جامعة محمد خيضر –بسكرة-
كليـــة العلـــوم الدقيقـة
قسم علوم المادة

السنة الجامعية :2024-2025
السنة الثالثة فيزياء المواد
مقياس تحليل وتوصيف المواد

العمل التطبيقي رقم 3: مطيافية الاشعة الفوق البنفسجية والمرئية

الهدف من العمل التطبيقي:

يهدف هذا العمل المخبري إلى:

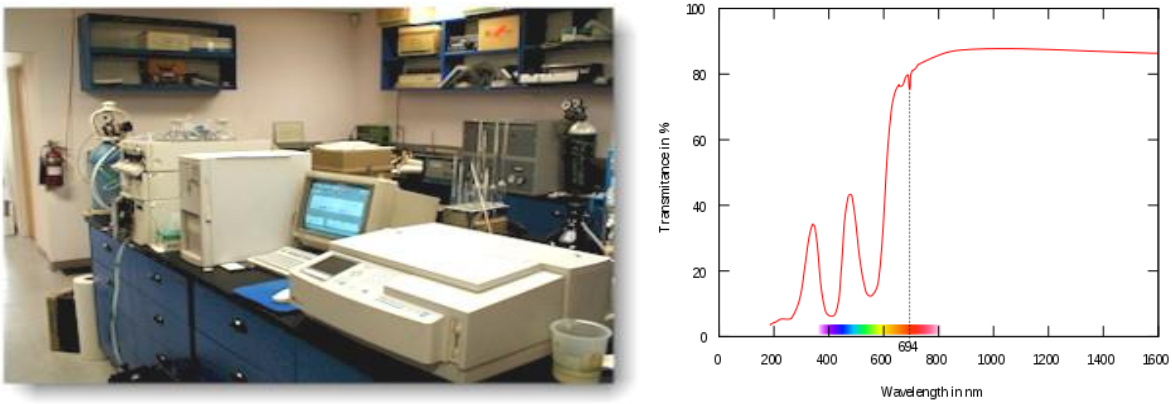
- فهم مبدأ عمل جهاز قياس الطيف الضوئي.
- تحليل طيف الأشعة فوق البنفسجية والمرئية.

الأجهزة المستعملة:

- مطيافية الاشعة الفوق البنفسجية والمرئية.
- برنامج Origin 18.

I- الجزء النظري :

تتيح الطرق البصرية إمكانية توصيف عدد كبير من المعلمات. تعتمد عملية الامتصاص البصري على تفاعل الإشعاع الكهرومغناطيسي مع المادة في نطاق الطيف المرئي فوق البنفسجي والأشعة تحت الحمراء القريبة (الشكل 1). تعتمد امتصاصية الجزيئات على التحولات الإلكترونية. يتوافق هذا الانتقال مع انتقال الإلكترونات من مستوى إلكتروني إلى مستوى إلكتروني آخر ذو طاقة أعلى تحت تأثير الإشعاع (الشكل 2). ومع ذلك، يتم استغلال امتصاص المادة في نطاق الأشعة فوق البنفسجية والمرئية بشكل مكثف في التحليل الكمي، من خلال تطبيق قانون بير لامبرت.



الشكل 1: مطيافية الاشعة الفوق البنفسجية والمرئية

تعتمد تقنية مطيافية الامتصاص على نظرية كمية طاقة الذرات. في الواقع، فإن الذرة التي تنتقل من حالتها الأساسية (الطاقة) إلى أي حالة مثارة تمتص فوتونًا واحدًا أو أكثر. يعتمد تردد الفوتون ν على الطاقة ΔE التي اكتسبتها الذرة بالعلاقة:

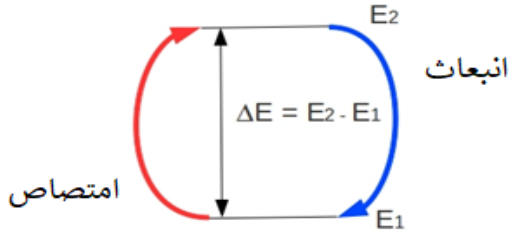
$$\Delta E = h\nu = h\frac{c}{\lambda}$$

E الطاقة

h = ثابت بلانك ($6.6 .10^{-34}$ j)

C = سرعة الضوء ($2.98 .10^{10}$ cm)

λ = الطول الموجي (nm)



الشكل 2: العلاقة بين امتصاص أو انبعاث الإشعاع الإلكتروني ومستويات الطاقة الذرية

II- مبدأ عمل الجهاز

مبدأ عمل المطيافية. أولاً، يمر الضوء متعدد الألوان من مصدر الضوء(UV-Vis-NIR) عبر موحد الطول الموجي. يتم بعد ذلك تقسيم شعاع ذو الطول الموجي الموحد إلى جزءين. يتوافق الأول I_0 مع خط المرجع وينتهي بكاشف يسمح بتصحيح إشارة القياس تلقائيًا عن طريق التقلبات في شدة مصدر الضوء .يعبر الجزء الثاني العينة المراد تمييزها وينتهي بكاشف I؛ لذلك فهو يقيس شدة الضوء (I الذي يمر عبر عينة ويقارنها بشدة الضوء قبل هذا المرور I_0.

