الملخص

بناءاً على نظرية الاضطراب في الميكانيك الكمي واعتماداً على قاعدة فيرمي الذهبية، اشتق نموذج كمي لحساب معدل الانتقال الالكتروني خلال نظام الواهب – المستقبل في العمل الحالي, والذي يتألف من شبه موصل- صبغة مذابة في مذيبات مختلفة.

أستخدم شبه الموصل ثنائي أكسيد التيتانيوم، وشبه الموصل ثنائي أكسيد القصدير كواهب مع صبغة الثايوبايرونين، صبغة المثلين الزرقاء، وصبغة السفرانين ت والمذابة في مذيبات مختلفة مثل الاسيتونترايل، الايثانول، الاسيتون، 1- بروبانول، 1-بيوتانول، ثنائي كلوريد الايثان، ثنائي كلوريد الميثان، الكلوروفورم، وثنائي الأوكسجين لتكوين معقد كمستقبل.

حسبت طاقات أعادة الترتيب بين شبه الموصل ثنائي أكسيد التيتانيوم، وشبه الموصل ثنائي أكسيد القصدير كواهب والمعقد كمستقبل.

لنظام الواهب – المستقبل غير الكظيم، كتب برنامج حاسوبي، بلغة Visual basic لحساب طاقة إعادة الترتيب. كتب أيضا برنامج بلغة MATLAB لحساب قوة السوق. واستخدمت معاملات الارتباط مع المعلمات السابقة كمعطيات للبرنامج الحاسوبي بلغة MATLAB لحساب معدل الانتقال الالكتروني .

أستخدم النموذج الكمي لحساب معدل الانتقال الالكتروني بين أشباه الموصلات والصبغات المذابة في مذيبات مختلفة عند أطوال موجية مختلفة ومعاملات ارتباط مختلفة، وقيم هذه المعدلات تكون عالية للمذيب الذي يمتلك ثابت عزل عالي. معدل الانتقال الالكتروني هو دالة لطاقة إعادة الترتيب . نتائجنا أوضحت بأن معدل الانتقال الالكتروني يزداد بزيادة طاقة إعادة الترتيب.

معدل الانتقال الالكتروني يكون ذو قيمة عظمى باستخدام صبغة الثايوبايرونين(ذرتي نتروجين)، بينما يكون أقل عند استخدام صبغة المثلين الزرقاء (ثلاث ذرات نتروجين)، وصبغة السفرانين ت (أربع ذرات نتروجين). يزداد عدد الالكترونات في هذه الصبغات بزيادة عدد ذرات النتروجين ، لكن معدل الانتقال الالكتروني يتناقص . نعتقد أن سبب ذلك هو المنافسة لامتلاك الالكترونات من قبل ذرة النتروجين في جزيئه الصبغة.

معدل الانتقال الالكتروني الأقصى لشبه الموصل ثنائي أكسيد القصدير هو أصغر من ذلك بالنسبة لشبه الموصل ثنائي أكسيد التيتانيوم مع نفس الصبغات والمذيبات ، بسبب أن شبه الموصل ثنائي أكسيد التيتانيوم له حجم وحدة خلية أكبر مقارنة مع ذلك بالنسبة لشبه الموصل ثنائي أكسيد القصدير .

قيم معدل الانتقال الالكتروني المحسوبة بالبرنامج تقريبا" صفر عند استخدام ثنائي الأوكسجين مع صبغات مختلفة وكذلك أشباه موصلات مقارنة" مع بقية المذيبات ، وسبب ذلك هو أن حاجز الجهد لثنائي الأوكسجين ذو قيمة عالية بين المذيبات المستخدمة .

Abstract

In the present work a quantum mechanical model, depending on the Fermi's golden rule has been derived according to the perturbation theory. The model has been utilized to calculate the electron transfer rate constant through a donor-acceptor system, which consists of a semiconductors with dyes dissolved in a variety solvents.

TiO2 and SnO2 semiconductors are used as the donor state, and thiopyronine, methylene blue, and safranine T dyes which are dissolved in different solvents

like, acetonitrile, ethanol, acetone, 1-propanol, 1-butanol, 1,2-dichloroethane, dichloromethane, chloroform, and dioxane to form a complex, are used as an acceptor state. The reorganization energies between TiO2 and SnO2 semiconductors , donor state, and the complex, acceptor state, are calculated.

For non-adiabatic system of donor-acceptor, a program in visual basic has been written to compute the reorganization energy, a program in MATLAB also has been written to compute the driving force. Coupling matrix element and the prior parameters, have been used in the program to compute the electron transfer rate constant.

The quantum mechanical model has been used to calculate the electron transfer rate constant for TiO2 and SnO2 semiconductors at different wavelengths and different coupling matrix element. These values are high for solvent possesses high dielectric constant.

The electron transfer rate constant is a function of the reorganization energy. Our results show that the ET rate increases with increasing the reorganization energy.

The rate constant is the maximum when using thiopyronine dye(2-N atoms), while it is lower for methylene blue (3-N atoms) and safranine T (4-N atoms) dyes. In these dyes the number of electrons increases as the number of N-atoms increases, but the ET rate is decreased. We think that is because of the competition for possessing the electrons by each nitrogen atom in the dye molecule.

The maximum ET rate for SnO2 semiconductor is smaller than that of TiO2 semiconductor with the same dyes and the same solvents, since TiO2 semiconductor has a large volume of unit cell compared with that of SnO2.

The value of the electron transfer rate obtained by using dioxane with different dyes and semiconductors is approximately zero compared with the other solvents, this is due to its high height barrier.