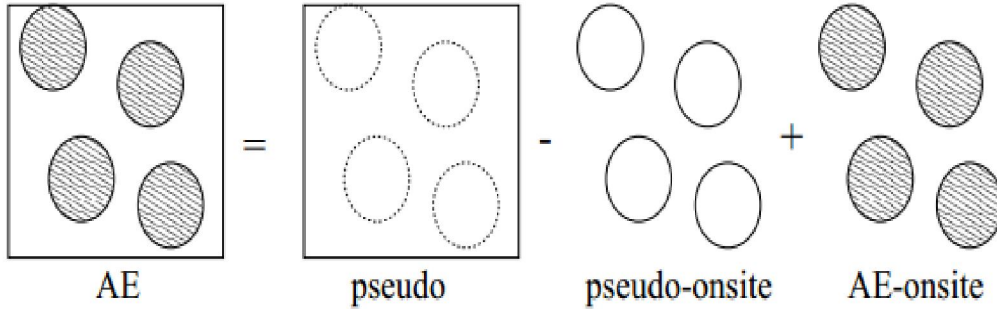
$$\text{II.42} \quad v_{eff}[\rho_v] = v_H[\rho_v] + v_H[\rho_{Zc}] + v_{xc}[\rho_v + \rho_c]$$

$$\tilde{\rho}_v(r) = \sum_i a_i |\tilde{\phi}_i(r)|^2$$

II.43

$$\tilde{v}_{eff}[\tilde{\rho}_v] = v_H[\tilde{\rho}_v] + v_H[\tilde{\rho}_{zc}] + v_{xc}[\tilde{\rho}_v + \tilde{\rho}_c]$$

$$|\Psi_n\rangle = |\tilde{\Psi}_n\rangle - \sum |\tilde{\phi}_{lm\epsilon}\rangle c_{lm\epsilon} + \sum |\phi_{lm\epsilon}\rangle c_{lm\epsilon}$$



الشكل II.4 : تحلل الموجة إلى ثلاث اتجاهات [32]

$$c_{lm\epsilon} = \langle \tilde{p}_{lm\epsilon} | \tilde{\psi}_n \rangle$$

بحيث طابع الموجة:

يمكن تحقيق هذا التحلل في ثلاث مساهمات لجميع الكميات ذات الصلة، على سبيل المثال المدارية - الوظائف الموجية - كثافة الشحنة - الطاقة الحركية - الطاقة الحرارية ...

II.4.4.6. الطاقة الحركية:

على سبيل المثال الطاقة الحركية:

$$E_{kin} = \sum_n f_n \langle \psi_n | -\frac{1}{2} \Delta | \psi_n \rangle$$

II.44

عن طريق إدخال تحويل PAW (حيث $i = lm\epsilon$):

$$|\psi_n\rangle = |\tilde{\psi}_n\rangle + \sum_i (|\phi_i\rangle - |\tilde{\phi}_i\rangle) \langle \tilde{p}_i | \tilde{\psi}_n \rangle$$

II.45

في E_{kin} نتحصل على $E_{kin} = \tilde{E} - \tilde{E}^1 + E^1$ (بافتراض الاكتمال أساس المركز الواحد)

$$\underbrace{\sum_n f_n \langle \tilde{\psi}_n | -\frac{1}{2} \Delta | \tilde{\psi}_n \rangle}_{\tilde{E}} - \underbrace{\sum_{site(i,j)} \sum \rho_{ij} \langle \tilde{\phi}_i | -\frac{1}{2} \Delta | \tilde{\phi}_j \rangle}_{\tilde{E}^1} + \underbrace{\sum_{site(i,j)} \sum \rho_{ij} \langle \phi_i | -\frac{1}{2} \Delta | \phi_j \rangle}_{E^1}$$

بحيث $p_{ij} = \sum_n f_n \langle \tilde{\psi}_n | \tilde{p}_i \rangle \langle \tilde{p}_j | \tilde{\psi}_n \rangle$ هي مصفوفة الكثافة في الموضع [31].

II.5.4.6. المؤثرات المحلية:

إلى أي مؤثر (شبه) محلي A ، يعمل على مدار حقيقي لكل الإلكترون، تربط طريقة PAW مؤثر زائف:

$$II.46 \quad \tilde{A} = A + \sum_{ij} |\tilde{p}_i\rangle (\langle \phi_i | A | \phi_j \rangle - \langle \tilde{\phi}_i | A | \tilde{\phi}_j \rangle) \langle \tilde{p}_j |$$

الذي يعمل على المدار الزائف ، لهذا:

$$II.47 \quad \langle \psi | A | \psi \rangle = \langle \tilde{\psi} | A | \tilde{\psi} \rangle$$

على سبيل المثال مؤثر PS الذي يتوافق مع مؤثر الكثافة $|r\rangle\langle r|$ يعطى كالتالي:

$$II.48 \quad |r\rangle\langle r| + \sum_{ij} |\tilde{p}_i\rangle (\langle \phi_i | r \rangle \langle r | \phi_j \rangle - \langle \tilde{\phi}_i | r \rangle \langle r | \tilde{\phi}_j \rangle) \langle \tilde{p}_j |$$

والكثافة:

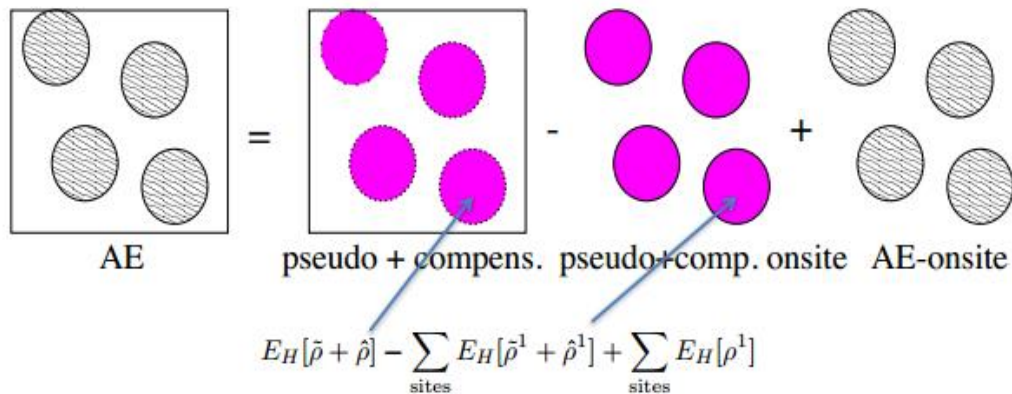
$$\langle \psi | r \rangle \langle r | \psi \rangle = \langle \tilde{\psi} | r \rangle \langle r | \tilde{\psi} \rangle + \sum_{ij} \langle \tilde{\psi} | \tilde{p}_i \rangle (\langle \phi_i | r \rangle \langle r | \phi_j \rangle - \langle \tilde{\phi}_i | r \rangle \langle r | \tilde{\phi}_j \rangle) \langle \tilde{p}_j | \tilde{\psi} \rangle$$

$$II.49 \quad \langle \psi | r \rangle \langle r | \psi \rangle = \tilde{\rho}(r) - \tilde{\rho}^1(r) + \rho^1(r)$$

المؤثرات غير المحلية أكثر تعقيداً.

II.6.4.6. طاقة هارترى The Hartree energy:

لا تحتوي مدارات PS على نفس المعايير مثل مدارات AE داخل مجالات PAW. لوصف بشكل صحيح التفاعلات الكهروستاتيكية طويلة المدى بين المجالات PAW ، يتم تقديم تعويض شحنة ناعمة $\hat{\rho}$ (مثل في طريقة FLAPW):



بهذه الطريقة تتحلل طاقة Hartree (مؤثر غير محلي!) بنفس طريقة مؤثر (شبه) محلي:

II.50

$$E_H = \tilde{E} - \tilde{E}^1 + E^1$$

$\tilde{\rho}$ شحنة زائفة لمركز واحد.

