



وزارة التعليم العالي والبحث العلمي
جامعة ميسان – كلية العلوم
قسم الفيزياء



معرفة الخصائص الطيفية والكهربائية لجزيئة NKX_2677 قبل وبعد اضافة جزيئة

الكلوروكاربونيل المستخدمة في الخلايا الفوتو فولتائية

مقدم لكلية العلوم - جامعة ميسان جزئياً

استيفاء متطلبات الحصول على درجة البكالوريوس في العلوم

من قبل الطالبات

نور باسم خميس
ونور الهدى حيدر محذاب

بإشراف

(م.م. بهاء الدين كاظم قاسم)

الأهداء

إلى صاحب السيرة العطرة، والفكر المستنير؛

فلقد كان له الفضل الأول في بلوغي التعليم العالي

(والدي الحبيب)، أطال الله في عمره.

إلى من وضعتني على طريق الحياة، وجعلتني رابط الجأش،

وراعتني حتى صرت كبيراً

(أمي الغالية)،

إلى إخوتي؛ من كان لهم بالغ الأثر في كثير من العقبات والصعاب.

إلى جميع أساتذتي الكرام؛ ممن لم يتوانوا في مد يد العون لي

أهدي إليكم بحثي.

بِسْمِ اللَّهِ الرَّحْمَنِ الرَّحِيمِ

((نَرْفَعُ دَرَجَاتٍ مِّنْ نَّشَأٍ ۖ

وَفَوْقَ كُلِّ ذِي عِلْمٍ عَظِيمٌ))

(يوسف - ٧٦)

صدق الله العلي العظيم

الشكر والتقدير

قال تعالى (لئن شكرتم لأزيدنكم)

بسم الله والصلاة والسلام على خير مبعوث الأنام محمد بن عبد الله (صلى الله عليه وسلم)
واله وصحبه وسلم

الحمد والشكر لله الذي وفقني واعانني على انجاز هذا العمل واتمامه.

لا يسعنا بعد الانتهاء اعداد هذا البحث الا ان اتقدم بجزيل الشكر وعظيم الامتنان الى استاذي
الفاضل (بهاء الدين كاظم قاسم علي)

الذي تفضل بالأشراف على بحثي هذا حيث قدم لي كل النصيح والارشاد طيلة فترة الاعداد فله كل
الشكر والتقدير كما لا يسعني ان اتقدم بجزيل الشكر والعرفان الى جميع أساتذتي في قسم الفيزياء
لهم مني الشكر والتقدير وبالأخص الى رئاسة قسم الفيزياء
وتتوجه لكل من مد يد العون و علمنا وساهم في تعلمنا وايصالنا إلى هذه المرحلة ممن لن تسعفنا
الذاكرة في ذكرهم لمجازاتهم الله خير الجزاء

الخلاصة:-

تناول هذا البحث دراسة الخواص الفيزيائية والكهربائية لجينة (2677-NKX) ذات الاهتمام الواسع حديثا من قبل المختصين بمجال الصبغات العضوية ولها اهمية في تحويل الضوء المرئي-561.80 nm 611.58 nm

حيث أظهرت النتائج بأن جزيئة (2677-NKX) بعد اضافة الجزيئة الثانية جزيئة (٢٢) تمتلك فجوة الطاقة (٢,٥٠) اما الطول الموجي الاعظم كانت قيمته (٦١١,٨٥nm) وأن قيمة $LHE(\lambda)$ وجدنا قيمته (٠,١٦) بعد اضافة الجزيئة الثانية أما قيمة دلتا (٠,٥٥ev) اما قيمة فولتية الدائرة المفتوحة Voc كانت قيمته (١) اما Jsc لاحظنا انخفاض في قيمتها بعد اضافة الجزيئة الثانية (٢٢) حيث اصبحت (٠,٠٨٦٠٣)

ومن خلال دراسة اضافة جزيئه الكلوروكاربونيل (2677-NKX) استطعنا أن تحسن في الطول الموجي الاعظم λ_{max} حيث اصبحت قيمته (611.58nm) وهي تمثل الطيف المرئي للضوء الاحمر

قائمة المحتويات

ت	الموضوع	
	الخلاصة	٥
	الفصل الاول	
١.1	المقدمة	٨
١.2	انواع الطاقة	٩
١.3	مصادر الطاقة	1١
١.4	الخلايا الشمسية	1٢
١.5	اجيال الخلايا الشمسية	1٣
1.6	الخلايا الشمسية الصبغية Dssc	14
١,٧	الهدف	١٥
	الفصل الثاني	
2.1	Gaussian	١٧
2.2	برنامج ٩,٠ Gaussian	١٨
2.3	الدالة الوظيفية للكثافة (DFT, Density Functional Theory)	٢١
2.4	B3LYP	19
2.٥	طرق تهئية الجزيئية باستخدام B3LYP	2٢
	الفصل الثالث	
3.1	المقدمة	٢٤
3.2	الاستنتاج	٢٩

الفصل الأول

الفصل الاول

١,١ المقدمة

الطاقة هي المصدر الرئيسي للحصول على الضوء والحرارة والقدرة على التنقل من مكان إلى آخر وتمتاز هذه الطاقة بأنها لا تقنى ولا تتحدث وإنما تتحوّل من شكلٍ لآخر فهي ثابتة في الطبيعة. لقد استطاع الإنسان الوصول إلى الطاقة الآمنة في غذائه من خلال العمليات الحيوية التي كان يقوم بها جسمه، ثم ما لبث أن لاحظ إمكانية الحصول على النار من خلال حكّ قطعيتين من الخشب معاً أو حكّ حجرين معاً فتننتج الشرارة التي استخدمها في إشعال النار بالأوراق واستخدام هذه النيران في طهو الطعام، كما استخدم الحيوانات من أجل الانتقال من مكانٍ لآخر، ثم توصل إلى بناء القوارب لعبور البحار والمحيطات ليضطر بعدها إلى صناعة المركبات المتحركة اعتماداً على مصادر الطاقة المختلفة. استطاع التوصل إلى الطاقة الحرارية الكبيرة من حرق عناصر النحاس والبرونز بعد أن كان معتمداً على حرق الأخشاب للحصول على هذه الطاقة الحرارية، ومع توالي الاكتشافات استطاع اكتشاف الفحم الحجري في العصور الوسطى واختراع المحرك البخاري في القرن الثامن والتاسع عشر، ثم توصل إلى اكتشاف النفط للتمكن من إنتاج الكهرباء في الخمسينيات، ثم توصل إلى استخدام الطاقة النووية كبديلٍ للطاقة الناتجة من النفط.

