



دانشگاه شاهرود

دانشکده علوم

گروه آموزشی شیمی

پایان نامه برای دریافت درجه پایان نامه کارشناسی ارشد

رشته شیمی گرایش شیمی فیزیک

# بررسی برانگیختگی الکترونی یک رنگدانه آلی به منظور تعیین کارایی آن در سلول‌های خورشیدی بر پایه رنگدانه‌های آلی

پژوهشگر:

شقایق اصلانی

استاد راهنما:

دکتر امیرناصر شمخالی

استاد مشاور:

دکتر محمدرضا زمانلو

شهریور ۹۸

<p><b>بررسی برانگیختگی الکترونی یک رنگدانه آلی به منظور تعیین کارایی آن در سلول‌های خورشیدی بر پایه رنگدانه‌های آلی / شقایق اصلانی</b></p> <p>دکتر امیرناصر شمخالی</p> <p>دکتر محمدرضا زمانلو</p> <p>۳۰ شهریور ۱۳۹۸</p> <p>۱۰۰ ص</p> <p><b>نام گروه / شماره پایان‌نامه</b></p>	<p>عنوان و نام پدیدآور:</p> <p>استادان راهنما:</p> <p>استادان مشاور:</p> <p>تاریخ دفاع:</p> <p>تعداد صفحات:</p> <p>شماره پایان‌نامه:</p>
<p><b>چکیده:</b></p> <p><b>هدف:</b> خورشید بزرگترین و پاک‌ترین منبع انرژی است که برای تبدیل نور به الکتریسته استفاده می‌شود. سلول‌های خورشیدی، بر پایه رنگدانه آلی گونه‌ای از سلول‌های خورشیدی لایه نازک هستند. در این سلول‌ها فتو‌آند از یک نیمه رسانای حساس شده با رنگدانه ی آلی تشکیل شده است. و رنگدانه ی آلی نقش حساس کننده را دارد و با جذب نور، الکترون برانگیخته شده و به نوار هدایت <math>TiO_2</math> تزریق می‌شود. این انتقال الکترون باعث ایجاد میدان الکتریکی و جریان در سلول می‌شود. مولکول‌های رنگدانه ی اکسید شده با گرفتن الکترون از الکترولیت احیا می‌شوند. کاند نیز نقش کاتالیزوری داشته و الکترون‌های ورودی از مدار خارجی را به داخل الکترولیت انتقال می‌دهند.</p> <p><b>روش شناسایی پژوهش:</b> در این پژوهش، انتقالات الکترونی، رنگدانه‌های جدید سنتزی با استفاده از تکنیک اسپکتروسکوپی <math>UV\_VIS</math> بررسی گردید و نتایج بدست آمده با محاسبات تابع چگالی و تابع چگالی وابسته به زمان مورد مقایسه قرار داده شد.</p> <p><b>یافته‌ها:</b> نتایج محاسباتی نشان داد که طول پیوند <math>N=N</math> در مولکول‌ها وابسته به انجام رزونانس است. مولکول‌هایی که دارای پیکربندی مناسب برای انجام رزونانس هستند، هم صفحه هستند در این صورت رزونانس انجام می‌گیرد و طول پیوند <math>N=N</math> به دلیل رزونانس بلندتر می‌شود. رزونانس در فاز محلول قوی تر از فاز گازی است. ولی در مولکول‌های بزرگتر و دارای زنجیره‌های طویل، فشار اوربیتالی باعث خروج مولکول از حالت هم صفحه شده و امکان انجام رزونانس وجود ندارد و طول پیوند آزو کوتاهتر و زاویه کمتر می‌شود. و نتایج محاسبات تابع چگالی وابسته به زمان نشان داد با افزایش تعداد گروه‌های <math>Azo</math> که برانگیختگی الکترونی این مولکول‌ها در محلول در حوالی <math>\lambda_{max}</math> بصورت موضعی بوده و شامل انتقال بار رزونانس نمی‌شود.</p>	

**نتیجه گیری:** انتقالات الکترونی در رنگینه های شامل گروه های AZO بشدت به پیکربندی مولکول و استخلاف ها ی متصل به گروه AZO وابسته است. بطوریکه برای تعیین اینکه کدام رنگینه کارایی بالاتری در سلول خورشیدی از خود نشان می دهد، باید استخلافها و پیکربندی ها حتما با روشهای محاسباتی بررسی گردد.