$\hat{\rho}$ شحنة تعويض مركز واحد.

II.7.4.6. طاقة PAW الكلية:

ينطبق نفس التحلل ثلاثي الاتجاهات على الطاقة الإجمالية

$$\tilde{E} = \sum_n f_n \langle \tilde{\psi}_n | -\frac{1}{2} \Delta | \tilde{\psi}_n \rangle + E_{xc} [\tilde{\rho} + \hat{\rho} + \hat{p}_c] + E_H [\tilde{\rho} + \hat{\rho}] + \int \nu_H [\tilde{\rho}_{Zc}] (\tilde{\rho}(r) + \hat{\rho}(r)) d^3r + U(R, Z_{ion})$$

$$\tilde{E}^1 = \sum_{sites} \left\{ \sum_{ij} \rho_{ij} \langle \tilde{\phi}_i | -\frac{1}{2} \Delta | \tilde{\phi}_j \rangle + \overline{E_{xc} [\tilde{\rho}^1 + \hat{p} + \tilde{p}_c]} + \overline{E_H [\tilde{\rho}^1 + \hat{\rho}]} + \int_{\Omega_r} \nu_H [\tilde{\rho}_{Zc}] (\tilde{\rho}^1(r) + \hat{\rho}(r)) d^3r \right\}$$

$$E^1 = \sum_{sites} \left\{ \sum_{ij} \rho_{ij} \langle \phi_i | -\frac{1}{2} \Delta | \phi_j \rangle + \overline{E_{xc} [\rho^1 + p_c]} + \overline{E_H [\rho^1]} + \int_{\Omega_r} \nu_H [\rho_{Zc}] \rho^1(r) d^3r \right\}$$

\tilde{E} يتم تقييمه على شبكة منتظمة.

تم تقييم وظيفة Kohn-Sham في مجموعة أساس موجة مستوية مع شحنة تعويض إضافية لحساب القاعدة غير الصحيحة من المدارات PS ولوصف الكهرباء الساكنة بعيدة المدى بشكل صحيح.

$$\tilde{\rho} = \sum_n f_n \tilde{\psi}_n \tilde{\psi}_n^* \quad \text{كثافة الشحنة الزائفة.}$$

$$\hat{\rho} \quad \text{شحنة التعويض}$$

E^1 و \tilde{E}^1 يتم تقييمهما على الشبكات اللوغاريتمية الشعاعية المتمركزة على الذرة.

تم تقييم طاقات Kohn-Sham باستخدام مجموعات الأساس $\{\phi_i\}$ و $\{\tilde{\phi}_i\}$.

هذه الشروط صحيحة لاختلاف الشكل بين الزائف ووظائف موجة AE.

• ميزات العقدة AE بالقرب من النواة.

• التعمد بين الحالات الأساسية وحالات التكافؤ.

دوال الموجة الزائفة $|\tilde{\psi}_n\rangle$ (الموجات المستوية!) هي الحلول المتسقة ذاتياً لـ:

$$\text{II.51} \quad \left(-\frac{1}{2} \Delta + \tilde{V}_{eff} + \sum_{ij} |\tilde{p}_i\rangle \langle \tilde{p}_j| (D_{ij} + \dots) \right) |\tilde{\psi}_n\rangle = \varepsilon_n \left(1 + \sum_{ij} |\tilde{p}_i\rangle \langle \tilde{p}_j| \right) |\tilde{\psi}_n\rangle$$

بحيث:

$$D_{ij} = \langle \phi_i | -\frac{1}{2}\Delta + v_{eff}^1[\rho_v^1] | \phi_j \rangle - \langle \tilde{\phi}_i | -\frac{1}{2}\Delta + \tilde{v}_{eff}^1[\tilde{\rho}_v^1] | \tilde{\phi}_j \rangle$$

$$II.53 \quad \rho_v^1(r) = \sum_{ij} \rho_{ij} \langle \phi_i | r \rangle \langle r | \phi_j \rangle$$

$$II.54 \quad \tilde{\rho}_v^1(r) = \sum_{ij} \rho_{ij} \langle \tilde{\phi}_i | r \rangle \langle r | \tilde{\phi}_j \rangle$$

$$II.55 \quad \rho_{ij} = \sum_n f_n \langle \tilde{\psi}_n | \tilde{p}_i \rangle \langle \tilde{p}_j | \tilde{\psi}_n \rangle$$

مدارات PS هي الكمية المتغيرة لطريقة PAW!

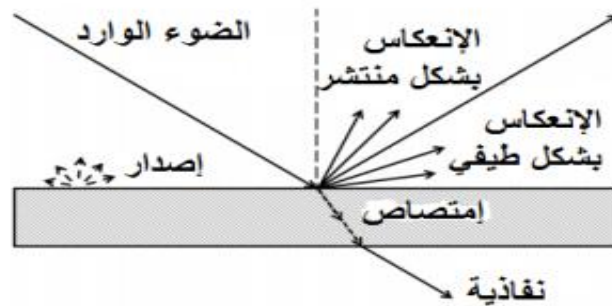
• إذا كانت الموجات الجزئية تشكل أساساً كاملاً (كافياً) داخل مجالات PAW، ستبقى مدارات الإلكترون بالكامل متعامدة مع الحالات الأساسية [31].

II.7. الخصائص الضوئية:

إن دراسة الخصائص الضوئية تزودنا بمعلومات عن نوعية الانتقالات الالكترونية وتركيب عصابات الطاقة، وتحدد هذه الخصائص من خلال تفاعل اشعاع الكهرومغناطيسي مع أشباه النواقل والتي ينتج عنها عدة عمليات كالامتصاص والنفذية والانعكاس والتشتت... (كما يوضح الشكل II.5) وتشارك أنصاف النواقل بالزيادة السريعة للامتصاص وذلك عندما تصبح طاقة الاشعاع الممتص مساوية لطاقة الاشعاع المحضور، التي تفصل بين عصابة التكافؤ وعصابة الناقلية وتدعى بحافة الامتصاص الأساسية وتكون الطاقة محفوظة وفق المعادلة:

II.56

$$A+T+R=0$$



الشكل II.5: امتصاص وانعكاس ونفاذية الضوء [33]

1. الامتصاص : تتم عملية الامتصاص في أنصاف النواقل ضمن المجال الممتد من تحت الأحمر الى فوق البنفسجي [33] وفق الية يتولد فيها أزواج من الالكترونات والثقوب عند طاقات فوتونية أقرب من حد الامتصاص مما يسهل معرفة طاقة المجال المحظور لنصف الناقل .

صنفت ميزات الامتصاص الذاتي الى ثلاثة أقسام هي :

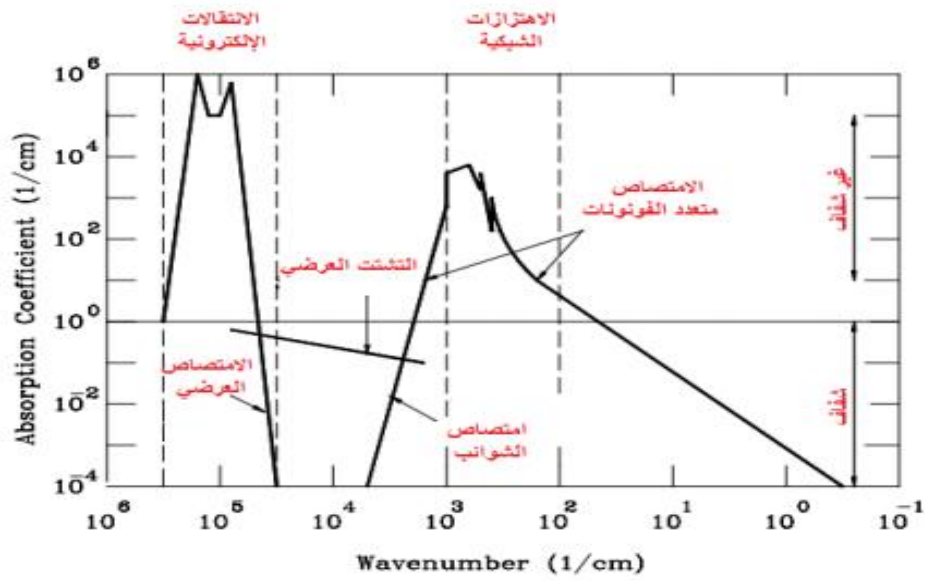
❖ **الامتصاص الالكتروني:** يظهر عند تردد العالي للاشعة IR أي في الضوء المرئي من الطيف ، واذا كان هذا الاشعاع يملك طاقة كافية ينتقل الالكترون من عصابة التكافؤ الى العصابة التوصيل حيث يتم الامتصاص .

