وزارة التعليم العالي والبحث العلمي

جامعة المثنى

كليه العلوم

قسم الفيزياء

حساب فجوة الطاقة لبعض البوليمرات من خلال منحني الامتصاص لها ومقارنتها مع نتائج معادلةTauc

مشروع تخرج

مقدم الى : كلية العلوم | جامعة المثنى

كجزء من متطلبات نيل درجة البكالوريوس في علوم الفيزياء

من قبل

هدى صبار نعيمة الزيادي

عباس عقيل فرهود

بأشراف

م. حسن طريخم بدح

2022ابريل

بسم الله الرحمن الرحيم

صدق الله العظيم

إقرار لجنة المناقشة

نشهد نحن اعضاء لجنة المناقشة الموقعين أدناه بأننا قد أطلعنا على هذا البحث الموسوم ب

(حساب فجوة الطاقة لبعض البوليمرات من خلال منحني الامتصاص لهل ومقارنتها مع Taucنتائج معادلة) والمقدم من قبل الطالبان:

1) هدى صبار نعيمة الزيادي
2) عباس عقيل فرهود

وقد ناقشنا الطالبان في محتوياتها وما يتعلق بها كجزء من متطلبات الحصول على شهادة البكالوريوس في كلية العلوم قسم الفيزياء فوجدناها مستوفية لمتطلبات الشهادة وعليه نوصي بقبول البحث بتقدير(**.....**).

رئيس اللجنة

/ /2022

عضوا **عضوا**

/ /2022 **/ / 2022**

مصادقة رئيس القسم

أصادق على ما جاء بقرار اللجنة أعلاه.

م. د. صلاح المرشدي

رئيس القسم

/ / 2022

اقرار المشرف

اشهد أن هذا البحث الموسوم ب

(حساب فجوة الطاقة لبعض البوليمرات من خلال منحني الامتصاص لهل ومقارنتها مع نتائج معادلة Tauc) المقدم من قبل الطالبان

1) هدى صبار نعيمة الزيادي
2) عباس عقيل فرهود

جرت تحت أشرافي في كلية العلوم جامعة المثنى كجزء من متطلبات الحصول على شهادة البكلوريوس في (الفيزياء)...

التوقيع:

الاسم: م. حسن طريخم بدح

التاريخ: / / 2022

بناء على التوصيات المتوفرة أرشح هذا البحث للمناقشة.

الاسم: م. د

التوقيع:

رئيس القسم

التاريخ: / / 2022

الاهداء

اهدي ثمرة نجاحي وتخرجي والجهد المبذول في السنين الماضية الى بقية الله الاعظم صاحب العصر والزمان الامام الهادي المهدي (عجل الله تعالى له الفرج)

الى من بلغ الرسالة وادى الامانة الى نبي الرحمة ونور العالمين سيدنا محمد (ص)...الى النبي محمد (ص)

الى القلب الحنون من كانت بجانبنا بكل المراحل التي مضت من تلذذت بالمعاناة وكانت شمعة تحترق لتنير دربنا.... الى امي الحبيبة.

الى من علمنا ان نقف على يدنا اليمنى الى من علمنا الصعود وعيناه تراقبنا....

الى ابي العزيز.

الى اساتذتي الاعزاء الذين علموني وشجعوني بكل خطوه ومرحله من مراحل حياتي.... الى التدريسين.

شكر و تقدير

الحمد لله رب العالمين و الصلاة و السلام على أشرف الأنبياء و المرسلين سيدنا محمد و على اله اجمعين و من تبعهم بإحسان الى يوم الدين, و بعد .

فأني اشكر الله تعالى على فضله حيث اتاح لنا انجاز هذا العمل بفضله, فله الحمد اولاً و اخراً.لا بد لنا و نحن نخطو خطواتنا الأخيرة في الحياة الجامعية من وقفة نعود الى أعوام قضيناهافي رحاب الجامعية مع أساتذتنا الكرام الذين قدموا لنا الكثير باذلين بذلك جهوداً كبيرة في بناء جيل الغد لتبعث الامة من جديد, و قبل ان نمضي نُقدم اسمى آيات الشكر و الامتنان و التقدير و المحبة الى الذين حملوا اقدس رسالة في الحياة, الى الذين مهدوا لنا طريق العلم و المعرفة .الى جميع أساتذتنا الأفاضل .

كن عالماً, فان لم تستطع فكن متعلماً, فان لم تستطع فأحب العلماء, فان لم تستطع فلا تبغضهم

للنجاح أُناس يقدرون معناه و للأبداع اناس يحصدونه, لذا نقدر جهودك المُضنية , فانت اهل للشكر و التقدير و وجب علينا تقديرك, لك منا كل الثناء و التقدير, و اخص بالتقدير و الشكر الى الاستاذ (م.حسن طريخم بدح) الذي له الفضل – **بعد الله تعالى- في اكمال بحثنا هذا. كما اتوجه** بالشكر الجزيل الى جميع اساتذتي في قسم الفيزياء / كلية العلوم/ جامعة المثنى الذين لم يدخروا جهداً في توجيهنا و امدادنا بما احتجنا اليه , و اتقدم بالشكر الجزيل في هذا اليوم الى اساتذتي الموقرين في لجنة المناقشة رئاسة و اعضاء لتفضلهم علينا بقبول مناقشة هذا البحث, فهم اهل لسد خللها و تقويم معوجها و تهذيب نتوءاتها و الابانة عن مواطن القصور فيها, سائلين الله الكريم ان يثيبهم عني خيراً

قائمة المحتويات

التسلسل	الموضوع	الصفحة.
	الآية	I
	اقرار لجنة المناقشة	II
	اقرار المشرف	III
	الاهداء	IV
	الشكر والتقدير	V
	قائمة المحتويات	VI
	قائمة الاشكال والجداول	VII
	الهدف من البحث	VIII
1	الخلاصة	1
2	المقدمة	2
3	الفصل النضري	3
1-3	المقدمة	3
2-3	اشباه الموصل	4
3-3	اهم خصائص المواد شبه الموصلة	4
4-3	اهم انواع اشباه الموصلات	4
5-3	استخدامات أشباه الموصلات	5
6-3	البوليمر	6
7-3	انواع البوليمر	6
1-7-3	ماهي اوجهه التشابه والاختلاف بين البوليمرات العضوية وغير العضوية	7
2-7-3	ماهو الفرق بين البوليمرات العضوية وغير العضوية	7
8-3	البوليمرات الموصلة	7
9-3	البوليمرP3HT	8
10-3	مستويات HOMO / LUMO	9
11-3	فجوات النطاق المباشرة والغير مباشرة	9-10
4	الفصل الموديل النضري	11

التسلسل	الموضوع	الصفحة.
1-4	معادلةTauc	11
2-4	الخواص البصرية	12-13
	الفصل الثالث	14
5	النتائج والمناقشة	14
6	الاستنتاجات	22
7	المصادر	23-24

قائمة الاشكال والجداول

رقم الشكل	الاشكال	الصفحة.
1-3	الصيغة الكميائية للبوليمرP3HT	8
3-2	مخطط المدارات الجزيئيةHOMO and LUOM	9
3-3	فجوه الطاقة المباشرة في اشباه الموصلات	10
1-5	للغشاء الرقيق P3HTالامتصاصية	14
2-5	لحساب فجوه الطاقة المباشرة للغشاء الرقيقtaucمعادله	15
3-5	لحساب فجوه الطاقة الغير المباشرة للغشاء الرقيقtaucمعادله	16
4-5	للمحلول P3HTالامتصاصية	18
5-5	لحساب فجوه الطاقة المباشرة للمحلولtaucمعادله	19
6-5	لحساب فجوه الطاقة الغيرالمباشرة للمحلولtaucمعادله	20
رقم الجدول	الجدول	الصفحة.
جدول (5-1)	يوضح نتائج فجوة الطاقة النظرية والعملية بالطريقة المباشرة والغير مباشرة للغشاء الرقيق P3HT	17
جدول (5-2)	يوضح نتائج فجوة الطاقة النظرية والعملية بالطريقة المباشرة والغير مباشرة للمحلول الرقيقP3HT	21

الهدف من البحث

2- الهدف من البحث

1- حساب فجوه طاقة المباشرة والغير مباشرة لبعض البوليمرات بطريقتي حد الامتصاص ومعادلة Taucوالمقارنة بين النتائج.