١,٢ انواع الطاقة

١- **الطاقة الجاذبية:** تتضمن التجاذب بين جسمين بناءً على كتلتهما، ويُمكن أن تكون هذه الطاقة بمثابة أساس للطاقة الميكانيكية، مثل الطاقة الكامنة لجسم موضوع على رف

٢- **الطاقة الحرارية:** هي ببساطة الحرارة، الناتجة عن حركة الجزيئات والذرات داخل المواد، وبالتالي فإنّ الطاقة الحرارية تمثل الطاقة الحركية الداخلية للجسم، فمثلاً يتمّ تحويل الطاقة الحرارية إلى طاقة ميكانيكية في المحرك البخاري أو التوربينات، ويتمّ تحويل الطاقة الحرارية إلى كهرباء في محطة توليد الطاقة الحرارية، كما يُمكن استخدام الطاقة الحرارية الموجودة في باطن الأرض (الطاقة الحرارية الأرضية) للتدفئة أو لتوليد الطاقة.

٣- **الطاقة الكيميائية:** هي الطاقة المخزنة في روابط الذرات والجزيئات، ويُمكن لبعض التفاعلات الكيميائية ان تكسر الروابط لتحرير طاقتها، فأتثناء الاحتراق في التفاعل الطارد للحرارة، يقوم النفط، والغاز، والفحم، والكتلة الحيوية بتحويل طاقته الكيميائية إلى حرارة، وغالبًا يكون على شكل ضوء، وكذلك تحدث التفاعلات الكيميائية في البطاريات بتحويل الطاقة الكيميائية إلى كهربائية.

٤- **الطاقة النووية:** هي الطاقة المخزنة في مركز الذرات، وبالتحديد في الروابط بين الجسيمات (البروتونات والنيوترونات) التي تُشكل نواة الذرة، فعندما يتمّ تحويل النوية الذرية خلال التفاعل النووي يتمّ إطلاق الحرارة، وفي محطات الطاقة النووية يتمّ تقسيم نوى اليورانيوم في عملية تعرف بعملية الانشطار ويتمّ تحويل بعض الحرارة المنبعثة إلى كهرباء وفي النجوم مثل الشمس، يتمّ إطلاق الطاقة الذرية عندما تتحد النوى في عملية تعرف باسم الاندماج

٥- **الطاقة الكهربائية:** هي الطاقة التي يتمّ نقلها من نظام إلى آخر باستخدام الكهرباء، أو هي الطاقة المخزنة في حالة الطاقة الكهروستاتيكية، بمعنى آخر تُعدّ الطالقا الكهربائية حركة الجسيمات المشحونة، وتُعدّ الكهرباء حاملة للطاقة وليست نوعًا من الطاقة في حد ذاتها، ولكن مصطلح (الطاقة الكهربائية) شائع الاستخدام في حياتنا، وتمثل المولدات والبطاريات أحد أمثلة للأنظمة التي يُمكن أن توفر الكهرباء، في حين أنّ المقاومات والمصابيح الكهربائية والمحركات الكهربائية هي أمثلة على الأنظمة التي تستقبل الكهرباء.

٦- **الطاقة الكهرومغناطيسية:** الطاقة الكهرومغناطيسية (أو الطاقة المشعة) هي الطاقة الناتجة من الضوء أو الموجات الكهرومغناطيسية، ويحتوي أي شكل من أشكال الضوء على طاقة كهرومغناطيسية، بما في ذلك أجزاء من الطيف التي لا يمكننا رؤيتها بالعين المجردة، ومن الأمثلة عليها: أمواج الراديو، وأشعة جاما، والأشعة السينية، والموجات الميكرويف، والأشعة فوق البنفسجية.

٧- **الطاقة الصوتية:** هي طاقة الموجات الصوتية التي تنتقل عبر الهواء أو أي وسط آخر، ومن الأمثلة عليها: صوت الإنسان.

٨- **طاقة التآين:** وهي شكل من أشكال الطاقة التي تربط الإلكترونات بنواة ذرته، أو الأيون، أو الجزيء، مثل: طاقة التآين الأولى للذرة هي الطاقة اللازمة لإزالة إلكترون واحد بشكل كامل من الذرة.

١- **الطاقة المتجددة** تُعرّف الطاقة المتجددة بأنها الطاقة التي تنتجها الموارد الطبيعية، والتي تتجدد بشكل طبيعي في غضون فترة زمنية تمتد لبضعة أعوام، مثل: ضوء الشمس، والرياح، والأمطار، والأمواج، والمد والجزر، والطاقة الحرارية الجوفية وتتمثل مصادر الطاقة المتجددة إيجابيات **الطاقة المتجددة** بأنها مصادر مُتجددة لا نهاية لها، أنها مصادر صديقة للبيئة لا تنتج أي نوع من الغازات السامة، بالإضافة إلى أنها مُتاحة وغير محدودة بأمكان مُحددة سلبيات **الطاقة المتجددة**، فهي كلفة التّركيب العالية ومشاكل تخزين الطاقة الناتجة عنها بالإضافة إلى تأثر كمية الطاقة الناتجة عنها بالطّقس

٢- **الطاقة غير المتجددة** تستهلك مواردنا التي لا نستطيع تعويضها إن نَفِدَت و اسهل مثال على الطاقة الغير متجددة هو نزين) الذي نستخدمه لتشغيل سيارتنا و الفحم الذي يحترق في محطات تتمثل الطاقة. ف بمجرد أن يتم إستخدامه فإنه يضيع إلى الأبد إيجابيات **الطاقة غير المتجددة** للطاقة غير المتجددة مزايا عدة، فهي متوفرة ومتاحة للاستخدام، كما أن عمليات استخراجها من مصادرها واستخدامها ليست باهظة التكاليف، ومنصات استخراجها لا تشغل حيزًا كبيرًا على عكس مصادر الطاقة المتجددة، وهي طاقة تتواجد بشكل دائم في الطبيعة ويتم توليدها طبيعيًا

سلبيات **الطاقة الغير متجدده** واحدة من مشاكل الطاقة الغير متجددة هي التكلفة العالية لمعالجة التلوث والحفاظ على الصحة نظرًا للسلبيات البيئية الناتجة عن استخدامها. فعمليات استخراج البترول والغاز الطبيعي، وحرقتها لتوليد الطاقة، يؤدي إلى إطلاق العديد من الغازات والجزيئات الملوثة في الجو، مما يسبب ضررًا بالصحة والبيئة

١,٤ الخلايا الشمسية:

الخلايا الشمسية هي أداة لتحويل الطاقة الشمسية او الضوئية بمعنى آخر إلى طاقة كهربائية بشكل مباشر وهي اجهزة بسيطة جدا مصنوعة من مواد ناقلة تمتلك القدرة على امتصاص الضوء وتحويل جزء من الطاقة الضوئية الممتصة الى حوامل التيار الكهربائي (ثقوب والكترونات) ان الخلية الشمسية هي ثنائي مصمم ومنتج بعناية ليمتص طاقة الضوء بكفاءة من الشمس ويحولها الى طاقة كهربائية تربط الخلايا الشمسية كهربائيا مع بعضها البعض لنحصل على لواقط كهروضوئية وبتجميعها نحصل على مصفوفة لواقط يستخدم الربط على التسلسل للحصول على الجهد اللازم كما ان الربط على التوازي يعطي التيار المطلوب.