❖ **الامتصاص الشبكي أو الفوتوني** ويظهر عند الترددات المنخفضة من منتصف مجال الأشعة تحت الحمراء، تحدد خصائص الامتصاص الشبكي حد شفافية أطوال الموجة الكبيرة وهي ناتجة عن التفاعل الحاصل بين اهتزازات الذرات المثارة حراريا والمكونة للشبكة البلورية .

الامتصاص بحوامل الشحنات الحرة فإنه يحدث نتيجة الانتقالات الالكترونية بين السوية الأساسية والسوية النهائية ضمن عصابة الطاقة الواحدة ويرافق هذا الامتصاص ظاهرة التشتت الناتجة عن اهتزازات الفوتونات الضوئية، ويظهر هذا عند أنصاف النواقل التي تتمتع بامتصاصية ونفوذية ضعيفة. ولكي تكون هذه المواد شفافة في المناطق الواقعة بين الامتصاصين الشبكي والالكتروني فإن الشعاع الوارد يجب أن يملك تردد أقل من التردد الموافق لطاقة المجال المحضور $E_g = \frac{hv}{\lambda}$ ، ويعرف حد الامتصاص الالكتروني بذييل (Urbach)، حيث يزداد معامل الامتصاص أسيا وفق علاقة بوك-بور:

II.57

$$\frac{\partial \ln \alpha}{\ln hv} = \frac{1}{KT}$$



الشكل II.6: خصائص الامتصاص الضوئي لبلورة نموذجية [33].



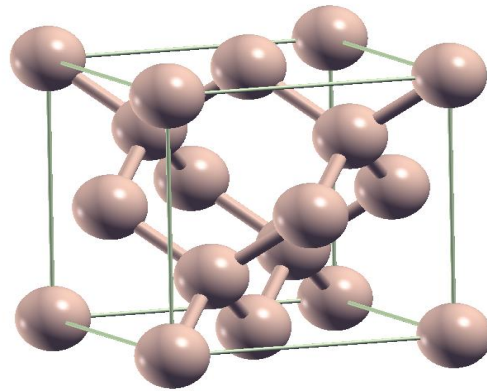
الفصل الثالث
النتائج والمناقشة

تمهيد:

يهتم هذا الفصل بدراسة نظرية باستعمال وسائط رقمية لتأكيد تأثير إحدى العوامل الذاتية لذرة السيلكون - التي تكون الوحدة الأساسية للخلية الكهروضوئية- على تناقص المردود الطاقوي لهذه الأخيرة من خلال تعرضها للفوتونات الضوئية، وتلعب الفوتونات من خلال تفاعل الكترون- فوتون دورا أساسيا في العديد من الخصائص الأساسية للمواد الصلبة مثل الحرارة النوعية والتوصيل الكهربائي ودراسة النقل والخصائص الضوئية في أشباه النواقل. من خلال هذا الفصل يتم إظهار البنية البلورية والخصائص الإلكترونية لبلورة السيلكون ويليه إظهار كيفية التحقق من النتائج المتحصل عليها ويختم الفصل بإظهار للنتائج المتحصل عليها والتي تثبت حقيقة علمية مهمة وهي تأثير انزياح البعد الشبكي بسبب اختلاف طول الموجة الممتصة على فجوة الطاقة محليا ومردود الخلية الكهروضوئية عموما.

1.III. البنية البلورية:

السيليكون يتبلور ضمن بنية الألماس حيث أن المدار الخارجي يحتوي على أربعة إلكترونات



الشكل (1.III) البنية البلورية لبلورة السيليكون

مما يعني أنه بحاجة الى 4 الكترونات للوصول الى حالة التشبع وحقيقة أن ذرات السيليكون أثناء ارتباطها لتكوين المادة فإن مدارها الخارجي يحتوي على ثمانية الكترونات ستكون الكترونات تساهمية من الذرات الأربعة المجاورة هذا الترتيب للذرات المجاورة يسمى بالتكوين البلوري.

III.2. التوزيع الالكتروني للسيليكون:

يمتلك السيليكون 14 الكترونا ويصنف ضمن المجموعة الرابعة في الجدول الدوري والجدول التالي يوضح التوزيع الالكتروني للسيليكون:

$1s^2$	$2s^2$	$2p^6$	$3s^2$	$3p^6$	$3d^{10}$
2	8		4		

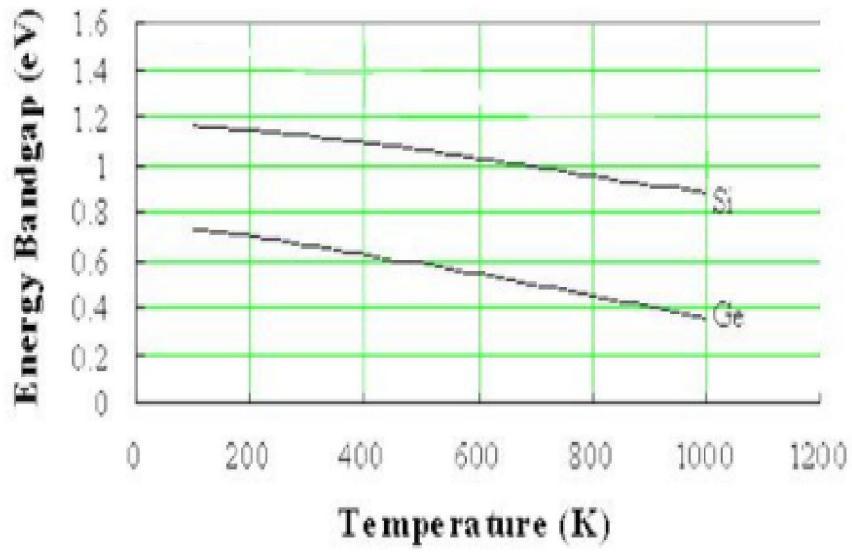
III.3. الخصائص الالكترونية لبلورة السليكون:

سنقوم بعرض ومناقشة عصابات الطاقة وكثافة الحالات لبلورة سيليكون مع تحديد الطبيعة الالكترونية في مجال طاقي معين.