2- حساب اقصى الطول الموجي للامتصاص للمواد في حالة الصلبة والمحلول.

الخلاصة

تم دراسة الخواص البصرية لمادة P3HT في حالة الغشاء الرقيق والمحلول وحساب فجوة الطاقة المباشرة والغير مباشرة وقد وجدت النتائج للغشاء الرقيق هي 1.7 ev للطريقة المباشرة والطريقة الغير مباشرة هي 1.9 ev وكذلك للمحلول بالطريقة المباشرة هي ev 2.2 والطريقة الغير مباشرة هي 2.2 ev .

المقدمة

1- المقدمة

مصطلح أشباه الموصلات للمرة الأولى من قبل العالم ألساندرو فولتا (Alessandro Volta) عام 1782م، وفي عام 1833م لاحظ العالم مايكل فارادي (Michael Faraday) طبيعة أشباه الموصلات، وتأثير الحرارة على موصليتها؛ إذ لاحظ انخفاض المقاومة الكهربائية لكبريتيد الفضة مع زيادة درجة الحرارة، وفي عام 1874م اكتشف العالم كارل براون (Karl Braun) مبدأ عمل الديودات المصنوعة من أشباه موصلات، عندما لاحظ تدفق التيار بحُرية في اتجاه واحد فقط، وقام بتوثيقه .

في عام 1901م اخترع العالم جاجاديش تشاندرا بوس (Jagadish Chandra Bose) أول جهاز أشباه موصلات وأسماه شعيرات القطط (Cat whiskers)، وهو جهاز مُعدّل للتيار الكهربائي يُستخدم كمقوّم لأشباه الموصلات للكشف عن موجات الراديو. تقع أشباه الموصلات في المنطقة الواقعة بين المواد العازلة والمواد الموصلة، وذلك لأن كفاءتها في توصيل التيار الكهربائي متوسطة نوعًا ما، وتتكون من عدد من العناصر أبرزها السيليكون والجرمانيوم [3].

يعتبر علم البوليمرات أحد العلوم الكيميائية الحديثة حيث أن تركيب الجزيئات العملاقة والتي سميت بالبوليمرات Polymers لم يعرف بالتحديد إلا بعد عام 1920 م. لقد استخدم الإنسان القديم البوليمرات الطبيعيةNatural polymers قبل مئات القرون، فقد صنع ملابسه من القطن والصوف والحرير وجلود الحيوانات. واستخدم البوليمرات في طعامه كالزيتون النباتية Oils والشحوم الحيوانية Fats واستعمل الراتنجات الطبيعية Natural Resins كأصماغ ولواصق منذ آلاف السنين كالصمغ العربي Arabic Gum والأصماغ الحيوانية والإسفلت الذي استخدم في طلاء القوارب.

لقد صنفت البوليمرات في القرن الثامن عشر ضمن الغرويات Colloids , لأن الحالة الغروية في ذلك الوقت كانت معروفة بمثابة حالة مستقلة من حالات المادة إضافة إلى حالة السائلة والصلبة، وقد كان سبب هذا الاعتقاد الخاطىء أن معظم المواد الغروية تمتاز بأوزانها الجزيئية العالية مقارنة بالمواد الأخرى البسيطة، وبقى هذا المفهوم سائدًا حتى عام (1880 ميلادية)عندما اكتشف راؤولت Raoult وفانت هوف Vant Hoff طرقًا لتعيين الوزن الجزيئي فقد عين بهذه الطرق الوزن الجزيئي للمطاط الطبيعي والنشا ونترات السليلوز ووجد بأنها تتراوح بين (10000-40000).تعتبر هذه الخطوة الأولى والدوافع التي أدت إلى الاعتقاد بفكرة وجود الجزيئات الكبيرة Macromolecules. واقترح أن حجم هذه المركبات المتجمعة يصل إلى حجم الجسيمات الغروية (Colloidal Particles) فقد فسر مثلا الوزن الجزيئي للمطاط الطبيعي، الذي عرف صيغته الوضعية (C5H8) منذ عام (1826 ميلادية) [8].

الفصل النظري

3- الفصل النظري

3-1 المقدمة

زادت الأبحاث على الأجهزة الإلكترونية الضوئية مؤخرًا. واحد من العديد من العوامل الهامة لتحقق مما إذا كانت مادة ما مناسبة للتطبيقات الإلكترونية الضوئية هي الخاصية الكهربائية للمواد. في مجال فيزياء المواد ،طريقة واحدة لتحديد الخواص الكهربائية للمادة هي قيم فجوة الطاقة.

فجوة الطاقة هي عبارة عن مجال طاقي في الجسم الصلب لا يمكن للإلكترونات فيه ان توجد ، تفصل فجوة الطاقة بين اثنين من الأجهزة الإلكترونية المسموح بها دول الطاقة. حالات الطاقة الإلكترونية هذه في المواد بدلاً من وجود طاقات منفصلة كما فيفي حالة ذرة واحدة ، فإنها تشكل نطاقات ، وهي فرقة التكافؤ وشريط التوصيل. التكافؤ النطاق هو المنطقة التي تحتل فيها الإلكترونات الحالات الخارجية في التركيب الذري وممتلئة بالكامل الإلكترونات. [1]

وفي الوقت نفسه ، فإن نطاق التوصيل هو المنطقة التي يمكن للإلكترونات أن تتحرك فيها بحرية لتولد تيار كهربائي وطاقة أعلى من نطاق التكافؤ. وعادة شريط التوصيل فارغ ولكن في حالة المعادن يتم تعبئتها جزئيًا. تشكل منطقة الطاقة بين هذين النطاقين نطاقًا محظورًا يُعرف باسم فجوة الطاقة. يتم تعريف قيمة فجوة الطاقة على أنها الفرق بين الجزء العلوي من نطاق التكافؤ وقاع نطاق التوصيل ويمكن استخدامها لتحديد ما إذا كانت المادة مصنفة على أنها معدن أو شبه موصل أو عازل لا تحتوي المعادن على فجوة طاقة ، مما يعني أن نطاق التوصيل وشريط التكافؤ يتداخلان مع بعضهما البعض حتى يتمكن الإلكترون من التحرك بحرية من نطاق التكافؤ إلى نطاق التوصيل من ناحية أخرى. تحتوي أشباه الموصلات والعوازل على فجوة في الطاقة ، حيث تقل القيم عن 4 فولت للأول وأكبر من 4 فولت للأخير [4]

2-3 اشباه الموصل

أشباه الموصل هو مادة صلبة ينتقل فيه التيار الكهربائي بصعوبة يتم يتحكم في موصلاتها الكهربائية بإضافة عناصر أخرى بكميات ضئيلة . شبه الموصل تكون مقاومة كهربائيا ما بين الموصلات والعوازل كما يمكن للمجال الكهربائي الخارجي تغير درجة مقاومة شبه الموصل فالأجهزة والمعدات التي دخل في تصنيعها المواد الشبه موصلة هي أساس الالكترونيات الحديثة .[3]

3-3 أهم خصائص المواد شبه الموصلة

تمتلك اشباه الموصلات مقاومة ذات معامل حراري سالب تمتلك أشباه الموصلات نوعين من حاملات الشحنة هما الإلكترونات والفجوات خلافا لما هو عليه في المواد الموصلة.الشوائب قد تغير التوصيلية السالبة لشبه الموصل إلى توصيلية موجبة او بالعكس . تؤدي الشوائب دورا كبيرا في تقليل المقاومة الكهربائية لشبه الموصل من خلال :[4]