تسمى النسبة I/I_0 بالنفاذية، وعادة ما يتم التعبير عنها كنسبة مئوية (T%). من خلال طيف الإرسال T، يمكن حساب الكثافة البصرية بالمعادلة التالية:

$$\mathbf{DO= A = - \log \frac{I}{I_0}}$$

حيث A هي الامتصاصية

1- طيف الامتصاص

من أطياف الانتقالات، يمكننا استنتاج معامِلين مهمين هما فجوة النطاق الضوئي Eg و طاقة اورباخ Euالتي تعطي تقييمًا لعرض ذيول النطاق للحالات الموضعية في الفجوة. وفقًا لعلاقة Tauc، من الممكن تمييز 3 مناطق في حد الامتصاص لأشباه الموصلات غير المتبلورة:

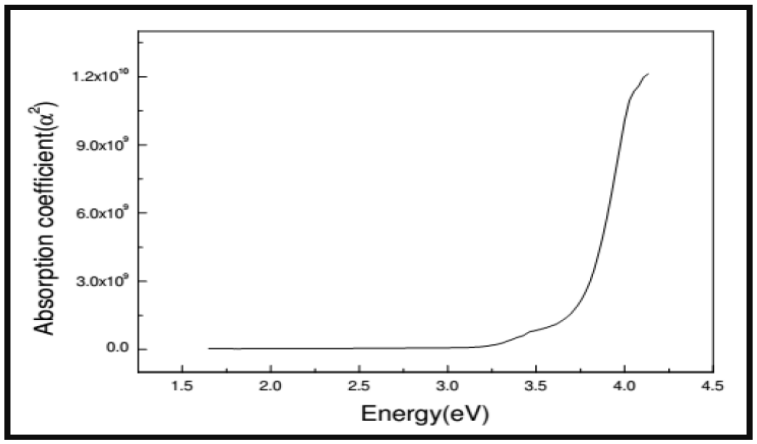
- منطقة الامتصاص المنخفضة، الناجمة عن العيوب والشوائب.
- المنطقة الأسيّة ($1\ cm^{-1} < \alpha < 10^4 cm^{-1}$) حيث يعتمد قانون التغيرات بقوة على درجة الاضطراب في بنية المادة.
- منطقة الامتصاص القوي ($\alpha > 10^4 cm^{-1}$) التي تحدد الفجوة البصرية.

لتحديد معامل الامتصاص α، استخدمنا علاقة Lambert-Beer. إذا عبرنا عن النفاذية، T، بوحدة (%):

$$\boldsymbol{T = exp(-\alpha d)}$$

$$\boldsymbol{\alpha = \frac{1}{d} \ln \frac{1}{T}}$$

تم إنشاء هذه العلاقة التقريبية، مع إهمال الانعكاس في جميع الواجهات؛ الهواء/العينة. وبمعرفة سمك العينة، d، فمن الممكن تحديد معامل الامتصاص لكل قيمة من قيم النفاذية والتي تتوافق مع الطاقة. من خلال مسح مجال الطاقة بالكامل، في (الشكل 3)، قمنا برسم التباين النموذجي لمعامل الامتصاص كدالة لطاقة الفوتونات الواردة (hν).



الشكل 3: تغير معامل الامتصاص بدلالة طاقة الفوتونات.

2- تحديد عرض النطاق الممنوع وطاقة اورباخ

أ- تحديد عرض النطاق الممنوع

في منطقة الامتصاص القوية ($\boldsymbol{\alpha > 10^4}\ cm^{-1}$)، يتم التعبير عن α كدالة للفجوة Eg وفقًا للمعادلة التالية:

$$\boldsymbol{(\alpha h\nu)^n = A(h\nu - E_g)}$$

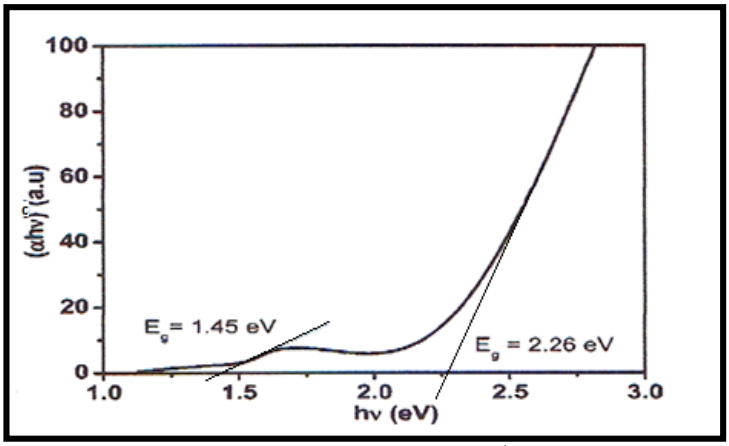
بالنسبة لـ n = 1/2 سيكون الانتقال غير مباشر.