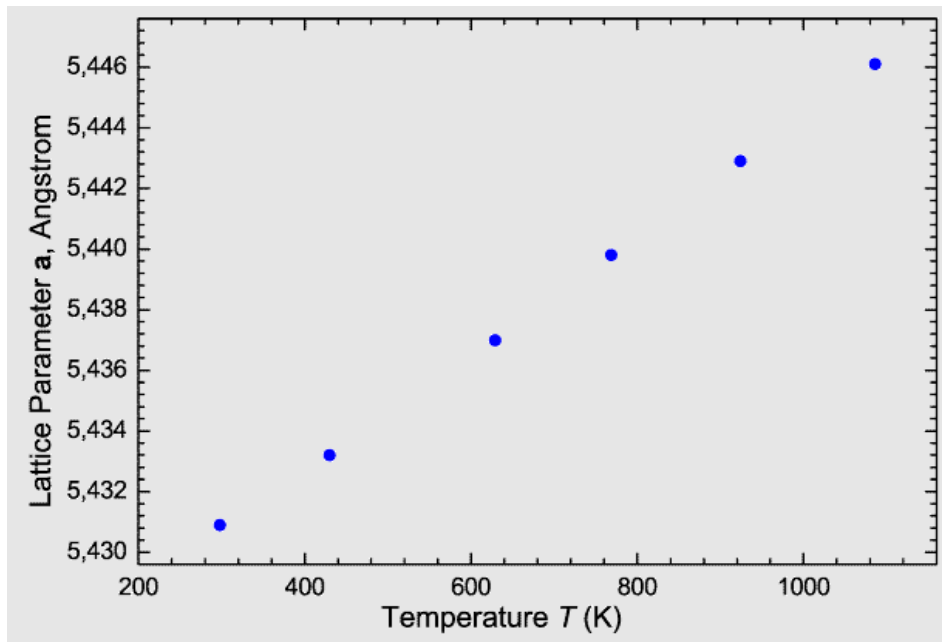
❖ فجوة الطاقة:

تميل فجوة الطاقة لأشبه النواقل إلى الانخفاض مع زيادة درجة الحرارة. يمكن فهم هذا السلوك بشكل أفضل إذا اعتبر المرء أن التباعد بين الذرات يزداد عندما يزداد اتساع الاهتزازات الذرية بسبب زيادة الطاقة الحرارية. يتم قياس هذا التأثير بواسطة معامل التمدد الخطي للمادة. تؤدي زيادة التباعد بين الذرات إلى تقليل الإمكانيات التي تسمح للإلكترونات في المادة، مما يقلل بدوره من عرض فجوة الطاقة. يؤدي التعديل المباشر للمسافة بين الذرات، مثل تطبيق إجهاد ضغط عالٍ (شد)، أيضاً إلى زيادة (نقص) فجوة الحزمة.

تم تحديد العلاقة بين درجة الحرارة وفجوة نطاق الطاقة بشكل تجريبي وكذا بين درجة الحرارة و البعد الشبكي لبلورة السيليكون كما هو موضح في المنحنيين التاليين:



الشكل (2.III) تأثير الفجوة على درجة الحرارة للسيليسيوم والجرمانيوم

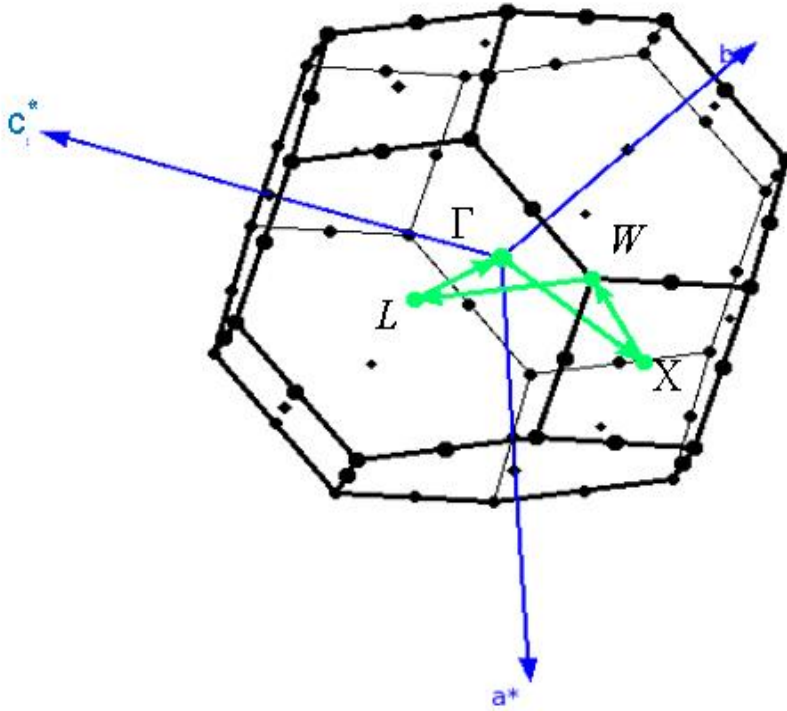


الشكل (3.III) تأثير تغير البعد الشبكي على درجة الحرارة للسيليكون [34]

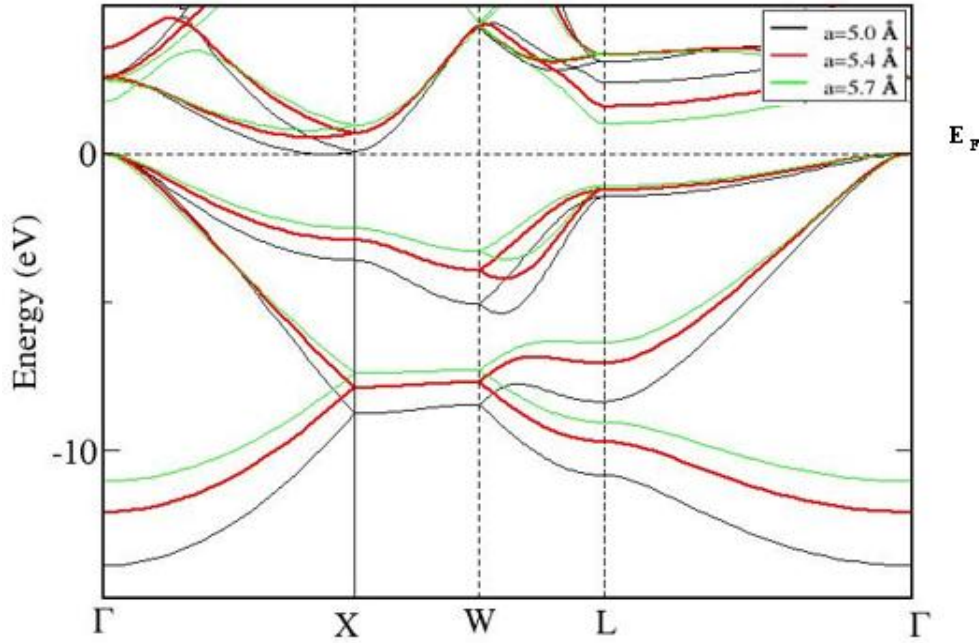
1.3.III. بنية عصابة الطاقة الإلكترونية لبلورة السيليكون:

عصابة الطاقة تمثل كل حالات الطاقة الممكنة للإلكترونات بدلالة شعاع الموجة k في الشبكة المعكوسة، وللتبسيط يتم التعامل فقط مع الاتجاهات ذات التناظر العالية المختارة في منطقة بريلوان الاولى (Γ, X, W, L) وهي تحدد الطبيعة الفيزيائية للمواد. علما أن منطقة بريلوان الاولى للبنية المكعبة متمركزة الوجة المعرفة في فضاء الشبكة المعكوسة والمميزة بنقاط عالية التناظر:

$$L\left(\frac{1}{2}; \frac{1}{2}; \frac{1}{2}\right) \quad W\left(\frac{1}{2}; \frac{1}{4}; \frac{3}{4}\right) \quad X\left(\frac{1}{2}; 0; \frac{1}{2}\right) \quad \Gamma(0; 0; 0)$$



الشكل (4.III) منطقة بريلوان الاولى مرفقة بنقاط عالية التناظر.



الشكل (5.III) عصابات الطاقة الالكترونية لبلورة السليكون

يوضح الشكل (5.III) عصابات الطاقة الالكترونية لبلورة السليكون المتحصل عليها من خلال الدراسة النظرية في حدود المجال الطاقوي $[-14\text{eV}; 4]$.