1. لا تسلك في مقاومتها سلوكا اوميا
2. تتأثر توصيليتها بالمجال المغناطيس

4-3 اهم انواع اشباه الموصلات

١ ـ أشباه الموصلات الجوهرية:- وهي التي تتكون من مادة أشباه الموصلات نقية للغاية، وليكون التعريف أكثر دقة يمكن القول بأن أشباه الموصلات الداخلية هي التي يكون فيها عدد الثقوب مساويًا لعدد الإلكترونات في نطاق التوصيل إن فجوة الطاقة المحظورة في حالة أشباه الموصلات الجوهرية دقيقة للغاية، وحتى الطاقة المتاحة في درجة حرارة الغرفة كافية لإلكترونات التكافؤ للقفز عبرها إلى نطاق التوصيل. ميزة أخرى لأشباه الموصلات الداخلية هي أن مستوى فيرمي من هذه المواد يقع في مكان ما بين شريط التكافؤ وشريط التوصيل مصطلح مستوى فيرمي يشير إلى ذلك المستوى من الطاقة حيث يكون احتمال العثور على إلكترون 0.5 أو نصف (تذكر أن الاحتمال يقاس على مقياس من 0 إلى 1)

٢ ـ أشباه الموصلات الخارجية:- هي التي تضعف فيها الحالة النقية للمواد أشباه الموصلات عن طريق إضافة كميات دقيقة جدا من الشوائب، لنكون أكثر تحديدًا ، فإن الشوائب تعرف باسم المنشطات أو عوامل المنشطات، يجب ألا يغيب عن البال أن إضافة مثل هذه الشوائب ضئيل للغاية ويمكن أن يكون للمنشطات النموذجية تركيز 1 جزء في مائة مليون جزء أو ما يعادل 0.01 جزء في المليون.[5]

5-3 استخدامات اشباه الموصلات

تلعب أشباه الموصلات دورًا كبيرًا في الحياة، حيث تُستخدم في مجال واسع من التطبيقات وتخدم العديد من المجالات بسبب خصائصها وسعرها المنخفض، فقد انتشر استخدامها حتى أصبح لا يمكن الاستغناء عنها في كلّ من القطاع الاستهلاكي والصناعي ومن أهم هذه المجالات ما يأتي:[6]

- ***اولا : المجال التقني:-*** تدخل أشباه الموصلات في صناعة العديد من الأجهزة الالكترونية كالدوائر الكهربائية التي لا يكاد يخلو نظام منها، فاستخدام أشباه الموصلات جعل الأجهزة الالكترونية أسرع وأصغر حجمًا، فلا يمكن الاستغناء عنها في الأنظمة الالكترونية وخدمة الاتصالات رب والمعالجات وتطبيقات الحوسبة.

ومن أشهر تطبيقات أشباه الموصلات في المجال التقني ما يأتي:

- أجهزة الاستشعار البصرية والبواعث الضوئية كليزر الحالة الصلبة.
- أساس تصنيع العديد من الأجهزة كالراديو والكمبيوترات والهواتف النقّالة. تصنيع الأجزاء الكهربائية التي تُستعمل في الأجهزة الالكترونية كالدايودات والترانزستورات
- تدخل في العديد من الاختراعات الحديثة كالطابعات ثلاثية الابعاد، وفي إضاءات الليد .تطوير أشباه موصلات بحجم النانو ليتم استخدامها في الخلايا الشمسية والتصوير الجزيئي والخلوي وأجهزة الكشف الحساسة توفير البنية الأساسية لتطوير أنظمة نانو معقدة مثل الشبكات الفائقة والعديد من عوامل الوسائط للتصوير الجزيئي والعلاج الموجّه .

- ***ثانيا : المجال الطبي :-*** تتخطى تطبيقات أشباه الموصلات المجال التقني لتخدم أيضًا المجال الطبّي حيث تدخل في صناعة العديد من الاختراعات الجديدة التي تستند إلى أساليب الطباعة الليثوغرافية، حيث يتركز استخدام أشباه الموصلات في صناعة بلورات بحجم النانو لتستخدم في الاختبارات التشخيصية، حيث يمكن تصنيع هذه البلورات بمواد معدنية عضوية والتي يمكن فيما بعد جعلها قابلة للذوبان في الماء عن طريق تغطيتها بحمض مبلمر معيّن يجعلها قابلة للاقتران مع البوليمرات والجزيئات البيولوجية مثل الأجسام المضادة عبر تكوين روابط بينهم.

ويشيع استخدام بلورات أشباه الموصلات النانومترية لوضع العلامات على الخلايا والأنسجة، فحجمها النقطي وقابليتها لبعث موجات في ظروف معينة يجعلها الخيار الأمثل لاستخدامها كملصقات في التطبيقات الطبية الحيوية التي تتطلب حساسية عالية ودقة طيفية، ومن الأمثلة على ذلك ما يأتي:

[6]

- ❖ القياس المناعي الكمي في المختبر.
- ❖ توسيم عينات الخلايا الثابتة وعينات الأنسجة.
- ❖ تتبّع نشر مستقبلات الغشاء.
- ❖ تتبع حركة التكاثر والبقاء في الأنسجة المزروعة أو أثناء التطور الجنيني.
- ❖ وقد تم اكتشاف أن هذه العلامات تتسرب في أنواع معينة من الورم على الأنسجة السليمة، مما يعني احتمال قابلية استعمالها كأداة للتشخيص المبكر وكدليل أثناء الجراحة.

6-3 البوليمر

هو مركب كيميائي او خليط من المركبات المكونة من جزيئات متكررة. تحتوي البوليمرات على درجة عالية من الذوبان ونقاط الغليان . ولأن الجزيئات تتكون من العديد من المونومرات ، فإن البوليمرات تميل إلى أن يكون لديها كتل جزيئية عالية. كلمة بوليمر تأتي من البادئة اليونانية **poly**،والتي تعني "العديدة" ، واللاحقة - **mer** ، والتي تعني "الأجزاء". من أهم البوليمرات التي تستخدم على نطاق واسع في مجالات أبحاث الإلكترونيات العضوية هي

Poly (3-hexylthiophene) (P3HT) [7]

7-3 انواع البوليمرات

١ -البوليمرات العضوية :- هي مواد بوليمر تحتوي أساسًا على ذرات كربون في السلسلة لذلك ، لا يوجد سوى روابط تساهمية بين الكربون والكربون.تتكون هذه البوليمرات فقط من جزيئات المونومر العضوية. في معظم الأحيان ، تكون هذه البوليمرات صديقة للبيئة لأنها قابلة للتحلل علاوة على ذلك ، هناك نوعان رئيسيان من البوليمرات العضوية مثل البوليمرات الطبيعية والاصطناعية [8] .

2- البوليمرات غير العضوية :- هي مواد بوليمر لا تحتوي على ذرات كربون في السلسلة. ومع ذلك ، فإن معظم هذه البوليمرات عبارة عن بوليمرات هجينة لأن هناك بعض المناطق العضوية أيضًا. هذه المواد عبارة عن هياكل شديدة التشعب ولها عناصر كيميائية أخرى غير الكربون ؛ على سبيل المثال: الكبريت والنيتروجين ، فإن هذه البوليمرات ليست صديقة للبيئة لأنها غير قابلة للتحلل. بعض الأمثلة الشائعة بولي فوسفاتين ، إلخ .[8]

3-7-1 ما هي أوجه التشابه بين البوليمرات العضوية وغير العضوية ؟

كلاهما عبارة عن مواد بوليمر تتكون من مونومرات مرتبطة ببعضها البعض عبرروابط تساهمية. كل من البوليمرات العضوية وغير العضوية عبارة عن جزيئات كبيرة لها كتل مولية عالية جدًا.[8]

3-7-2 ما هو الفرق بين البوليمرات العضوية وغير العضوية

البوليمرات العضوية هي مواد بوليمر تحتوي أساسًا على ذرات كربون في العمود الفقري. تحتوي هذه البوليمرات بشكل أساسي على ذرات كربون في العمود الفقري. معظم البوليمرات العضوية عبارة عن هياكل بسيطة. علاوة على ذلك ، فهي صديقة للبيئة لأنها قابلة للتحلل. من ناحية أخرى ،

فإن ***البوليمرات غير العضوية*** عبارة عن مواد بوليمر لا تحتوي على ذرات كربون في العمود الفقري. لذلك ،لا تحتوي هذه البوليمرات على ذرات كربون في العمود الفقري. هذا هو الفرق الرئيسي بين البوليمرات العضوية وغير العضوية.