١,٤,١ مميزات الألواح الشمسية:

- ١- الطاقة الشمسية مستدامة ومتجددة اي انها لا تنفذ، فهي مصدر طبيعي من الشمس.
- ٢- الألواح سهلة التركيب ولا تحتاج الى مهارات او معدات خاصة ذلك خلاف أ لمحطات الرياح التي تتطلب إمكانيات تنفيذية خاصة.
- ٣- مكن تثبيت الألواح الشمسية فوق أسطح المباني.
- ٤- يمكن استخدامها في المواقع النائية التي لا تصلها الكابلات والتوصيلات الكهربائية.
- ٥- هي أفضل وسيلة للحصول على الكهرباء في الصحاري والبحار والمرتفعات الجبلية.
- ٦- تستطيع ان تلبي حاجة الأقمار الصناعية للكهرباء.
- ٧- لا تسبب ازعاج او ضرر بيئي عند استخدامها في المباني والمنازل.
- ٨- تعتبر مصدر للكهرباء يمكن عبرها الاستغناء عن الفواتير العالية للكهرباء

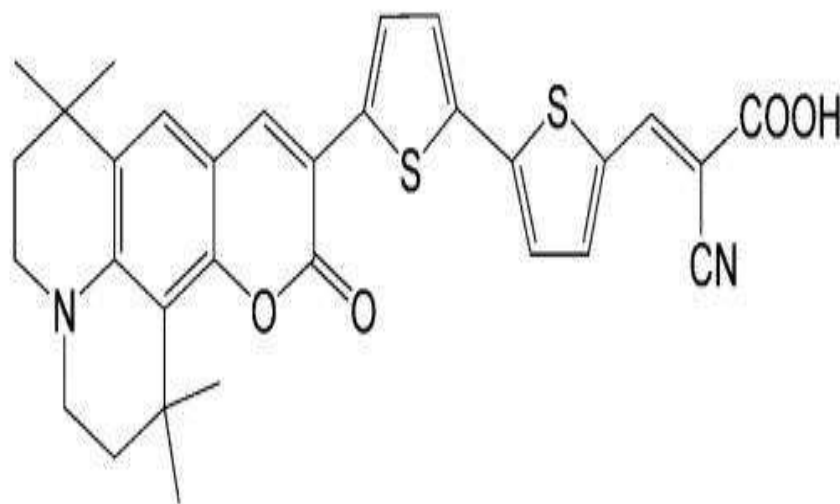
١,٥ الخلايا الشمسية تتصنف الى ثلاثة أجيال رئيسية

١- الجيل الأول يمثل خلايا شرائح السليكون الشائعة الاستخدام بشكلها التقليدي وتحمل القطاع الأكبر في عالم صناعة الخلايا الكهروضوئية، وتتوفر بنوعين أحادي التبلور (مونو) ومتعددة التبلور (بولي) وتتميز الخلية الأحادية التبلور بأنها أعلى كفاءة من الخلية المتعددة التبلور.

٢. الجيل الثاني يدعى بشرائح الأغشية الرقيقة وتتضمن السليكون الغير متبلور وتريليدي الكاديوم (CdTe) وخلايا (CIGS) وتعتبر الأكثر فعالية من سابقتها في استخدامات مشاريع الطاقة الكبيرة وأنظمة المباني المتكاملة أو الأنظمة الصغيرة المستقلة.

٣. الجيل الثالث يتضمن العديد من تقنية الأغشية الرقيقة (متعدد الوصلات الحديثة النشاء والظهور ولا زالت في مرحلة البحث والتطوير ولم يتم إنتاجها بصورة تجارية).

صبغة (NKX_2677) هي صبغة أطيايف امتصاص الأصباغ مشتقة من صبغة الكومارين والتي تم تصنيعها للحصول على خلايا شمسية فعالة حساسة للضوء



NKX-2677

(الشكل ١-١) جزيئه ال NKX_2677

١,٦ الخلايا الشمسية الصبغية Dssc

هي صنف من الخلايا الشمسية منخفضة التكلفة تنتمي إلى مجموعة الخلايا الشمسية رقيقة الغشاء وترتكز على صفيحة من أنصاف النواقل توضع بين مصعد حساس للضوء وكهرل وبما أنها مصنوعة من مواد منخفضة التكلفة ولا تحتاج إلى أجهزة دقيقة لتصنيعها، أصبحت هذه الخلية جذابة من الناحية التقنية. وبالمثل، يمكن أن تكون تكاليف تصنيعها أقل تكلفة من التصاميم الأقدم للخلايا الصلبة كما يمكن تصميمها على شكل ألواح مرنة وقوية ميكانيكياً وبالتالي لا تتطلب نظام للحماية من الحوادث البسيطة على الرغم من كفاءة تحويلها أقل من أفضل خلايا الأغشية الرقيقة

١,٦,١ مكونات الخلية الشمسية الصبغية

إن مكونات الخلايا الشمسية الصبغية الرئيسية هي:

١-المصعد.

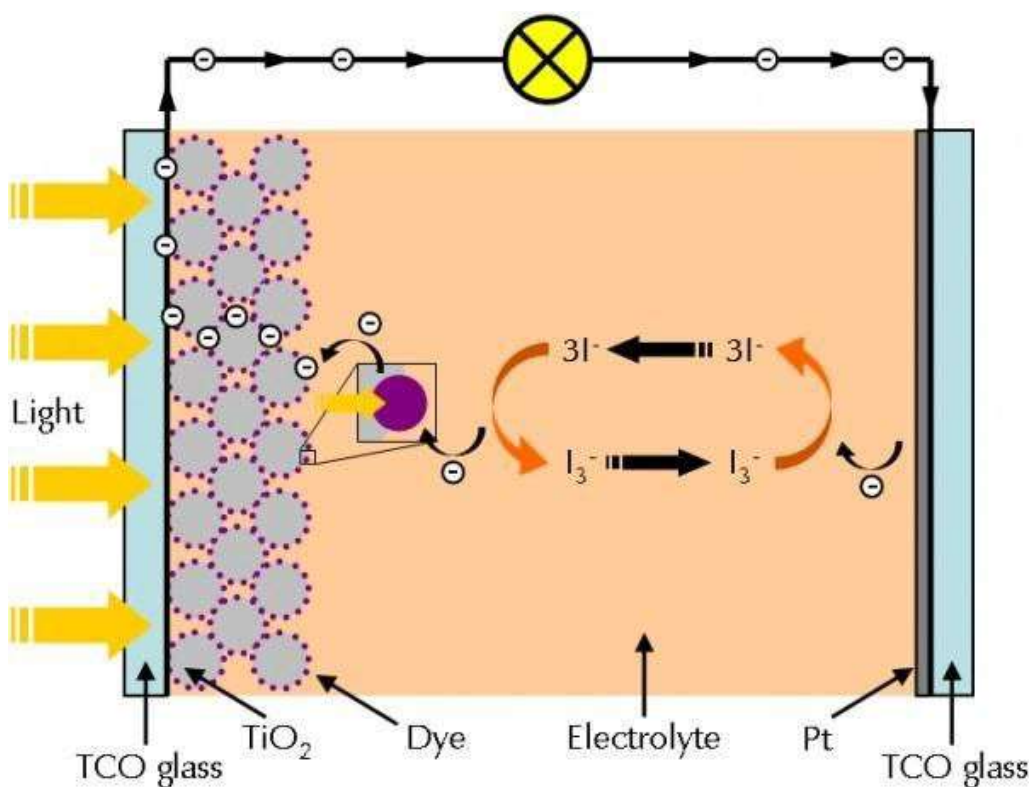
٢-المهبط.