بالنظر الى الشكل فإن الخط الأسود يوافق البعد الشبكي $a = 5\text{Å}$ و الأحمر يوافق البعد الشبكي $a = 5,4\text{Å}$ والاخضر يوافق البعد الشبكي $a = 5,7\text{Å}$ من خلال النتائج المتحصل عليها نلاحظ:

- عدم وجود تداخلات بين عصبتي التوصيل والتكافؤ مما يشير الى وجود فجوة طاقوية توضح خاصية شبه ناقلة للسليكون.
- أعلى نقطة لعصابة التكافؤ تقع عند المتجه Γ في حين أن أدنى نقطة لعصابة التوصيل تقع عند المتجه X والاختلاف في المتجه k يدل على أن انتقال الالكترون غير مباشر، وبالتالي فإن نوع الفجوة في بلورة السليكون غير مباشرة gap indirect .
- وجود قيمة لفجوة الطاقة E_g تختلف حسب البعد الشبكي a بحيث:

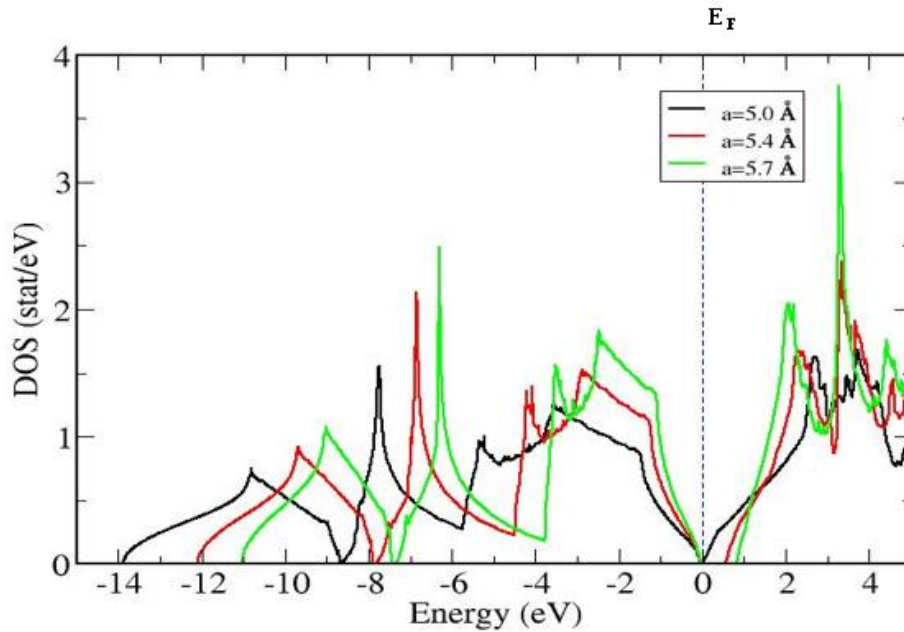
$a(\text{Å})$	5	5,4	5,7
$E_g(\text{eV})$	0	0,8	0,9

$$E_g(a = 5\text{Å}) < E_g(a = 5,4\text{Å}) < E_g(a = 5,7\text{Å})$$

وبالتالي يمكن القول أن انزياح البعد الشبكي لبلورة السيليكون يؤثر على قيمة فجوة الطاقة ومنه فإن نتائج عصابات الطاقة لبلورة السيليكون هي ترجمة لتأثير الشدة الضوئية على البعد الشبكي a للسيليكون وبالتالي فهي تفسر تناقص مردود الخلايا الشمسية.

2.3.III. كثافة الحالات لبلورة السيليكون:

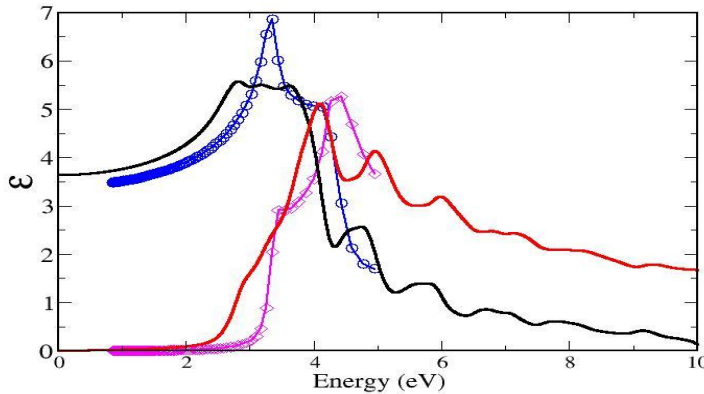
تعرف كثافة الحالات على أنها عدد الحالات الإلكترونية التي يمكن شغلها ولها طاقة E . لتحديد أصل الحالات التي شكلت عصابات التكافؤ وعصابات التوصيل ومعرفة كيفية توزيع الإلكترونات، نقوم بتحليل كثافة الحالات المتحصل عليها من الدراسة النظرية والممثلة في الشكل (6.III).



الشكل (6.III) كثافة الحالات لبلورة السيليكون .

بالنظر الى الشكل فإن الخط الأسود يوافق البعد الشبكي $a=5\text{\AA}$ و الأحمر يوافق البعد الشبكي $a=5,4\text{\AA}$ والاخضر يوافق البعد الشبكي $a=5,7\text{\AA}$ من خلال النتائج المتحصل عليها نلاحظ أنه عند مستوى فيرمي $E_F - E$ وجود فاصل طاقي يقدر في حالة البعد الشبكي $E_g(a=5,7\text{\AA})=0,9\text{eV}$ و $E_g(a=5,4\text{\AA})=0,8\text{eV}$ وغيابه في حالة البعد الشبكي $a=5\text{\AA}$ نفسر ذلك بتناقص شدة امتصاص الفوتونات تدريجيا حتى تنعدم عند البعد الشبكي $a=5\text{\AA}$ وهذا دليل على تأثير انزياح البعد الشبكي لبلورة السيليكون على فجوة الطاقة.

3.3.III. تغير ثابت العزل الكهربائي بدلالة طاقة الموجة الضوئية الممتصة لذرة السيلكون:



الشكل (7.III) المقارنة بين النتائج النظرية والنتائج التجريبية لتغير ثابت العزل الكهربائي بدلالة طاقة الموجة الضوئية الممتصة.

يوضح الشكل (7.III) مقارنة بين النتائج النظرية المتحصل عليها من خلال الدراسة النظرية والنتائج التجريبية السابقة المتحصل عليها في المرجع [35] و [36] لتغير ثابت العزل الكهربائي بدلالة الطاقة.

بالنظر إلى الشكل فإن الخط الذي يحوي دوائر باللون الأزرق يمثل الجزء الحقيقي لثابت العزل الكهربائي والبنفسجي يمثل الجزء التخيلي لثابت العزل الكهربائي والمتحصل

عليهما تجريبيا من خلال المرجعين السابقين والنتائج النظرية تظهر على شكل خطوط مستمرة باللونين الأسود (الجزء الحقيقي لثابت العزل الكهربائي) والأحمر (الجزء التخيلي لثابت العزل الكهربائي).

ويتبين من خلال المقارنة بين النتائج التجريبية والنظرية أنه :

- هناك تطابق شبه كامل بين منحى الجزء التخيلي لثابت العزل الكهربائي فيما يخص النتائج التجريبية والنظرية، وكما هو موضح لاحقا فإن الجزء التخيلي لثابت العزل الكهربائي يمثل الطاقة الضوئية الممتصة أو بمعنى أوضح يمثل الموجة الضوئية الممتصة في حين أن الجزء الحقيقي يمثل الموجة المنكسرة.
- يظهر انزياح طفيف بين منحى المنحنيين المعبران عن الجزء التخيلي لثابت العزل الكهربائي في الشكل السابق، ويرجع ذلك للشروط التجريبية والتي تختلف عن شروط المحاكاة، وتقدر قيمة الانزياح بحوالي من $0,3 \text{ eV}$ إلى $0,5 \text{ eV}$ والتي لا تؤثر على الهدف المتوخى من المقارنة الحالية.

من خلال ماسبق تؤكد المقارنة بين النتائج التجريبية والنظرية صحة النموذج المدروس من خلال المحاكاة ومن ثم الاعتماد على صحة النتائج اللاحقة وخاصة فيما يخص محل الدراسة والمتمثل في تأثير الموجة الممتصة وانزياح البعد الشبكي لبلورة السيلكون على فجوة الطاقة لذرة السيلكون، والتي تعبر صراحة عن إحدى العوامل الذاتية لتناقص المردود الطاقوي للخلية الكهروضوئية.