جميع البوليمرات غير العضوية تقريبًا عبارة عن هياكل معقدة شديدة التشعب. بالإضافة إلى ذلك ،هذه ليست صديقة للبيئة لأنها غير قابلة للتحلل. [8]

3-8 البوليمرات الموصلة

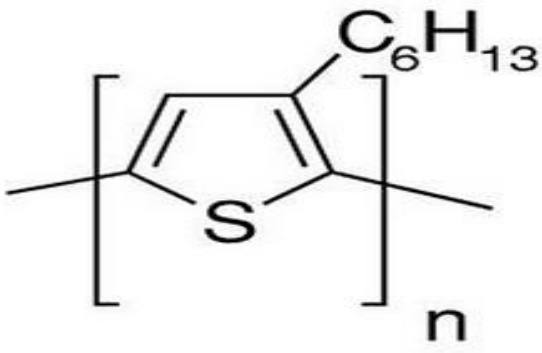
البوليمرات هي جزيئات كبيرة، تتكون من العديد من الوحدات الفرعية المتكررة تسمى المونميرات، والتي تتشارك في العديد من الخصائص بما في ذلك الخصائص الكلية والجزئية، وخصائص النقل الكهربائي والموصل وشبه الموصل والبصري .لاقت بوليمرات التوصيل الكثير من الاهتمام، وذلك مع اختراع بولي إيثيلين للموصل. الخصائص التي جعلت هذه الموصلات جذابة احتواؤها مجموعًة واسعة من الموصلية الكهربائية، والتي يمكن تحقيقها عن طريق استخدام المواد المنشطة، مع الحفاظ على المرونة الميكانيكية والاستقرار الحراري العالي. [9]

9-3 البوليمر(P3HT)

Poly (3-hexylthiophene) مفيدًا على نطاق واسع في مجالات أبحاث الإلكترونيات العضوية ، لأنه مادة تمثيلية واحدة للبوليمرات العضوية شبه الموصلة القابلة للذوبان. عادةً ما يكون أداء المواد الإلكترونية حساسًا لجودة المادة. يعتبر النقاء والوزن الجزيئي عاملين مهمين لأداء المواد.

والاسم الكامل بولي (3-هيكسيل ثيوفين-2،5-ديل) يرمز له بالرمز **P3HT** صيغة كيميائية له **(C_6H_{13})**يصنف من عائلة البوليثيوفين ، المواد العضوية شبه الموصلة،البوليمرات ذات الفجوة المنخفضة ، مانعات البوليمر ، الخلايا الكهروضوئية العضوية ، الخلايا الشمسية البوليميرية ، **OLEDs**، **OFETs**أحد المكونات في تطوير **P3HT** هو مونومر غير متماثل يساهم في التنظيمات للمنتج النهائي على مستوى انتظام **P3HT (M104 ،RR = 96.3٪)**

وصيغته تعطى بالشكل الاتي :



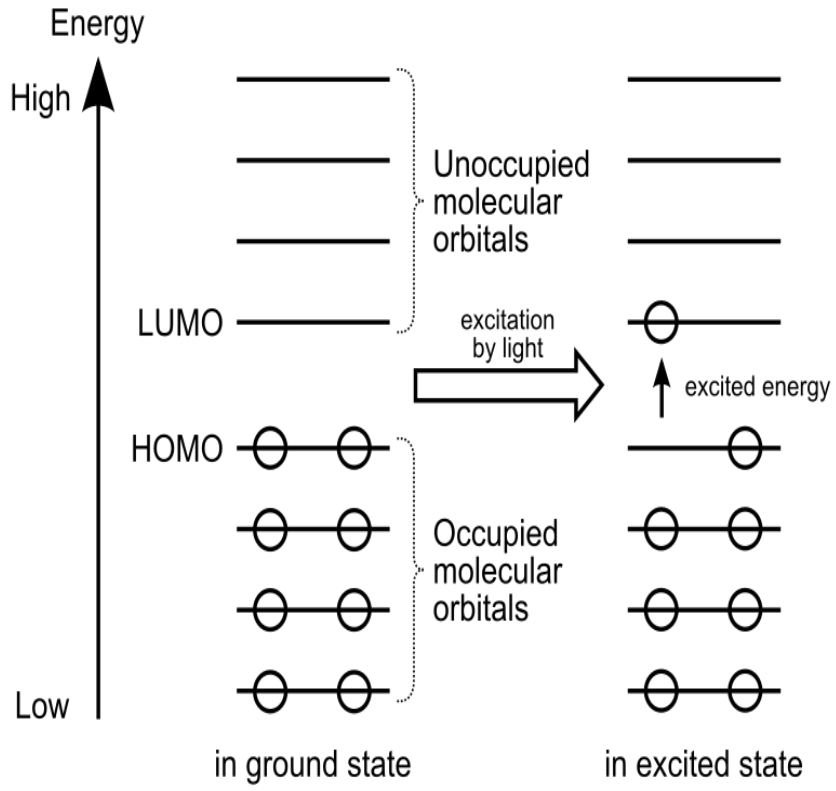
الشكل (3-1) يوضح الصيغة الكيمائية للبوليمر P3HT

كل انواع **P3HT** قابل للذوبان بدرجة عالية (50 مجم / مل) في المذيبات المكلورة مثل الكلوروفورم ،كلوروبنزين ،ثنائي كلورو بنزين وثلاثي كلورو بنزين. يوصى باستخدام مواد **P3HT** ذات الوزن الجزيئي المتوسط والمنخفض مع المذيبات غير المكلورة مثل الزيلين والتولوين و **THF** نظرًا لزيادة قابليتها للذوبان.

P3HT: مزيج **PCBM** (الطبقة النشطة) ، **PEDOT: PSS** ، و **Au**. طبقات **TiO2**. تم استخدام طريقة **Sol-gel** لتصنيع هذه الطبقات على النحو التالي: تم تصنيع المذيبات بخلط الميثانول والأيزوبروبانول. إضافة مادة إيزوبروبوكسيدي التيتانيوم (**TIP**) (سلائف التيتانيوم) إلى محلول المذيب تحت درجة حرارة 80 درجة مئوية باستخدام محرك مقسم. بعد ذلك ، تم تقليب الخليط أثناء إسقاط حمض الأسيتيك بحذر.[10]

3-10 مستويات الطاقة HOMO/LUMO

عبارة عن مصطلح يستخدم في الكيمياء للإشارة إلى وضع المدارات الجزيئية من حيث شغلها بالإلكترونات يستخدم الفرق الطاقي بين هذين المدارين الحدوديين في معرفة استقرارية وثباتية معقدات الفلزات الانتقالية ويرمز لأعلى مدار جزيئي مشغول باسم **(Homo)** هومو)، في حين أن أدنى مدار جزيئي غير مشغول يرمز له **(Lumo)** لومو)، وتدعى هذه المدارات باسم المدارات الحدودية.[10]