٣-الصبغ.

٤-الوسيط الإلكتروني.

١,٦,٢ نشأت الخلايا الشمسية الصبغية (DSSCs)

كبدل موثوق تقنياً واقتصادياً للخلايا الشمسية المعتمدة على الوصلة $p-n$ في أواخر الستينات تم اكتشاف أنه يمكن توليد الكهرباء من خلال إضاءة الأصباغ العضوية في الخلايا الكهروكيميائية حيث تم استخدام الكلوروفيل في جامعة بيركلي بكاليفورنيا تم تصنيع أول قطب كهربائي من أكسيد الزنك (ZnO) المحسس بالكلوروفيل في عام 1972 ولأول مرة من خلال الحقن الإلكتروني لجزيئات الصبغة في نصف الناقل ذو نطاق الطاقة الكبير تم تحويل الفوتونات إلى كهرباء في البداية كانت كفاءة هذه الخلايا الشمسية ذات الصبغة المحسنة ضعيفة جداً حيث أن الطبقة الأحادية من جزيئات الصبغة كانت قادرة على امتصاص الضوء الساقط بنسبة تصل إلى 1% فقط تم تحسين الكفاءة من خلال تحسين مسامية القطب الكهربائي باستخدامه كمسحوق أكسيد ناعم بحيث يمكن تحسين تغلغل الصبغة بداخله ونتيجة لذلك يمكن أيضاً تحسين كفاءة الضوء



(الشكل ٢- ١) طريقه عمل الخلايا الشمسية الصبغية

١,٧ الهدف

الهدف من البحث دراسة الخواص الكهربائية والطيفية لجزيئة NKX_2677 باستخدام طريقة دالة الكثافة الوظيفية **DFT** وذلك بإضافة جزيئة الكلوروكاربونيل بدل ذرة الهيدروجين المرتبطة بالكربون ذات الرقم ٢٢ وتم التحسين في قيمة أعظم طول موجي والحصول على قيم مختلفة ل ΔG وتم تحسين من فجوة الطاقة وانخفضت فولتيه الدائرة المفتوحة والكفاءة .

الفصل الثاني

الفصل الثاني

Gaussian 9 ٢,١

غاوسيان هو عبارة عن حزمة برمجيات حاسوبية ل الكيمياء الحسابية صدر في عام 1970 من قبل جون بوبل ومجموعة الباحثين معه وقد تم تحديثه باستمرار منذ ذلك الحين وينشأ الاسم من استخدام بوبل للمدارين الغوسية لتسريع عمليات حساب البنية الإلكترونية الجزيئية بدلا من استخدام المدارات من نوع سلاتر، وهو الاختيار الذي تم إجراؤه لتحسين الأداء على قدرات الحوسبة المحدودة لأجهزة الكمبيوتر التي كانت موجودة آنذاك لحسابات هار تري- فوك. الإصدار الحالي من البرنامج هو غاوس 16 كانت متاحة أصلا من خلال تبادل برنامج كيمياء الكم، وكان مرخصا في وقت لاحق من جامعة كارنيجي ميلون، ومنذ عام 1987 تم تطويرها ومرخصة من قبل غاوسيان شركة جاوز أصبحت شعبية بسرعه و تستخدم على نطاق واسع برنامج البنية الإلكترونية. البروفيسور بوبل وطلابه وما بعدهم الذين ق اموا بدفع تطوير الحزمة، بما في ذلك البحوث المتطورة في مجال كيمياء الكم وغيرها من المجالات.

يمكن أن يعمل برنامج Gaussian 9 على

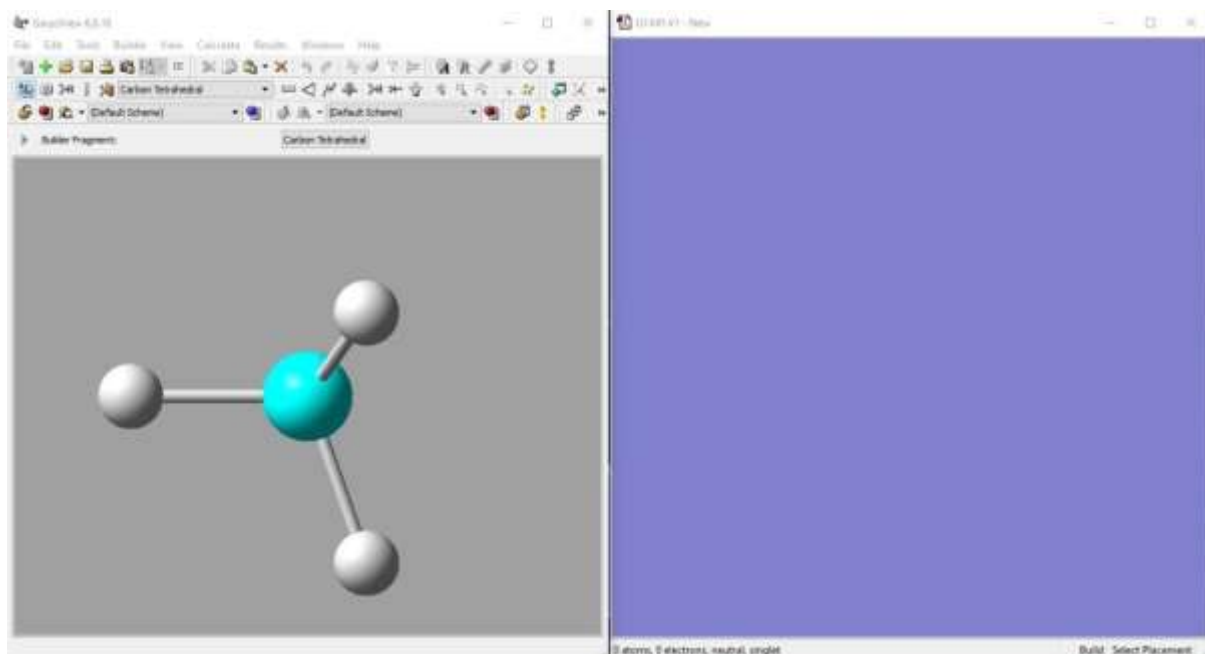
- امكانيه تحليل تركيز الالكترونات الذرات وتركيز الشحنات الالكترونية في المركبات الكيميائية
- امكانيه تحليل الاشكال الكمومية للمركبات ال الكيميائية
- امكانيه تحليل الطاقات والتراكيز الحراريه للمركبات الكيميائية