بالنسبة لـ n = 2 سيكون الانتقال مباشرًا.

أين: A:ثابت Eg:طاقة الفجوة الضوئية بوحدة إلكترون فولت؛ hν: طاقة الفوتون. ثم نرسم $(\boldsymbol{\alpha h\nu})^{\boldsymbol{n}}$ كدالة لطاقة الفوتون E:

$$\boldsymbol{E = h\nu = \frac{hc}{\lambda}} = \frac{1241{,}25}{\lambda(nm)}$$

وبتمديد الجزء الخطي من $(\boldsymbol{\alpha h\nu})^{\boldsymbol{n}}$ إلى المحور السيني نحصل على قيمة Eg كما هو موضح بالشكل 4. يتم الحصول على الفجوة البصرية للعينة عن طريق رسم $(\alpha h\nu)^{n=1/2}$: (الانتقال غير المباشر) كدالة لـ hν كما هو موضح في الشكل 4. ومن خلال استقراء الجزء الخطي من المنحنيات نحصل على قيمة الفجوة البصرية.



الشكل 4: كيفية تحديد طاقة النطاق الممنوع Eg.

ب- تحديد طاقة اورباخ

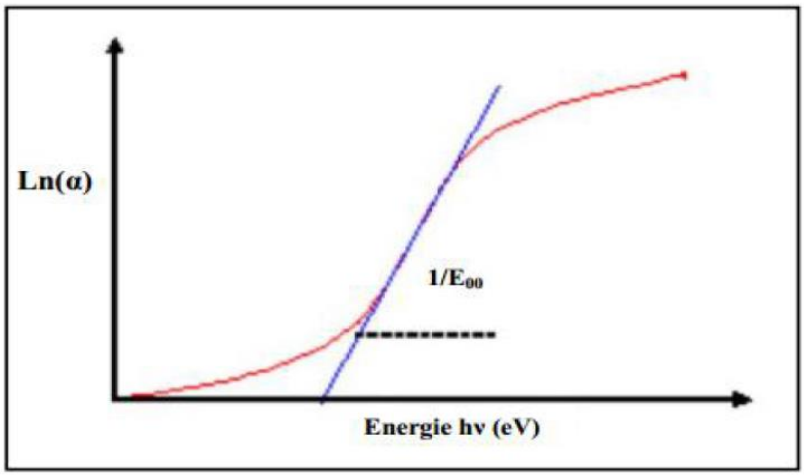
المعلمة التي تميز اضطراب المادة هي طاقة ذيل أورباخ Eu. وفقًا لـ d'Urbach، فإن تعبير معامل الامتصاص يكون على الشكل5 :

$$\boldsymbol{\alpha = \alpha_0 exp\ \frac{h\nu}{E_u}}$$

α: ثابت.

من خلال منحنى (ln α) كدالة لـ (hν)، يمكننا تحديد قيمة Eu:

$$\boldsymbol{ln\,\alpha = ln(\alpha_0) + (\frac{h\nu}{E_u})}$$



الشكل 5: كيفية تحديد طاقة اورباخ.

3- تحديد قرينة الانكسار

يمكن أيضًا تقييم معامل(قرينة) الانكسار n باستخدام نموذج هيرفي-فاندام Hervé Vandamme كما يلي:

$$n^2 = 1 + \left(\frac{A}{E_g + B}\right)^2$$

مع A و B ثابتين؛ A=13.6 eV ، B=3.4 eV وEg القيمة التجريبية لنطاق الطاقة.

III- العمل المطلوب:

بالاعتماد على منحنيات النفاذية:

1- أوجد طول الموجة وطاقة الفوتون الموافقين لأعلى وادنى نفاذية؟

2- ارسم المنحنى الذي يمثل تغير معامل الامتصاص كدالة لطاقة الفوتونات؟

3- ارسم المنحنى الممثل بـ $(\alpha h\nu)^{1/2} = f(h\nu)$ والذي يعطي إمكانية معرفة قيمة الفجوة الضوئية بطريقة Tauc؟

4- ارسم المنحنى الذي يمثل $\ln(\alpha) = f(h\nu)$ لحساب طاقات أورباخ؟

5- حدد معامل الانكسار n؟

6- ضع النتائج المتحصل عليها في جدول؟

7-الخاتمة.