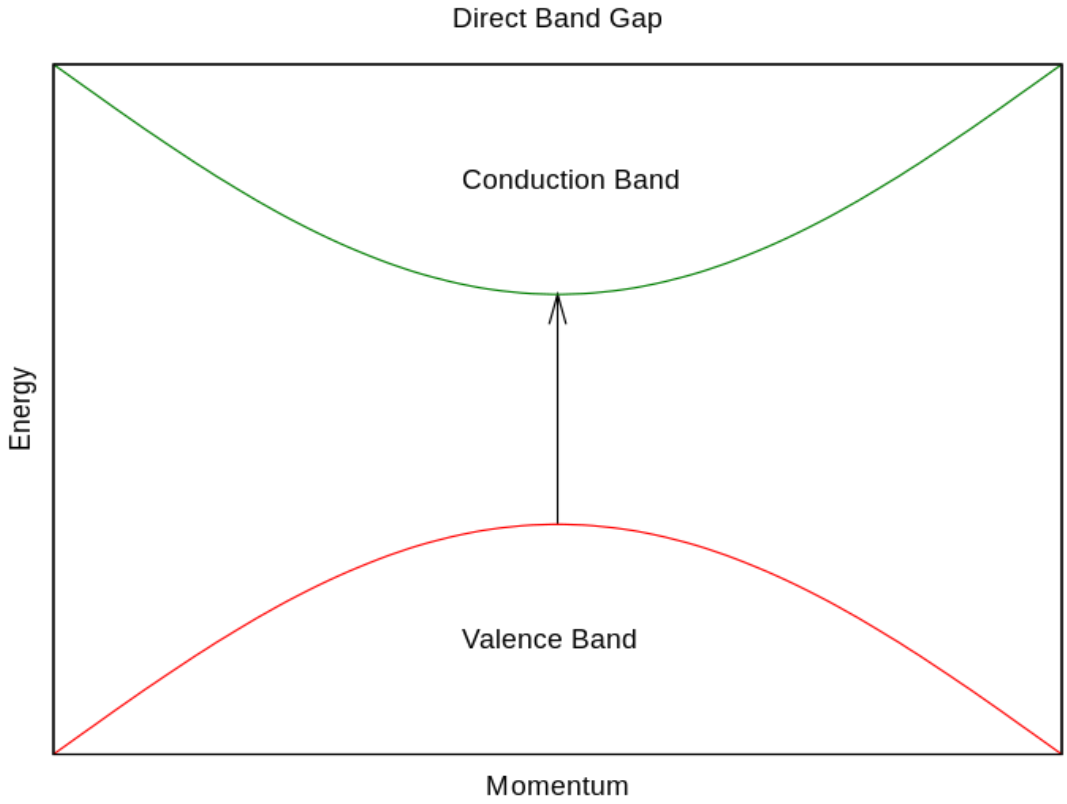
الشكل (3-2) يوضح مخطط المدارات الجزيئية HOMO and LUOM

3-11 فجوات النطاق المباشرة والغير مباشره

في فيزياء أشباه الموصلات ،يمكن أن تكون فجوة النطاق لأشباه الموصلات من نوعين أساسيين ، فجوة نطاق مباشرة أو فجوة نطاق غير مباشرة.[3]

- ***فجوه النطاق المباشرة*** :-تتميز كل من حالة الطاقة الدنيا في نطاق التوصيل وحالة الطاقة القصوى في نطاق التكافؤ بزخم بلوري معين (ناقل **k** في منطقة **Brillouin**). إذا كانت المتجهات **k** مختلفة ، فإن المادة بها "فجوة غير مباشرة". تسمى فجوة النطاق "مباشرة" مثل السيليكون

- ***فجوه النطاق الغير المباشرة:-*** إذا كان الزخم البلوري للإلكترونات والثقوب هو نفسه في كل من نطاق التوصيل وحزام التكافؤ؛ يمكن للإلكترون أن يصدر فوتونًا بشكل مباشر. في فجوة "غير مباشرة" ، لا يمكن أن ينبعث الفوتون لأن الإلكترون يجب أن يمر عبر حالة وسيطة وينقل الزخم إلى الشبكة البلورية. السيليكون البلوري و **Ge**



الشكل(3-3) يوضح فجوه الطاقة المباشرة في اشباه الموصلات

فصل الموديل النظري

4- فصل الموديل النظري

4-1 معادلة tauc

هي المعادلة التي تستخدم في حساب فجوه النطاق للمواد سميت بهذا الاسم نسبة الى مكتشفها العالم جان تاوك.تم تطوير طريقة معادلة **Tauc** لأول مرة بواسطة العالم jan **Tauc** في عام 1968 اكتسبت هذه الطريقة شهرة عندما بدأ البحث على الطبقات الرقيقة في التطور بسرعة في ذلك الوقت كان العلماء يتنافسون لإجراء تجارب في البحث عن مواد جديدة. بدأ حساب قيمة فجوة الطاقة باستخدام طريقة معادلة **Tauc** [11]

$$(\alpha h\upsilon)^{\gamma} = A_o\,(h\nu - E_g)$$

α: ***معامل الامتصاص الضوئي الذي يتغير مع الطول الموجي الساقط على المادة .***

h : ***ثابت بلانك.***

A_o : ***ثابت.***

υ: ***تردد الشعاع الساقط.***

γ : (1/2 , 3/2، 2 ، 3) **عدد نسبي.**

E_g : ***طاقة الفوتون الساقط***

2-4 الخواص البصرية

- الامتصاصية A

(بأنها النسبة بين شدة الإشعاع الممتص الذي يمتصه الغشاء إلى الشدة الأصلية للإشعاع الساقط عليه(وتكون الامتصاصية كمية خالية من الوحدات)[12] وتعطى

$$A=I_A\backslash I_\circ \text{----------} \quad 2$$

I_A= شدة الإشعاع الممتص

$I_\circ$=الشدة الأصلية للإشعاع الساقط

- معامل الامتصاص (α)

يمكن التوصل إلى تحديد قيمة معامل الامتصاص(α) للغشاء المحضر عملياً بقياس قيم الامتصاصية(A) والنفاذية(T) فعند ما يسقط ضوء شدته (I) على غشاء سمكه (t) فإن التغير في هذه الشدة نتيجة عبورها مسافة(dx) من الوسط يمكن التعبير عنه بالمعادلة الآتية [13]

$$-d(x)/d(x) = \alpha\, I(x) \text{.....} \quad 3$$

α: معامل الامتصاص الضوئي الذي يتغير مع الطول الموجي الساقط على المادة .

وحل المعادلة (2) هو :-

$$I(x) = I_\circ e^{-\alpha x} \text{.....} 4$$

$$It = I_\circ e^{-\alpha x} \quad \text{.....} \ 5$$

وتدعى النسبة (I_t/I_o) بالنفاذية (**Transmittance**) و تمثل شدة الضوء النافذ خلال السمك (t) الساقط والتي تربطها مع الامتصاصية حيث السمك في الغشاء 150 وفي المحلول 1 **cm**

$$A = \text{Log } 10(I0/It) = \text{Log } 1/T \text{.....} 6$$

Ln (I0 / It)= αt …….7

2.303 Log (I0/It) = αt…….. …….(8)

α. = 2.303 A/t ……..……(9)

وطاقة الفوتون الساقط (E) دالة للطول الموجي المقاس بوحدات **(nm)** تعطى وفق العلاقة الآتية:

E(ev) = 1240/λ(nm)……(10)

ومن معرفة طاقة الفوتون ومعامل الامتصاص واستخدام المعادلة من ثم رسم العلاقة ($\alpha h\upsilon$) دالة لطاقة الفوتون **(hv)** ومن خلالها تم حساب فجوة الطاقة البصرية المباشرة (E_g) من خلال رسم المماس للمنحني ليقطع محور السينات في نقطة تساوي قيم فجوة الطاقة المباشرة:

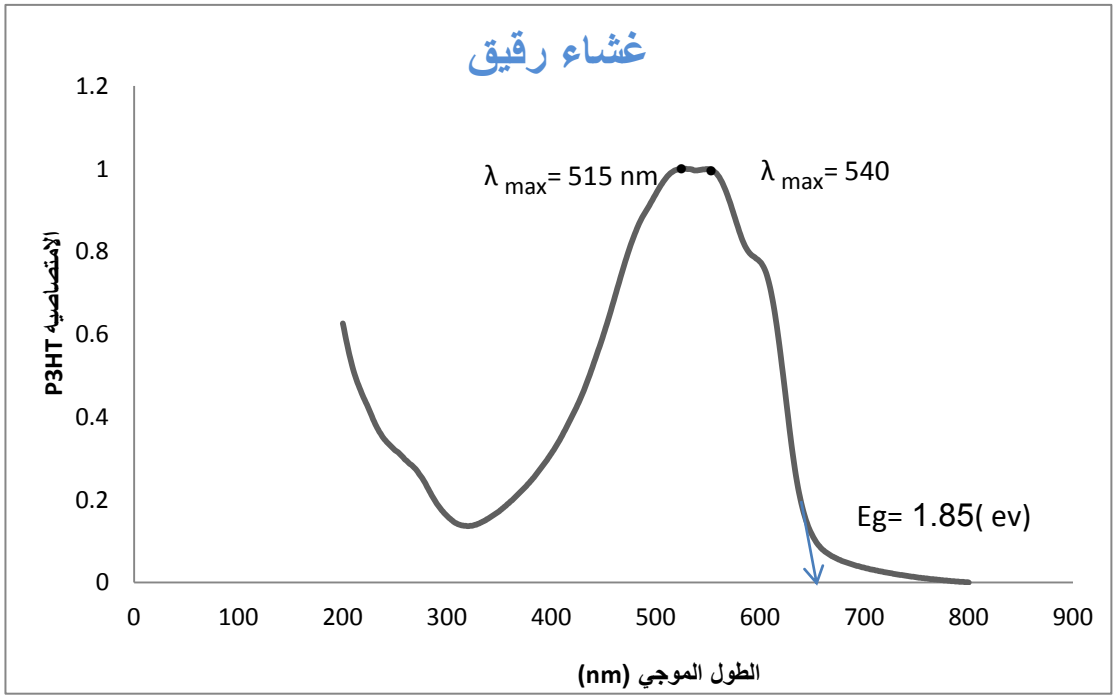
αhv = A (hv – Eg)^{r} ……(11)

- حساب فجوة الطاقة بالطريقة المباشرة تكون معادلة **tauc** تساوي $(\mathbf{h\nu\alpha})^2$
- حساب فجوة الطاقة بالطريقة الغير المباشرة تكون معادلة **tauc** تساوي $(\mathbf{h\nu\alpha})^{1\backslash 2}$

الفصل الثالث

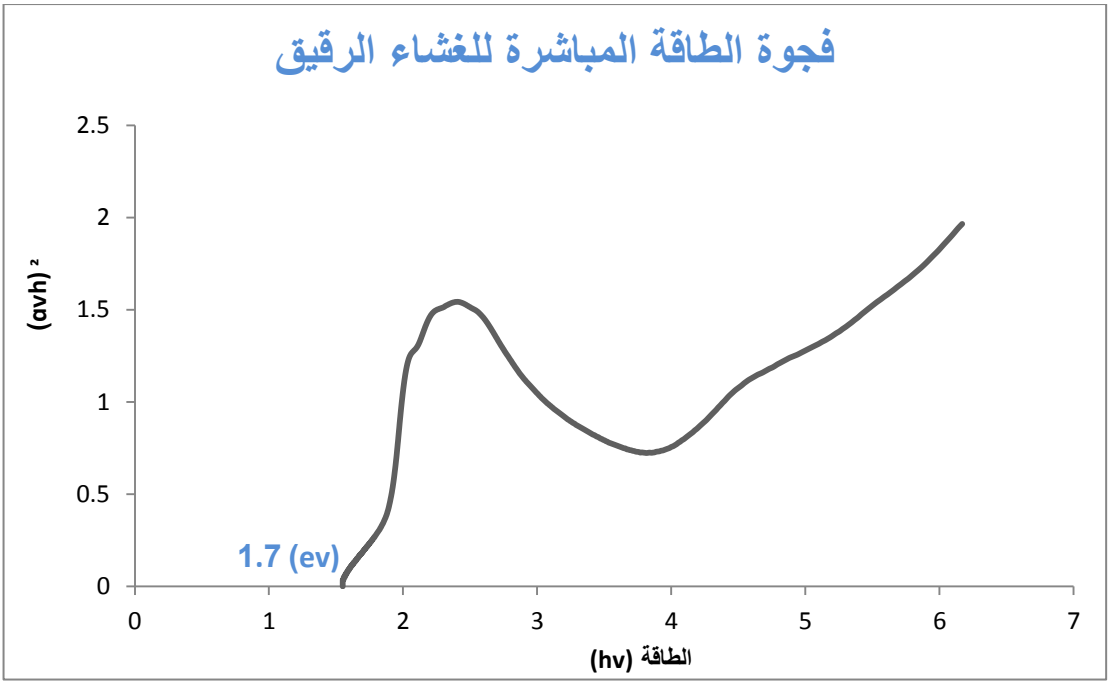
5- النتائج والمناقشة

يتضمن هذا الفصل عرض النتائج ومناقشتها التي تم الحصول عليها من حساب الامتصاصي وحساب فجوه الطاقة للبوليمر P3HT بالاعتماد على معادلات الجزء النضري بالتوالي بطريقتي المباشرة والغير مباشرة للغشاء الرقيق وللمحلول P3HT.



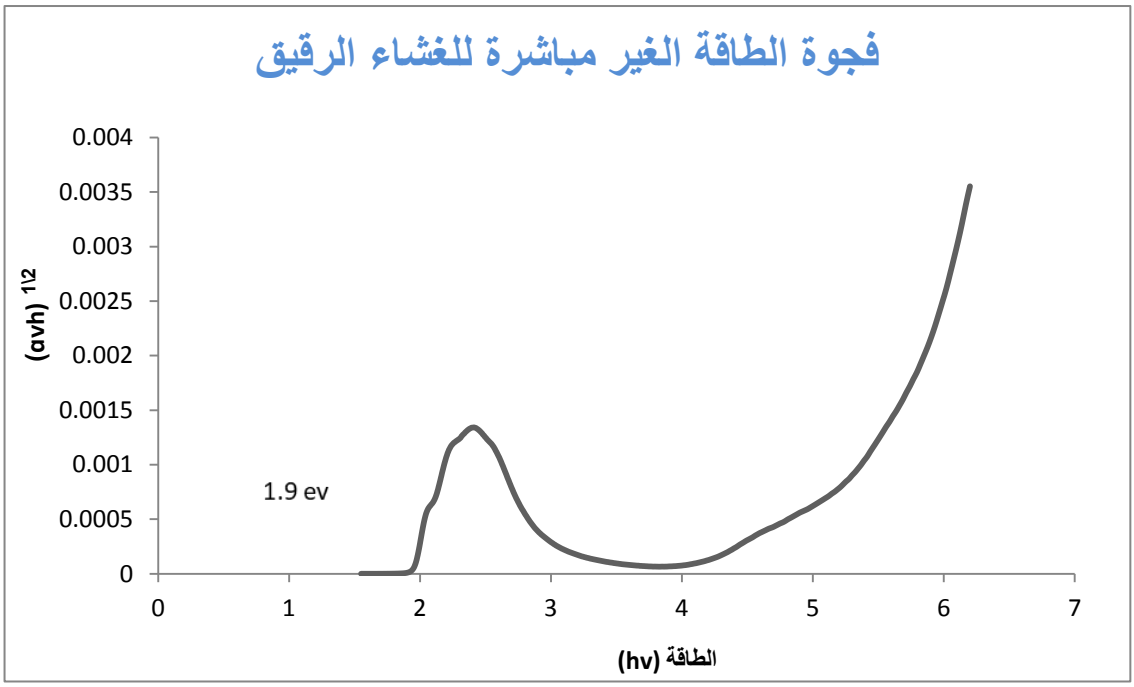
الشكل (5-1) الامتصاصية P3HT للأغشياء الرقيق
يوضح العلاقة بين الامتصاصية على المحور العمودي و الطول الموجي(nm) على المحور الافقي

من الشكل (5-1) نلاحظ وجود قمتين للامتصاص أعلى قمة للامتصاصية عند طول الموجي (515 (nm والقمة التي تليها عند طول الموجي (nm) 540 وقيمة مقدار فجوة الطاقة Eg عند الطول الموجي 670nm تساوي 1.85 ev(تمثل القيمة العملية لفجوة الطاقة) للأغشية الرقيقة P3HT وتربط علاقة عكسية ما بين الطول الموجي والامتصاصية .