مميزات ومواصفات برنامج Gaussian 9

- ١- لديه عدد كبير من الخوارزميات الهامة والأساسية
- ٢- نمذجة مجموعة متنوعة من الموضوعات المتعلقة بالكيمياء الحسابية
- ٣- تحسين الهندسة ونمذجة التفاعلات الكيميائية وتحليل الاهتزاز
- ٤- التحسين التلقائي للاهتزازات أو طاقات النقاط
- ٥- سهولة استبدال نظائر العناصر وتغيير درجة حرارتها وخصائص ضغطها
- ٦- تعريف بسيط للشظايا وخصائصها الجزيئية التحسين التلقائي لهياكل الانتقال
- ٧- حدد وفرز الأوضاع العادية المفضلة أثناء حسابات التردد بالإضافة إلى حفظ وقراءة هذه الأوضاع
- ٨- استعادة البيانات من ملفات نقاط التفتيش المتعددة لإجراء العمليات الحسابية

Gaussian (09) 2.2

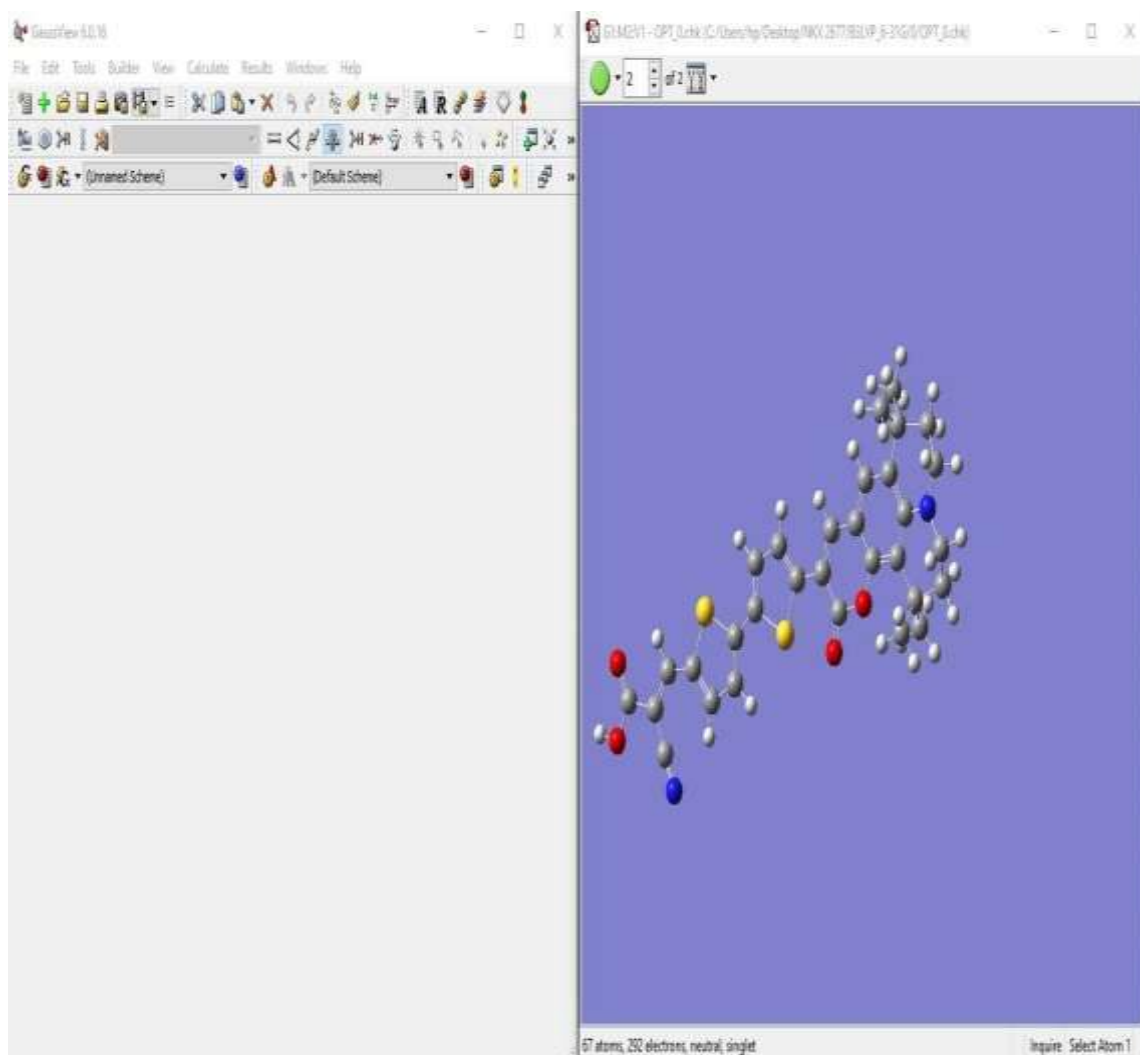
وهو يوفر أحدث النماذج **gaussian** هو أحدث إصدار من سلسلة **09 windows. Gaussian** الامكانيات المتاحة اليوم، والذي يتضمن العديد من الميزات الجديدة والتحسينات كثيرا لتوسيع نطاق المشاكل والنظم التي يمكن دراستها.



(الشكل ٢-١) واجهة البرنامج

يحتوي البرنامج على عدة ايقونات في الصورة الواضحة في الأعلى من هذه الأيقونات ايقونة الجدول الدوري أيقونة التحديد وايقونة اضافته رابطة وإزالة رابطة وايقونة حذف ملف وعند الضغط على أيقونة

Clean يعطي افضل شكل او بنيه فراغيه



(الشكل ٢-٢) أعلاه يمثل واجهة البرنامج عند رسم صبغة NKX_267

ثم يجب عند استخدام البرنامج تهيئه البنية الفراغية للجزيئة او الصبغة لحساب المعلومات الخاصة بها نختار تهيئه البنية الفراغية (**Optimization**).