III. 4. الخصائص الضوئية لبلورة السيلكون:

❖ ثابت العزل الكهربائي بدلالة الطاقة لبلورة السيلكون:

إن عملية فقدان الطاقة في المادة تحدث بسبب التفاعل بين الضوء وشحنات الوسط نتيجة امتصاص هذه الشحنات طاقة الحزمة الضوئية الساقطة عليها، وما ينتج عنه من استقطاب لشحنات ذلك الوسط وهذا الاستقطاب يوصف بثابت العزل الكهربائي المعقد للوسط (ϵ) وهو يمثل من الناحية الفيزيائية استجابة الكثرونات المادة للمجال المغناطيسي الساقط.

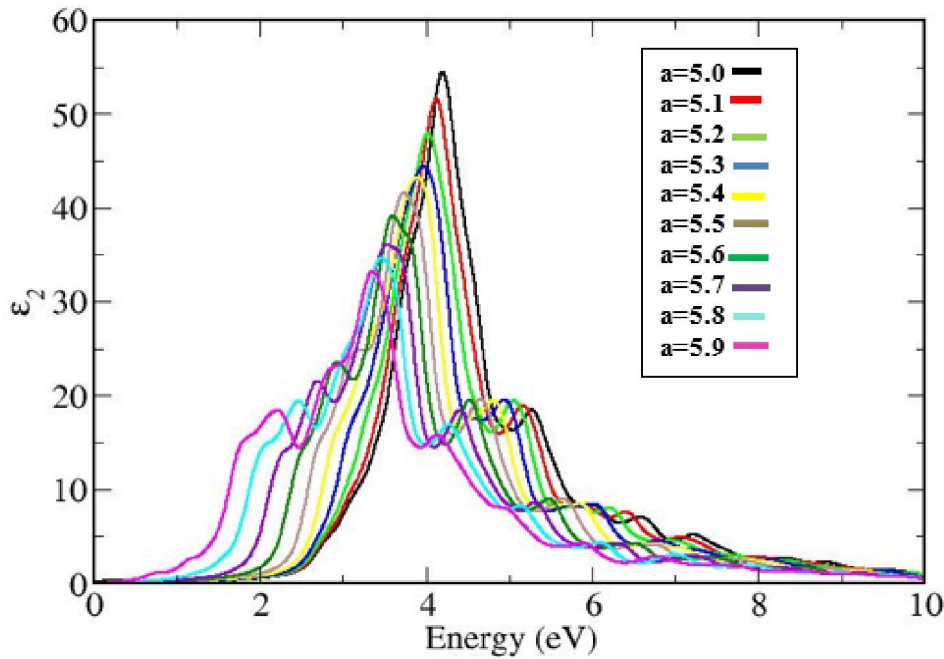
يمكن معرفة الخواص الضوئية للمادة بمعرفة دالة السماحية (ثابت العزل الكهربائي) حيث:

$$\text{III.1} \quad \varepsilon(\omega) = \varepsilon_1(\omega) + i\varepsilon_2(\omega)$$

مع: $\varepsilon_1(\omega)$ الجزء الحقيقي يمثل حالة انكسار الضوء داخل المادة.

$\varepsilon_2(\omega)$ الجزء التخيلي يمثل حالة امتصاص المادة للضوء.

III.1.4. الجزء التخيلي لثابت العزل الكهربائي لبلورة السيليكون:



الشكل (8.III): تغير الجزء التخيلي لثابت العزل الكهربائي للسيليكون بدلالة طاقة فوتون.

يوضح الشكل (8.III) النتائج النظرية المتحصل عليها من خلال دراسة تغير الجزء

التخيلي لثابت العزل الكهربائي والمعبر عن حالة امتصاص الموجة بدلالة الطاقة في المجال

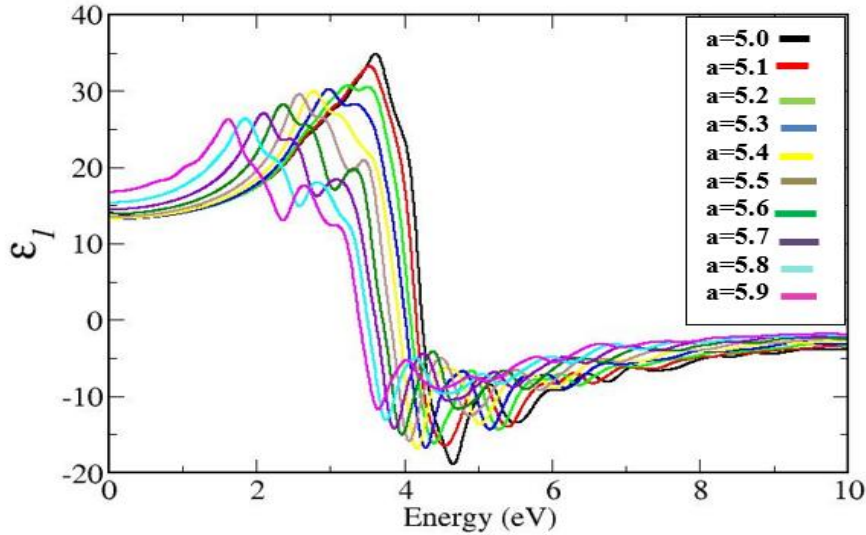
$[10; 2eV]$ أي في المجال الموجي $[620; 124nm]$.

بالنظر الى الشكل فإن الخطوط الملونة من الأسود الى البنفسجي تمثل قيم مختلفة للبعد

الشبكي ومن خلاله نلاحظ أن:

- يأخذ الجزء التخيلي لثابت العزل الكهربائي للبعد الشبكي $a = 5\text{\AA}$ قيمة أعظمية عند $E = 4\text{eV}$ أي عند الطول الموجي $\lambda = 310,3\text{nm}$ (منطقة الأشعة فوق بنفسجية) نفس ذلك بحدوث امتصاص عالي للفوتونات وانتقال الإلكترونات بسهولة من حزمة التكافؤ الى حزمة التوصيل.
- يظهر انزياح بين منحى المنحنيات المعبرة عن الجزء التخيلي بزيادة البعد الشبكي لبلورة السيليكون حيث يتناقص امتصاص للطاقة تدريجيا من $E = 4\text{eV}$ وصولا الى $E = 2\text{eV}$ أي من الطول الموجي $\lambda = 310,3\text{nm}$ الى الطول الموجي $\lambda = 620\text{nm}$ (انزياح نحو منطقة المجال المرئي بالتحديد عند اللون الأحمر) ونفس ذلك بانتقال ضعيف للإلكترونات من عصابة التكافؤ إلى عصابة التوصيل ومنه انخفاض في الموصلية الكهربائية، مما يسبب تناقص في مردود الخلية السيليكونية.

III.2.4. الجزء الحقيقي لثابت العزل الكهربائي لبلورة السيليكون :



الشكل (9.III):تغير الجزء الحقيقي لثابت العزل الكهربائي للسيليكون بدلالة طاقة الفوتون

يوضح الشكل (9.III) النتائج النظرية المتحصل عليها من خلال دراسة تغير الجزء الحقيقي لثابت العزل الكهربائي والمعبر عن حالة انكسار الموجة بدلالة الطاقة.

بالنظر الى الشكل فإن الخطوط الملونة من الأسود الى البنفسجي تمثل قيم مختلفة للبعد الشبكي ومن خلالها يتبين أن:
 الجزء الحقيقي يأخذ قيمة أعظمية من أجل البعد الشبكي $a = 5\text{Å}$ عند الطاقة $E = 3,5\text{eV}$ (أي عند الطول الموجي $\lambda = 354,6\text{nm}$) ويتبع ذلك انزياح بين منحنى المنحنيات المعبرة عن الجزء الحقيقي بزيادة البعد الشبكي ونفسر ذلك بتناقص نفاذية الضوء داخل السيليكون تدريجيا وصولا الى الطاقة ذات القيمة $E = 1,5\text{eV}$ (أي عند الطول الموجي $\lambda = 827,5\text{nm}$).