الشكل (5-2) معادلة tauc لحساب فجوه الطاقة المباشرة للغشاء الرقيق
P3HT يوضح العلاقة بين الطاقة (hv) على المحور الافقي وبين $(h\nu\alpha)^2$ على المحور العمودي (الطريقة المباشرة) للغشاء الرقيق

من الشكل (5-2) العلاقة ما بين hv و $(h\nu\alpha)^2$ بالطريقة المباشرة نلاحظ بداية الخط المستقيم من المنحني ليقطع محور طاقة الفوتون وتكون قيمة فجوة الطاقة للغشاء Eg تساوي 1.7ev (تمثل القيمة النظرية لفجوة الطاقة) للأغشية الرقيقة P3HT



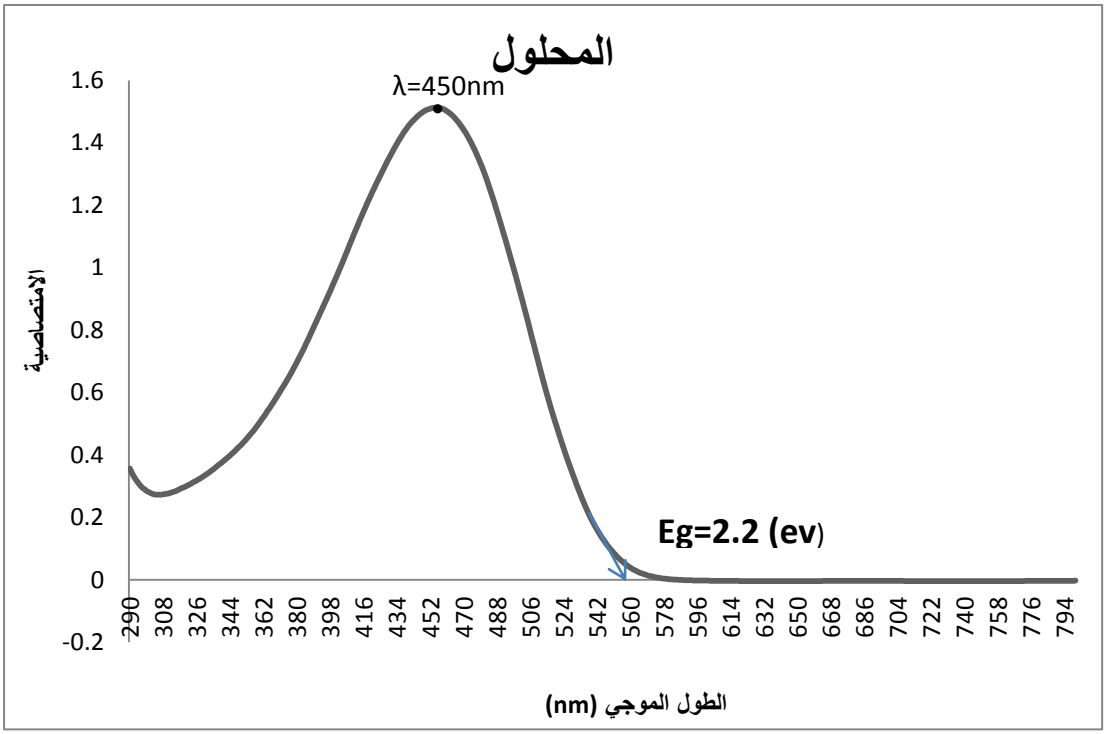
الشكل (3-5) معادلة tauc لحساب فجوه الطاقة الغير المباشرة للغشاء الرقيق

يوضح العلاقة بين فجوه الطاقة (hv)على المحور الافقي و$(hv\alpha)^{1\backslash 2}$ على المحور العمودي(بطريقة الغير مباشرة) للأغشياء الرقيق

من الشكل (3-5) العلاقة ما بين hv و (hva)1\2 بالطريقة الغر مباشرة نلاحظ بداية الخط المستقيم من المنحني ليقطع محور طاقة الفوتون وتكون قيمة فجوة الطاقة للغشاء Eg تساوي 1.9ev (تمثل القيمة النظرية لفجوة الطاقة) للأغشية الرقيقة P3HT يلاحظ أن حساب فجوة الطاقة بالطريقة العملية تكون أقرب لطريقة النظرية المباشرة (معادلة tauc) يعني نسبة الخطأ بين الجانب العملي والطريقة المباشرة P3HT قيمة سالبة هذا يعني أن قيمة الخطأ قليلة جدا وتحدد قيمة الفجوة الكثير من الخصائص البصرية والكهربائية للبوليمرات

(nm)λ	Eg=1240\λ (ev)	Eg= $(\alpha h\upsilon)^2$ (بطريقه المباشرة)	Eg=$(\alpha h\upsilon)^{1\backslash 2}$ (بطريقه الغير مباشرة)
670	1.85 ev	1.7 ev	1.9ev

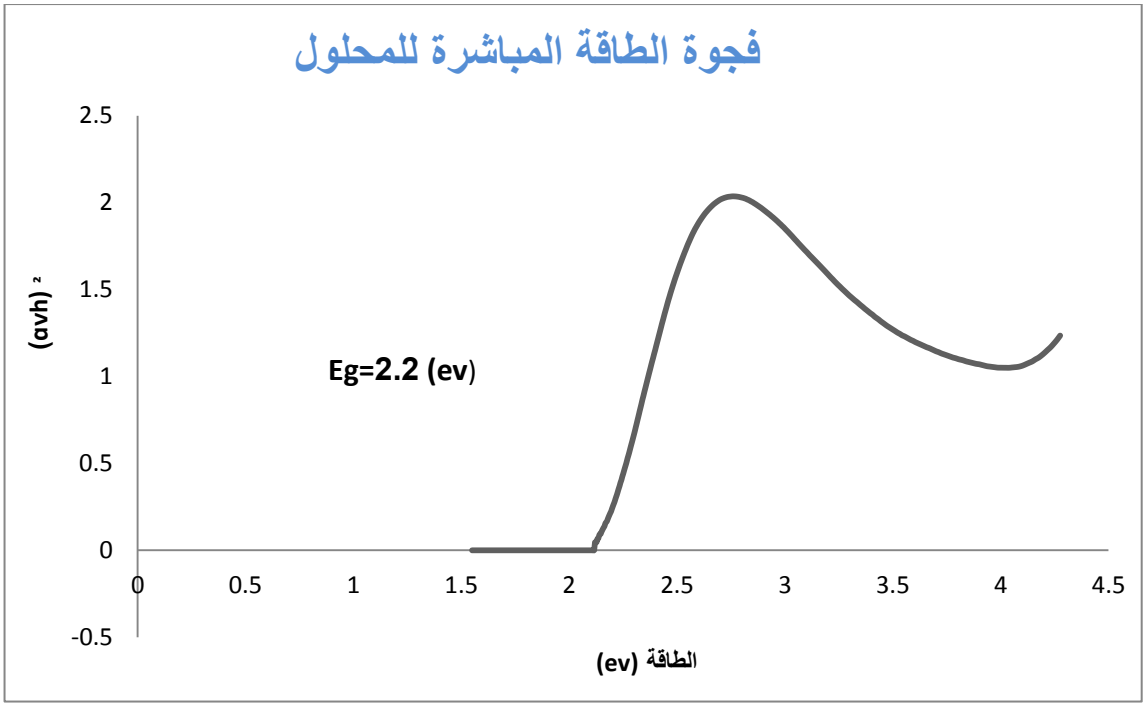
جدول (5-1) يوضح نتائج فجوة الطاقة النظرية والعملية بالطريقة المباشرة والغير المباشرة للغشاء الرقيق P3HT