G1:M2:V1 - Gaussian Calculation Setup

Title: **NKX**

Keywords: **# opt b3lyp/6-31g geom=connectivity**

Charge/Mult.: **0 1**

Job Type Method Title Link 0 General Guess Pop. PBC Solvation Add. Inp. Preview

Optimization ▾

Optimize to a Minimum ▾ ☐ Use RFO step ☐ Use Quadratic Macrostep

Force Constants Default ▾ ☐ Use tight convergence criteria

Help

Additional Keywords: Update

Scheme: (Unnamed Scheme) ▾  Assign to Molecule Group

Submit... Quick Launch Cancel Edit... Retain Defaults

(الشكل ٣-٢) تهيئه البنيه الفراغي لجزيئة NKX_2677

٢,٣ الدالة الوظيفية للكثافة (DFT Density Functional Theory)

هي أحد أهم الطرق المستعملة في الفيزياء والكيمياء النظريين وبواسطتها نستطيع أن نحدد خصائص نظام متعدد الجسيمات (الطاقة الكلية للنظام، الكثافة الإلكترونية للمدارات، المعاملات الفيزيائية والضوئية للمادة....)، وهي واحدة من أكثر الطرق استخداماً في العمليات الحسابية الكمومية بسبب إمكانية تطبيقها على أنظمة متنوعة وبتكلفة وسرعة عالية جاءت نتائج (DFT) النظرية قريبة على نحو مرضٍ تماماً مع البيانات التجريبية وبتكاليف منخفضة نسبياً مع الطرق التقليدية التي تستهلك المال والوقت معاً، ولكن على الرغم من التحسن الكبير الذي طرأ مؤخراً والتحسين المستمر للبرامج، لا تزال هناك بعض الصعوبات في استخدام نظرية الكثافة الوظيفية (DFT) لوصف التفاعلات بين الجزيئات وخاصة القوى الضعيفة (فان دير وال)، الحالات الانتقالية للإلكترونات، حساب الفجوة (band Gap) في أشباه الموصلات، هذه الثغرات يمكن أن تؤثر على نتائج (DFT) على الأقل عندما تستعمل وحدها دون تصحيح» حيث يتم تطوير طرق جديدة لـ (DFT) للتغلب على هذه المشكلة، من خلال إحداث تعديلات على الدالة الوظيفية أو إدراج شروط في برامج الحساب وهو موضوع البحث الحالي في هذا المجال .

2.4 B3LYP هي اختصار لكلمة the Becke 3 parameter Lee Yang Parr

وهي طريقة حسابية لحساب الكثافة الإلكترونية للجزيئات والمركبات الكيميائية باستخدام الحسابات الكمومية تم تطوير هذه الطريقة من قبل جون بيردوس بيك تستخدم الطريقة مزيج من الدوال النظرية الكثافية الوظيفية DFT والدوال الكثافية الوظيفية النمطية HF للحصول على دقة أفضل في إيجاد الحالة الأساسية للجزيئات والمركبات يتم استخدام B3LYP في العديد من التطبيقات الكيميائية مثل دراسة الخواص الكيميائية والطيفية للمركبات العضوية والمعادن والبروتينات والأحماض النووية يتطلب استخدام حسابات كمومية متقدمة ومعقدة ولذلك فإنه يستخدم عادة في البحوث الأكاديمية وفي صناعة الكيمياء الحيوية والدوائية والمواد وعلوم الأرض والبيئة و يتميز بدقته العالية وتناسبه للحسابات الكيميائية المعقدة ولكن يتطلب استخدام موارد حاسوبية كبيرة ووقت حساب طويل

٢,٥ B3LYP - طريقة تهينة الجزئية باستخدام

G1:M2:V1 - Gaussian Calculation Setup

Title: **NIKX**

Keywords: **# opt b3lyp/6-31g geom=connectivity**

Charge/Mult.: **0 1**

Job Type	Method	Title	Link 0	General	Guess	Pop.	PBC	Solvation	Add. Inp.	Preview
☐ Multilayer ONIOM Model										
Method: Ground State DFT... Default Spin B3LYP										
Basis Set: 6-31G (,)										
Charge: 0 Spin: Singlet										
☐ Use sparse matrices										
										Help
Additional Keywords:										Update
Scheme: (Unnamed Scheme)										Assign to Molecule Group
Submit... Quick Launch Cancel Edit... Retain Defaults										

(الشكل ٢-٤) طريقة تهينة الجزئية باستخدام B3LYP

الفصل الثالث

الفصل الثالث

٣,١ المقدمة:

تعتبر الخصائص الطيفية والكهربائية من الخصائص المهمة لأنها تعطي وصفا كاملا لتركيب الجزيئة ومستويات الطاقة فيها وكثير من المعلومات الأخرى ان كل جزيئة تمتلك ثلاث انتقالات طيفية رئيسية هي الانتقالات الالكترونية التي تقع تردداتها في المنطقة المرتبة وفوق البنفسجية والانتقالات الاهتزازية والتي تقع تردداتها في المنطقة تحت الحمراء القريبة والمتوسطة والانتقالات الدورانية والتي تقع تردداتها في المنطقة تحت الحمراء البعيدة والموجات الميكروية وبما ان الجزيئات في حالة حركة الاهتزازية دائمة حتى عند درجة حراره الصفر المطلق لذلك تعتبر دراسة الانتقالات الاهتزازية للجزيئة مصدرا جيدا للمعلومات حول تركيب الجزيئة .

J_{sc}	Voc	ΔG	LHE (λ_{max})	$\lambda_{max}nm$	Energy Gap(ev)	molecule
-0.96539	-1.10	-3.03	0.97	561.80	2.35	0
-0.08603	-1	-0.55	0.16	611.58	2.50	٢2

1- Voc (فولتية الدائرة المفتوحة) هو الفرق في الجهد الكهربائي بين طرفين للخلية تحت الإضاءة عندما تكون الدائرة مفتوحة (لا) يوجد تدفق للتيار يتوافق الحد الأقصى من Voc لـ DSSC مع الفرق بني مستوى الطاقة في CB

2- (الكفاءة) J_{sc} هو التيار الضوئي لكل وحدة مساحه هو جزء لا يتجزأ من كثافة التيار الضوئي ذات الدائرة القصيرة. يعتمد هذا على معامل امتصاص الصبغة والتفاعل بين الصبغة و TiO_2 النانوي. يمكن تحديده باستخدام المعادلة التالية

$$J_{sc} = \int_{\lambda} LHE(\lambda) \Phi^{inject} \eta^{collect} d\lambda \dots \dots (1)$$

3- nolle ($\eta^{collect}$) هي كفاءة جمع الإلكترون ، والتي يمكن افتراض أنها ثابتة للأنظمة التي تختلف فقط في الصبغة المستخدمة Φ^{inject} هي العائد الكمي لحقن الإلكترون وبالتالي، للحصول على قيمة عالية وتعرف أيضاً قيمة ($\eta^{collect}$) DSSC على أنها نسبة الحد الأقصى للطاقة الكهربائية الناتجة من DSSC إلى طاقة ضوء الشمس الساقط وبالتالي ، للحصول على قيمة $\eta^{collect}$ عالية ، يعد تحسين قيم **J** و **V** للخلية أمراً ضرورياً. حتى الآن ، تم تحسين القيم تدريجياً من خلال إزالة العلامات الجزيئية لمحفزات الصبغة. تصميم وتركيب أصباغ عضوية أكثر كفاءة لـ DSSCs ، حيث التفاعلات بين الأصباغ المجاورة على سطح TiO_2 ،