5.III. خلاصة :

من خلال هذا المحور يتبين جليا أن أحد أهم العوامل الذاتية لبلورة السيليكون التي تؤثر في تناقص امتصاص للطاقة تدريجيا من $E = 4\text{eV}$ وصولا الى $E = 2\text{eV}$ أي من الطول الموجي $\lambda = 310,3\text{nm}$ الى الطول الموجي $\lambda = 620\text{nm}$ (انزياح نحو منطقة المجال المرئي بالتحديد عند اللون الأحمر)، ويرجع السبب أساسا إلى التفاعل بين البعد الشبكي المنزاح والطاقة الضوئية الممتصة.

وتمكننا هذه النتائج من تفسير عملية تناقص المردود الطاقوي للخلية الكهروضوئية المشار إليه في العديد من الأبحاث والتي اهتمت بالجانب البيئي فقط والعوامل الخارجية [37] والتي تؤثر فعليا تناقص المردود الطاقوي للخلية الكهروضوئية من خلال تعرضها لأشعة الشمس على المستوى الطويل وتباين نسبة التناقص من منطقة لأخرى.

وبالنظر لجميع الأبحاث المدرجة في هذا المجال، فانه لم يتم على الإطلاق التعرض للعوامل الداخلية أو الذاتية، وفي هذا الإطار فإن هذا المحور يعالج فكرة مستجدة لدراسة أداء تناقص المردود بناء على معرفة البنية الأساسية للخلية الكهروضوئية، ومختلف ديناميكيات التأثير الضوئي والحراري على التصرف الطاقوي لهاته البنية.



الخلاصة
العامّة

خلاصة عامة

منذ القدم والمحاولات مستمرة للاستفادة من الطاقة الشمسية بطرق عديدة ومع التطور التكنولوجي والثورة العلمية في الميادين الفيزيائية المختلفة، فتحت أفقا علمية جديدة في استغلال الطاقة الشمسية خاصة في المجال الالكتروني والكهربائي وقد ترجمت الأبحاث المتتالية لإمكانية استغلال الطاقة الشمسية كمصدر للطاقة الكهربائية من خلال تقنية الألواح الشمسية. وفي هذا الصدد أنجزت عدة دراسات حول تقنية الألواح الشمسية في مختلف الاختصاصات، مما سمح بالإدراك العلمي الفعال لمحتوى الخلية الكهروضوئية ومحاولة تحسين أداءها في ظل الظروف البيئية المختلفة من منطقة لأخرى وتحديد العوامل التي تتحكم في مردود هذه الألواح الشمسية، والتي تكون إما عوامل ذاتية خاصة بالمادة المكونة للخلية الكهروضوئية ذاتها والتقنية المستعملة في ذلك أو عوامل خارجية.

وفي هذا الإطار قمنا بدراسة أحد العوامل الذاتية لخلية شمسية سليكونية أحادية البلورة من خلال تأثير السليكون بعامل درجة الحرارة، واعتمدنا في ذلك على دراسة نظرية تطلبت انجاز محاكاة باستعمال برنامج (VASP) الذي يعتمد على مجموعة من الحسابات العددية عن طريقة الدالة الوظيفية.

ونستنتج من خلال هاته الدراسة، أن أحد أهم العوامل الذاتية لبلورة السليكون التي تؤثر في تناقص امتصاص للطاقة تدريجيا من $E = 4\text{eV}$ وصولا الى $E = 2\text{eV}$ أي من الطول الموجي $\lambda = 310,3\text{nm}$ إلى الطول الموجي $\lambda = 620\text{nm}$ ، مما يؤكد تأثير شدة الطيف الضوئي على مردود الخلية الكهروضوئية، والثابت علميا أنه تختلف شدة الإشعاع بالنسبة لكل طول موجي من منطقة لأخرى، ومن الصباح إلى المساء أيضا، ويرجع السبب أساسا إلى التفاعل بين البعد الشبكي المنزاح والطاقة الضوئية الممتصة، وتبقى دراسة مهمة وجب أن تتبع هاته الدراسة تبين مرونة التأثير من عدمه، بمعنى امتداد تأثير الانزياح للبعد الشبكي أو رجوع الحال إلى مكان عليه .

وتمكننا هذه النتائج من تفسير عملية تناقص المردود الطاقوي للخلية الكهروضوئية المشار إليه في العديد من الأبحاث والتي اهتمت بالجانب البيئي فقط والعوامل الخارجية التي تؤثر فعليا تناقص المردود الطاقوي للخلية الكهروضوئية من خلال تعرضها لأشعة الشمس على المستوى الطويل وتباين نسبة التناقص من منطقة لأخرى

ولتحقيق هذه الدراسة قمنا بإعتماد ديناميكية العدد الشبكي لبلورة السليكون في مجال معين بالاعتماد على محاكاة تغير نتيجة الظروف الجوية والتي تمتد وتقلص البعد الشبكي لبلورة السليكون، و توصلنا إلى نتيجة تغير منحنيات عصابات الطاقة بسبب تغير البعد الشبكي للسليكون هذا ما أدى إلى نقصان مردود الخلية الكهروضوئية والذي يترجم انخفاض مستويات الطاقة، وكذا يمكن للامتصاصية أن تتم عند طاقات أخفض وهذا يعود إلى اهتزازات الذرات في الشبكة البلورية وبالتالي يؤثر البعد الشبكي على الامتصاصية في بلورة السليكون.

ومنه على ضوء النتائج المتوصل إليها بفضل طريقة المحاكاة، استطعنا التنبؤ بعلاقة وتأثير العوامل الذاتية لخلية كهروضوئية على مردود هذه الأخيرة دون اللجوء الى اقتناء عتاد عملي أو بعض التعقيدات في العمل التجريبي ومن هذا المنطلق يمكننا استغلال برامج وتطبيقات أخرى كبديل عن المجال التطبيقي لإيجاد حلول ولو جزئية عن مواضيع بحث تشغل فكر الباحثين.

وكاقترح لدرسات لاحقة من الأهمية دراسة تأثير أمواج الطيف الضوئي كل على حدى على انزياح البعد الشبكي ومن ثم التنبؤ بتأثير مختلف الأمواج على مردود الخلية الكهروضوئية ومدى استمرارية التأثير من عدمه.

المراجع

- [1] <https://www.noor-book.com/pdf-كتاب-الخلايا-الشمسية>
- [2] S, Poignant. L'Energie photovoltaïque. Rapport d'information. Assemblée Nationale Constitution du 4 Octobre 1958 Treizième Législature. (2009).
- [3] د. أ، أحمد العاني. الخلايا الكهروضوئية. مجلة العلوم و التقنية. العدد 34. الرياض. ص 12. (1990).
- [4] د، كاميليا يوسف محمد . الطاقة الكهروشمسية. دار الكتب والوثائق القومية. مصر. ص60. (2016).
https://drive.google.com/file/d/1ncUaRFr53FcUWmWTFggwQHPLom0-olRZ/view?usp=embed_facebook
- [5] A, MEDJHED. Extraction des paramètres des cellules solaires en utilisant le modèle à deux exponentielles. Thèse magister. Faculté des sciences. Université Ferhat Abbas- Sétif. p20. (2011)
- [6] د. بسعود يوسف عياش. تكنولوجيا الطاقة البديلة . المجلس الوطني للثقافة والعلوم. الكويت. ص 233. (1990).
- [7] A, Halouane. Modélisation du transfert radiatif dans les strates supérieures d'un module photovoltaïque. Thèse master. Faculté des sciences de l'ingénieur. Université M'Hamed Bougara- Boumerdes. (2016).
- [8] Fritts. On a new form of selenium photocell. American Journal of Science. 97. (1883).
- [9] ب، صبحي أحمد. كتاب الخلايا الشمسية الفولطاضوئية. ص68،62
<https://books-library.net/free-134117401-download>
- [10] B, Equer. Energie solaire photovoltaïque. volume1 : physique et technologie de la conversion photovoltaïque. 1^{ère} édition. ELLIPES. Paris. (1993).
- [11] G, Gomard. Cristaux photoniques pour le contrôle de l'absorption dans les cellules solaires photovoltaïques silicium ultramine. Thèse de doctorat. École Doctorale Matériaux de Lyon- France (2012).
- [12] K, Bouzidi. Etude comparatives des méthodes d'extraction des paramètres des cellules solaires. Mémoire de magister. Faculté des sciences. Université de Sétif. Algérie. (2007).
- [13] A, Hamzaoui. Effet de l'illumination sur les paramètres caractéristiques des cellules solaires au silicium polycristallin. Thèse magister. Faculté des sciences. Université Ferhat Abbas- Sétif. p20. (2012).