شكل (4-5) الامتصاصية P3HT للمحلول

يوضح العلاقة بين الامتصاصية على المحور العمودي و الطول الموجي(nm) على المحور الافقي للمحلول

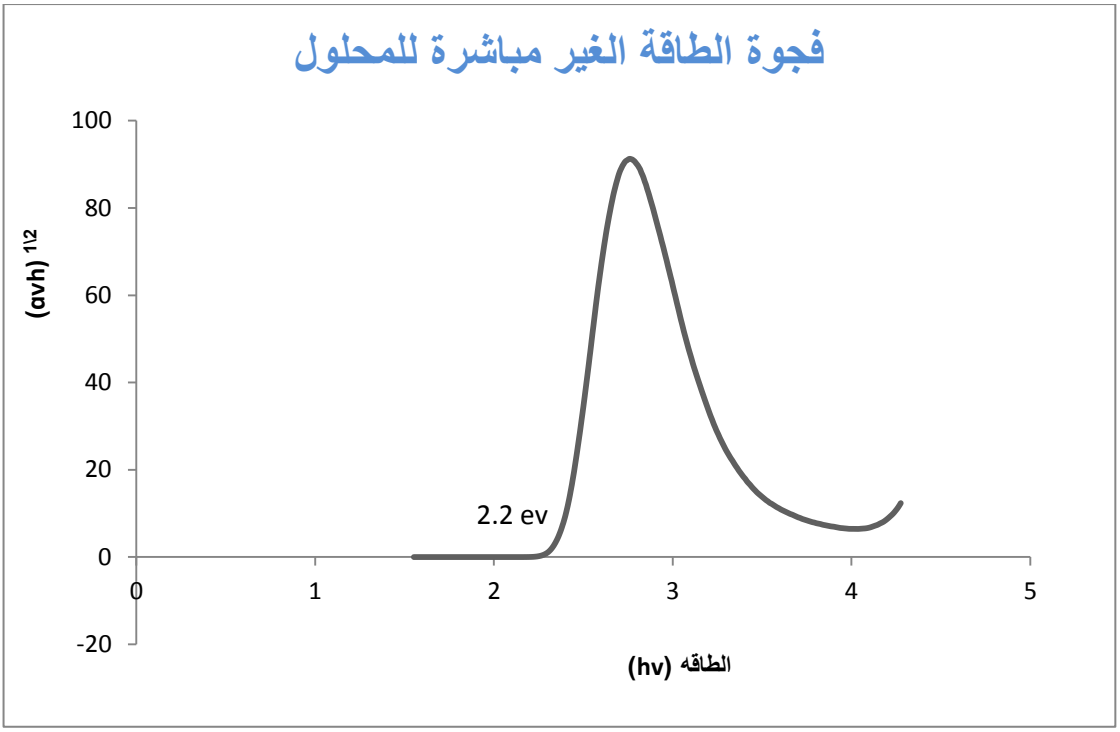
من الشكل (4-1) يلاحظ أعلى قمة امتصاص عند الطول الموجي 450nm وقيمة مقدار فجوة الطاقةEgعند الطول الموجي 560nm تساوي 2.2 ev تمثل (القيمة العملية للمحلول) , وتربط علاقة عكسية ما بين الطول الموجي والامتصاصية



شكل (5-5) معادلة tauc لحساب فجوه الطاقة الطريقة المباشرة للمحلول

يوضح العلاقة بين الطاقة (ev)على المحور الافقي و $(hv\alpha)^2$ على المحور العمودي الطريقة المباشرة للمحلول

من **الشكل (5-5)** نلاحظ بداية الخط المستقيم من المنحني ليقطع محور طاقة الفوتون وتكون قيمة فجوة الطاقة للمحلول Eg تساوي 2.2 ev(تمثل القيمة النظرية لفجوة الطاقة) للمحلولP3HT



شكل (5-6) معادلة tauc الطريقة الغير لمباشرة للمحلول

يوضح العلاقة بين فجوه الطاقة (hv)على المحور الافقي و$^{1\2}$ (hvα) على المحور العمودي بطريقة الغير مباشرة للمحلول

نلاحظ بداية الخط المستقيم من المنحني ليقطع محور طاقة الفوتون وتكون قيمة فجوة الطاقة للمحلول Eg تساوي 2.2ev (تمثل القيمة النظرية لفجوة الطاقة) للمحلول

علما : يمثل الشكل (6-1) و الشكل (5-1) معادلة (tauc) بالطريقة المباشرة والغير مباشرة , يلاحظ أن قيم فجوة الطاقة بالطريفتين (العملية والنظرية) قيم متساوية وتكون نسبة الخطأ (صفر) .

(nm)λ	Eg=1240\λ (ev)	Eg= $(\alpha h\upsilon)^2$ (بطريقه المباشرة)	Eg=$(\alpha h\upsilon)^{1\backslash 2}$ (بطريقه الغير مباشرة)
562	2.2 ev	2.2 ev	2.2ev

جدول (5-2) يوضح نتائج فجوة الطاقة النظرية والعملية بالطريقة المباشرة والغير المباشرة للمحلول P3HT

الاستنتاج

6- الاستنتاجات

بعد ان تمكنا من حساب فجوه طاقه بطرقتين عمليه ونضريه. حصلنه على اقل فجوه طاقه هي 1.7 ev ويوفر البوليمر P3HT ذات خواص بصرية جيدة في استخدام الطاقة عند مقارنتها مع المعادن هو بوليمر ذو فجوة منخفضة مع تطبيقات في الخلايا الكهروضوئية العضوية.

فخفة وزنها تقلل من استهلاك الوقود في العربات والطائرات .وهي تفوق معظم المعادن بالنسبة الى قوتها ووزنها وقد تطورت البوليمرات فامتلكت خواص جيدة واصبحت اقتصادية التصنيع .كما امكن استخدامها للاغراض الهندسية فاصبحنا نستخدم المسننات والهياكل المصنعة من البوليمرات.

المصادر

5- المصادر :-

1) **Baumeister, P.W. (1961)، "Optical Absorption of Cuprous Oxide"، Physical Review، 121**

2) **Feynman, Richard (1963)، Feynman Lectures on Physics، Basic Books.**

3) **R. A. Smith, "Semiconductors", Cambridge press, 2P and P.ed. (1987).**

4) **Types of semiconductors**

5) **" Basic Properties of Semiconductors", eng.libretexts.org, Retrieved 5-8-2019.**

6) **"polymer", merriam-webster, Retrieved.**

7) **Painter P. C., Coleman M. M., Fundamentals of Polymer Science: an Introductory Text, CRC Press, 1997, p1.**

8) كتاب دكتور جمال الرفاعي البوليمرات تركيبها وخصائصها

9) **Poly(3-hexylthiophene): synthetic methodologies and properties in bulk heterojunction solar cellsA. Marrocchi, D. Lanari, A. Facchetti, L. Vaccaro, Energy Environ. Sci. 2012, 5, 8457.**

10) **IUPAC, Compendium of Chemical Terminology, 2nd ed. (the "Gold Book") (1997). Online corrected version:**

11) **J. Tauc, "Amorphous and liquid Semiconductors", Plenum press, London, N.Y., (1974).**

12)**M.A.Omar, "Elementary Solid State Physics Principle and Applications", P.35-578, (1985**

13)**D. A. Neamen," Semiconductor Physics and Devices ", University of New Mexico ,(1992).**