Ain Shams University
Faculty of Education
Physics Department

Investigation of some physical properties of organic dye [*p*-N,N dimethylaminobenzylidenemalononitrile (DBM)] thin films

A thesis submitted for the degree of
Doctor of Philosophy of teacher preparation in science
(Solid State Physics)

By
Sabah Yahya Ahmad Abdalrahman Huthaily
Assistance teacher in Physics Department
Faculty of Education, Hodeidah University, Republic of Yemen

Supervised by
Prof. Dr. Mohammed A. Kamel
Professor of Theoretical Physics
Physics Dept., Faculty of Education, Ain Shams University

Prof. Dr. Mahmoud M. El-Nahass
Professor of Solid State Physics
Physics Dept., Faculty of Education, Ain Shams University

Dr. Amaal F. El-Deeb
Asst. Prof. of Solid State Physics
Physics Dept., Faculty of Education
Ain Shams University

Dr. Ahmed A. Atta
Asst. Prof. of Solid State Physics
Physics Dept., Faculty of Education
Ain Shams University

٢٠١١

بسم الله الرحمن الرحيم

Doctoral Thesis

Student name: Sabah Yahya Ahmad Abdalrahmam Huthaily

Thesis title: Investigation of some physical properties of organic dye [*p*-N,N dimethylaminobenzylidenemalononitrile (DBM)] thin films

Degree: Doctor of Philosophy of teacher preparation in science (Solid State Physics)

Supervisory committee

Name	Signature
Prof. Dr. M.A. Kamel Professor of Theoretical Physics Physics Dept., Faculty of Education, Ain Shams University	
Prof. Dr. M.M. El-Nahass Professor of Solid State Physics Physics Dept., Faculty of Education, Ain Shams University	
Dr. A.F. El-Deeb Asst. Prof. of Solid State Physics Physics Dept., Faculty of Education, Ain Shams University	
Dr. A.A. Atta Asst. Prof. of Solid State Physics Physics Dept., Faculty of Education, Ain Shams University	

Approved

Date: / /2011 **Stamp:**

جامعة عين شمس
كلية التربية
قسم الفيزياء

دراسة بعض الخواص الفيزيائية لأغشية رقيقة من صبغة عضوية [بارا- ن،ن ثنائي ميثيل امينوبنزيلدين مالونونيتريل]

رسالة مقدمة لنيل درجة دكتوراه الفلسفة لإعداد المعلم في العلوم (فيزياء الجوامد)

إعداد
صباح يحيى أحمد عبدالرحمن هُذيلي
المدرس المساعد بقسم الفيزياء- كلية التربية
جامعة الحُديدة- الجمهورية اليمنية

تحت إشراف

الأستاذ الدكتور/ محمد أحمد كامل
أستاذ الفيزياء النظرية المتفرغ- كلية التربية - جامعة عين شمس

الأستاذ الدكتور/ محمود محمد النحاس
أستاذ فيزياء الجوامد المتفرغ- كلية التربية- جامعة عين شمس

أ.د.م/ آمال فوزي الديب
أستاذ فيزياء الجوامد المساعد- كلية التربية
جامعة عين شمس

أ.د.م/ أحمد عطا عطا
أستاذ فيزياء الجوامد المساعد- كلية التربية
جامعة عين شمس

٢٠١١

جامعة عين شمس

كلية التربية

قسم الفيزياء

صفحة العنوان

اســم الطالبة: صباح يحيى أحمد عبدالرحمن هُذيلي

الدرجة العلمية: دكتوراه الفلسفة لإعداد المعلم في العلوم (فيزياء الجوامد)

القسم التابع له: قسم الفيزياء

اســــم الكلية: كلية التربية

الجــامعـــة: جامعة عين شمس

سـنة التخرج: ١٩٩٧ م

جامعة عين شمس

كلية التربية

قسم الفيزياء

الموافقة

اســـــم الطالبة: صباح يحيى أحمد عبدالرحمن هُذيلي

عنوان الرسالة: دراسة بعض الخواص الفيزيائية لأغشية رقيقة من صبغة عضوية [بارا-ن،ن ثنائي ميثيل امينو بنزيلدين مالونيتريل]

اســـم الدرجة: دكتوراه الفلسفة لإعداد المعلم في العلوم (فيزياء الجوامد)

لجنة الإشراف:

أ.د/ محمد أحمد كامل

أستاذ الفيزياء النظرية المتفرغ- كلية التربية جامعة عين شمس.

أ.د/ محمود محمد النحاس

أستاذ فيزياء الجوامد المتفرغ- كلية التربية- جامعة عين شمس.

أ.د.م/ أمال فوزى الديب

أستاذ مساعد فيزياء الجومد- كلية التربية- جامعة عين شمس.

أ.د.م/ أحمد عطا عطا

أستاذ مساعد فيزياء الجومد- كلية التربية- جامعة عين شمس.

تاريخ المناقشة: / /2011م

الدراسات العليا

ختم الإجازة أجيزت الرسالة بتاريخ / / 2011م

موافقة مجلس الكلية موافقة مجلس الجامعة

Abstract

The present thesis is devoted to study the structural, optical, and electrical transport properties of the synthesized *p*-N,N-dimethylaminobenzylidenemalononitrile (DBM) organic dye in its bulk and thin film forms. DBM thin films were prepared by thermal evaporation technique. It is also devoted to investigate the J-V, C-V characteristics, as well as the photovoltaic properties of Al/DBM/ITO Schottky diode and Au/DBM/p-Si/Al heterojunction solar cell .

From this study, it was found that DBM compound is thermally stable up to 445 K and has triclinic crystal system. The structure of the as-deposited DBM thin film was found to be in the nano-crystalline (nano-rods) form, and the crystallite size of these nano-rods was increased by annealing this film at 423 K for one hour. However, theoretical and experimental studies of vibrational modes of DBM compound by Hartree-Fock (HF) and density functional theory (DFT) methods using two basis sets reveal that the higher level of calculations give a reasonable deviation from the experimental data.

The optical properties of DBM were studied by the spectrophotometric measurements of transmittance and reflectance at normal incidence to determine the absorption spectral and dispersion behavior, as well as, the high frequency dielectric constant, the lattice dielectric constant and the optical energy gap.

The electrical transport properties including the dark DC and AC electrical conductivity and space-charge-limited current have been investigated to determine some of the electrical characterization parameters of DBM in its bulk and thin films forms.

The dark I-V and C-V, as well as, the photovoltaic characteristics of the prepared Al/DBM/ITO Schottky diode and Au/DBM/p-Si/Al heterojunction solar cell were measured to determine the solar cell parameters, such as built-in voltage, V_{bi}, the diode quality factor, ξ, operating conduction mechanisms, short-circuit current density, J_{sc}, open-circuit voltage, V_{oc}, fill factor, FF, and power conversion efficiency, η.

Table of contents

Chapter 1

Introduction

1.1. Overview

The organic semiconducting materials are grouped as polymer, monomer, and organic compounds. Charge carrier transport properties in organic semiconducting compounds have received considerable attention within the last few decades. Organic semiconductors are used extensively in the fabrication of active and passive solid state devices [1,2].

Research on the properties of organic semiconductors has witnessed a revival in recent years due to emerging technological applications of these materials. They possess specific physical properties (significant electroluminescence, bandgap in infrared-visible (IR-Vis) domain), which are very attractive for the technology of electronic devices such as field-effect transistors (FETs) [3,4], organic light-emitting diodes (OLEDs) [5,6], photovoltaic devices [7-9], optoelectronic devices [10], as well as for other technological applications, such as optical pH, a measure of the acidity or