- [14] M, Salmi. Technologies photovoltaïques. Faculté des sciences. Université Mohamed Boudiaf -M'sila.
- [15] سماحي سهيلة. فعالية أداء الخلايا الكهروضوئية في ورقة وتأثير شدة الإشعاع الشمسي والعوامل المناخية عليها. مذكرة ماستر أكاديمي. جامعة قاصدي مرباح. ورقة. ص33. (2016).
- [16] A, BAADJLI, CHERGUI. Extraction des Paramètres du Module Photovoltaïque. thèse master académique. Faculté des sciences. Université Mohamed Boudiaf- M'sila. p14. (2019).
- [17] K, Jäger. I, Olindo. Arno H, M, Smets. René A, C, M, M, van Swaij. M, Zeman. Solar Energy. University of Technology. p146, 252. (2014)
- [18] <https://nasrsolar.com/الألواح-الشمسية/>
- [19] A, Ammar. Etude et évaluation les performances de dégradation des modules photovoltaïques. Master Académique. Faculté des sciences. Université d'Adrar. p25, 26. (2018).
- [20] بري السعدي. مساهمة في دراسة الخصائص الفيزيائية لـ X_2GdIn (X = Au, Ag, Cu). مذكرة دكتوراه. جامعة سطيف1. الجزائر. ص10،9. (2013).
- [21] J, Hafner. AB-Initio simulations in materials science. Sensengasse 8/12. A-1090. Austria. p,13
- [22] A, D, Becke. Perspectives: Fifty years of density-functional theory in chemical physics. The Journal of chemical physics. 140 N18:18A301. (2014).
<https://aip.scitation.org/doi/full/10.1063/1.4869598>
- [23] مروة رزاق زوازي. دراسة بنيوية ومطيافية لمركب ثنائي كلورو ميثيل أنيلين باستخدام نظرية الدالة الوظيفية للكثافة. مذكرة ماستر أكاديمي. جامعة الشهيد حمه لخضر بالوادي. الجزائر. ص10. (2019).
- [24] J, Hafner. FOUNDATIONS OF DENSITY-FUNCTIONAL THEORY. 15. Sensengasse 8/12. A-1090. Austria. p12.
- [25] G, Kresse. M, Marsman. J, Furthmüller. VASP the GUIDE. Vienna. October 29. p12, 13. (2018)
<http://cms.mpi.univie.ac.at/vasp/vasp.pdf>
- [26] VASP Tutorial: Dielectric properties and the Random-Phase-Approximation (RPA) . Faculty of Physics and Center for Computational Materials Science. Vienna. Austria.
- [27] <https://fr.wikipedia.org/wiki/Pseudo-potentiel>

- [28] François-Xavier Coudert. DFT with plane waves, pseudopotentials. Tutoriel CPMD/CP2K .(2010).
- [29] M, Gajdoš. K, Hummer. G, Kresse. Linear optical properties in the projector-augmented wave methodology. Phys .Rev. B2006, 73,045112.
- [30] P, E, Blöchl. Projector augmented-wave method. Physical Review B, vol. 50, n° 24, 17953-17979. (1994).
<http://www.arxiv.org/abs/cond-mat/0201015>
- [31] VASP: Basics (DFT, PW, PAW,...). Faculty of Physics and Center for Computational Materials Science. Vienna. Austria.
- [32] G, Kresse. Pseudopotentials (Part II) and PAW. Sensengasse 8.A-1090. Austria. p23.
- [33] ع. عثمان حمود العبوش. دراسة الخصائص الضوئية لطبقات رقيقة من أكسيد الزنك/فضة/أكسيد الزنك. مذكرة ماجستير. جامعة البعث. سوريا. ص25،27. (2018)
- [34] W.M, Yim, R.J. Paff, J. Appl. Phys. 45, 1456-1457. (1974)
- [35] G, Barbarino, R, Asmundis "Silicon Photo Multipliers Detectors Operating in Geiger Regime: an Unlimited Device for Future Applications", Photodiodes - World Activities in 2011.
- [36] Martin A. Green and Mark J. Keevers "Optical Properties of Intrinsic Silicon at 300 K" PROGRESS IN PHOTOVOLTAICS: RESEARCH AND APPLICATIONS, VOL 3, 189-192 (1995)
- [37] Kichou S, Silvestre S, Nofuentes G, Torres-Ramírez M, Chouder A, Guasch D. "Characterization of degradation and evaluation of model parameters of amorphous silicon photovoltaic modules under outdoor long term exposure". Energy 2016; 96:231e41.

ملخص:

قمنا في هذه المذكرة بدراسة تأثير أحد العوامل الذاتية لخلية كهروضوئية عن طريق دراسة تأثير انزياح البعد الشبكي لبلورة سليكونية أحادية على المردود الطاقوي لهذه الأخيرة. واعتمدنا في ذلك على حسابات نظرية تركز على نظرية الكثافة الوظيفية DFT وبرنامج محاكاة (VASP) ومن خلال تفسير وتحليل النتائج النظرية التي كانت جيدة نسبياً مقارنة مع الحالة الساكنة عند غياب انزياح البعد الشبكي، ومن ثم تم التنبؤ بتأثير البعد الشبكي a وطاقة الموجة الممتصة على طاقة الفجوة لبلورة السليكون ومما يؤثر بدوره على تناقص مردود الخلية الكهروضوئية.

الكلمات المفتاحية: بلورة السليكون - خلية كهروضوئية - VASP-DFT - البعد الشبكي - المردود.

Summary:

In this work, we studied the effect of one of the intrinsic factors of a photovoltaic cell by studying the effect of the mesh shift of a silicon single crystal on the energy efficiency of the latter. For this, we relied on theoretical calculations based on density functional theory (DFT) and simulation program (VASP) and through the interpretation and analysis of theoretical results, which were relatively good compared to the static state in the absence of the mesh dimension shift, then the effect of the mesh dimension a and the absorbed wave energy in energy Gap of silicon which effect on the photovoltaic yields was predicted.

Key words: silicon crystal, photovoltaic cell, DFT, VASP, mesh dimension, yield.

Résumé :

Dans cette recherche, nous étudions l'effet d'un des facteurs intrinsèques d'une cellule photovoltaïque en étudiant l'effet du décalage de maille d'un monocristal de silicium sur le rendement énergétique de ce dernier. Pour cela, nous nous sommes appuyés sur des calculs théoriques basés sur la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT) et le programme de simulation (VASP) et à travers l'interprétation et l'analyse des résultats théoriques, qui étaient relativement bons par rapport à l'état statique en l'absence de la dimension du réseau shift, puis l'effet de la paramètre du réseau a et l'énergie des vagues absorbée a Gap énergétique de silicium par qui affect sur le rendement photovoltaïque a été prédit.

Mots clés : cristal de silicium, cellule photovoltaïque, DFT, VASP, paramètre du réseau, rendement.