ترتبط الكفاءة العالية لتحويل الضوء إلى الكهرباء بالقيم العالية لكثافة تيار الدائرة القصيرة (**sc**) لإعطاء كفاءة عالية في حصاد الضوء ، يجب أن تحتوي الصبغة العضوية على معاملات امتصاص مولارية عالية على المنطقة الواسعة من ضوء الشمس ، لتوفير تيار صوتي كبير.

$$\Delta G_{inj} = E_{ox}^{dye4} - E_{CB} \dots \dots \dots (2)$$

4- في الوقت نفسه يرتبط J_{sc} ارتباطاً مباشراً بكفاءة حقن الإلكترون ، والتي تتناسب عكساً مع الطاقة الحرة لحقن الإلكترون (ΔG) ؛ من المتوقع أن تحتوي قيم الأصغر على قيم J_{sc} أعلى. يتم التعبير عن ΔG كـ

حيث E_{ox}^{dye*} هي حالة الطاقة الكامنة للأكسدة المثارة و **ECB** هي الطاقة الكامنة لخفض الطاقة الكامنة لنطاق

يتم التعبير عن ($ECB = 4.0 \text{ eV}$) TiO_2 . التوصيل

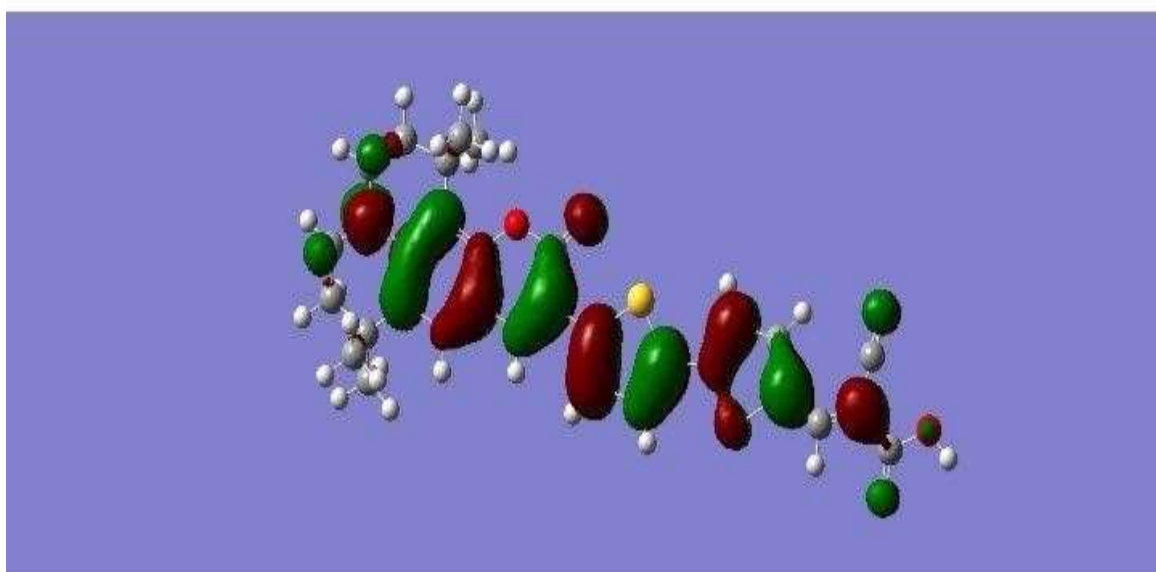
$$E_{ox}^{dye}$$

5- بينما $LHE(\lambda)$ هي كفاءة حصاد الضوء عند طول موجة معين ، ترتبط كثافة تيار الدائرة القصيرة (sc) أيضًا ارتباطًا مباشرًا بكفاءة حصاد الضوء (LHE) ، والتي يتم التعبير عنها بالمعادلة

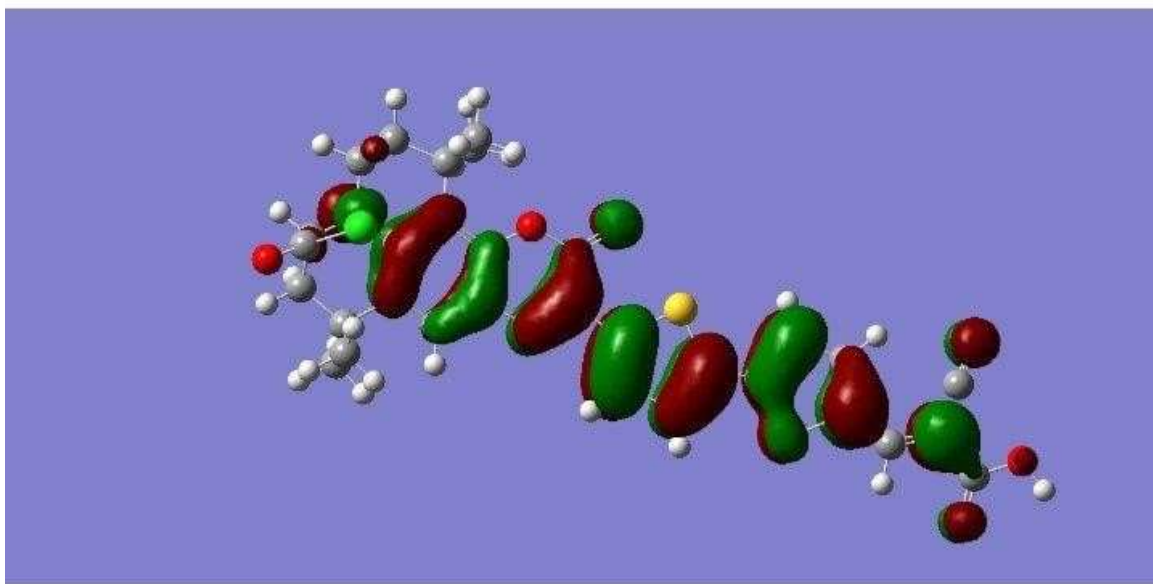
$$LHE(\lambda_{max})=1-10^{-f}.....(3)$$

6 - حيث التردد f هي قوة المذبذب المرتبطة بطول موجة الامتصاص الأقصى (λ_{max})

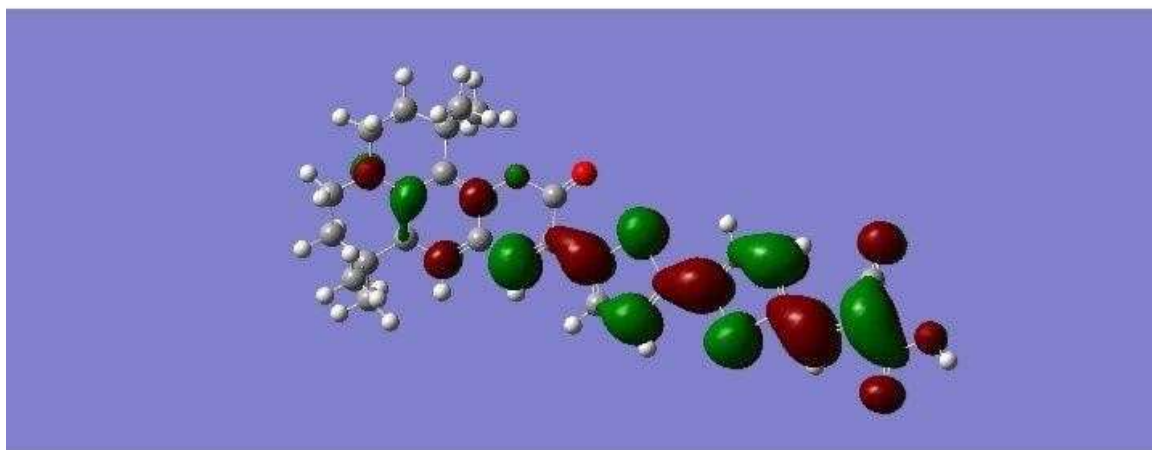
7-Homo and Lumo Level وهي من مستويات الطاقة المهمة في الجزيئة يرمز لأعلى مدار جزيئيه ب $Homo$ والأدنى مدار جزيئي $Lumo$



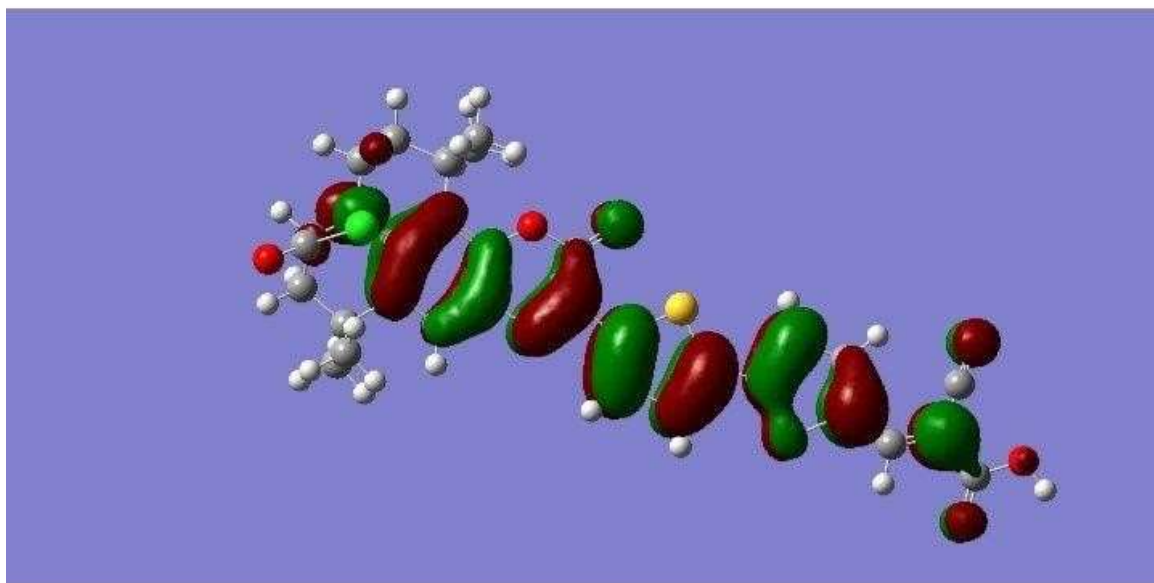
الشكل (١-٣) HOMO-0



الشكل (٣-٢) HOMO-22



الشكل (٣-٣) LUMO-0



الشكل (٤-٣) LUMO-22

٣,٢ الاستنتاج:-

من خلال دراسة الخواص الفيزيائية والكهربائية لجزيئة (2677-NK) باستخدام برنامج ٠٩ GAUSSIAN 9 وباستخدام طريقة (B3LYP) وجد ان

١- فجوة الطاقة : في الجزيئة (٠) حصلنا على فجوة الطاقة ٢,٣٥ اما بعد اضافة جزيئة ثانية (٢٢) لاحظنا انخفاض قليل في فجوة الطاقة حيث أصبحت ٢,٥٠ .

٢- $\lambda_{max}(nm)$ في الجزيئة (٠) كان الطول الموجي الاعظم ٥٦١,٨٠ اما بعد اضافة الجزيئة (٢٢) لاحظنا زيادة في الطول الموجي الاعظم حيث اصبح ٦١١,٥٨

٣- λ_{max} LHE:- في الجزيئة (0) اذا كان ٠,٩٧ اما بعد اضافة الجزيئة (٢٢) اصبح ٠,١٦ حيث انخفض كثيرا

٤- ΔG : عند الجزيئة (٠) اذا كان ΔG (٣,٠٣) وبعد اضافة الجزيئة (٢٢) اصبحت قيمته (1)

٥- V_{oc} : عند الجزيئة (٠) كانت قيمة V_{oc} (1.10) وبعد اضافة الجزيئة (٢٢) اصبحت (1)

٦- الكفاءة J_{sc} : الكفاءة في الجزيئة (٠) كانت (96539) اما بعد اضافة الجزيئة (٢٢) اصبحت الكفاءة قيمتها (0.08603)

المصادر

1. ↑ Mort Walker (1996), CONCEPT OF ENERGY, United States: Centre Daily Times, Page 8, Part Chapter 2. Edited.
2. ^ "Scientific Forms of Energy", www.ei.lehigh.edu,10-2008 ,Pages 1,3, Retrieved 15-12-2019. Edited. What is energy?", www.eia.gov,11-12-2018 , Retrieved 19-1-2020. Edited.
3. "Computational Software". www.ch.ic.ac.uk..
4. "Comments on the "Banned by Gaussian" Website | Gaussian.com". www.gaussian.com Retrieved 2017-11-20.
5. Solar cell: www.britannica.com^l , August/01/2020 | 06:01 AM
6. How Solar-powered Sunglasses Work: science.howstuffworks.com August/01/2020 | 06:01 AM
7. Dye-Sensitized Solar Cells: Fundamentals and Current Status: www.ncbi.nlm.nih.gov ,August/01/2020 | 06:02 AM
8. Grätzel Cells: www.mpoweruk.com ,August/01/2020 | 06:02 AM
9. DSSC: Dye Sensitized Solar Cells: www.gamry.com
10. Second Quantum Theory Brian Clegg Frank Close.
11. Transcending the Speed of Light Consciousness Quantum Physics and the Marc Seifer.
12. GENERAL SCIENCE SOLVED PAPERS YCT EXPERT TEAM
13. The Physics of Exciton-Polariton Condensates Konstantinos Lagoudakis