#### **واژه های کلیدی:**

سلول های خورشیدی، برانگیختگی الکترونی، تئوری تابع چگالی، رنگدانه

## ۱- مقدمه و هدف

---

### ۱-۱ مقدمه

استفاده از انرژی خورشیدی و شناخت آن برای کاربرد منظوره‌های مختلف به زمان ماقبل تاریخ باز می‌گردد. مهم‌ترین داستان و مطلبی که درباره استفاده از خورشید اشاره شده داستان ارشمیدس دانشمند و مخترع بزرگ یونان قدیم می‌باشد که ناوگان روم را با استفاده از انرژی حرارتی خورشید به آتش کشید، گفته می‌شود که ارشمیدس با نصب تعداد زیادی آئینه‌های کوچک مربعی شکل در کنار یکدیگر که روی یک پایه متحرک قرار داشته است، اشعه خورشید را از راه دور روی کشتی‌های رومیان متمرکز ساخته و به این ترتیب آنها را به آتش کشیده است [۱]

امروزه بشر توانسته است انرژی مورد نیاز خود را از طریق منابع گوناگون تأمین نماید که بخش عمده ای از این انرژی را سوخته‌های فسیلی مانند نفت، زغال سنگ، گاز طبیعی و انرژی هسته‌های برگرفته از ایزوتوپ اورانیوم تشکیل می‌دهند [۲] در چند دهه‌ی اخیر، ساخت و تولید دستگاه‌ها و کوره‌ها و همچنین سلول‌های خورشیدی حاکی از آن دارد که این منبع انرژی یعنی خورشید اهمیت زیادی برای بشر پیدا کرده است. خورشید یکی از منابع تأمین انرژی رایگان، پاک و عاری از اثرات مخرب زیست محیطی است که از دیرباز به روش‌های گوناگون

مورد استفاده‌ی بشر قرار گرفته است. دلایل و عوامل گوناگونی وجود دارند که نشان می‌دهند که انرژی خورشیدی چقدر به طور روز افزون فراگیرتر و گسترش یافته است [۴ و ۲]. از جمله دلایل اهمیت این موضوع می‌توان به موارد زیر اشاره کرد:

- محدود بودن منابع تولید انرژی رایج کنونی

- افزایش بهره‌وری تجهیزاتی که با انرژی خورشیدی کار می‌کنند

- رشد روزافزون مصرف انرژی

- ارزان شدن قیمت تجهیزات با انرژی خورشیدی

- ساده بودن نصب، راه‌اندازی و بکارگیری تجهیزات

سلول‌های خورشیدی دستگاه‌هایی هستند که توسط اثر فتوولتایی انرژی خورشید را به طور مستقیم و بدون اتصال به منبع ولتاژ خارجی به الکتریسیته تبدیل می‌کنند [۵ و ۲].

ذرات نور که فوتون نام دارد، در فرایند فتوولتائیک به داخل سلول‌های خورشیدی نفوذ کرده و با آزاد کردن الکترون از اتم‌های سیلیکن جریان الکتریکی تولید می‌کنند. جریان الکتریسیته تا زمانی که تابش نور به داخل سلول در جریان باشد، تولید می‌شود. الکترون‌هایی که در این سلول‌ها در جریان هستند مانند باتری‌ها تمام نمی‌شوند، چرا که آنها مبدل‌هایی هستند که یک نوع انرژی (خورشیدی) را به نوعی دیگر (جریان الکترون‌ها) تبدیل می‌کنند [۳].

مواد از نظر خواص هدایت الکتریکی، به سه دسته رسانا، نیمه‌رسانا و نارسانا تقسیم‌بندی می‌شوند. در سلول‌های خورشیدی، ما نیاز به استفاده از مواد نیمه‌رسانا داریم. مواد نیمه‌رسانا موادی هستند که گاف انرژی آن‌ها کمتر از گاف انرژی مواد نارسانا است. بنابراین اگر بتوان

انرژی مورد نیاز را برای الکترون‌ها تأمین کرد، الکترون‌ها می‌توانند از سد انرژی ناشی از گاف عبور کرده و به تراز هدایت بروند. در مواد رسانا، عملاً این گاف انرژی وجود ندارد و الکترون‌ها به راحتی می‌توانند؛ وارد تراز بالای شده و در رسانش ماده همکاری کنند. مواد تشکیل دهنده ی سلول‌های خورشیدی از نوع نیمه رسانا هستند. مهم ترین ویژگی مواد نیمه رساناها که موجب شده در ساخت سلول‌های خورشیدی مورد استفاده قرار گیرند این است که این مواد شکاف انرژی (تفاوت انرژی نوار هدایت و ظرفیت) مناسبی ایجاد می‌کنند و همچنین مقاومت ویژه‌ای از خود نشان می‌دهند، لذا از سایر مواد متمایز شده‌اند. شکاف انرژی نیم رساناها در محدوده‌ی صفر تا ۴ الکترون ولت و مقاومت ویژه‌ی آنها در محدوده‌ی ۰.۱ تا  $10^9$  اهم سانتیمتر می‌باشد [۴۳]

متصل کردن نیمه رساناهای نوع n و نوع p باعث تغییر در خواص الکتریکی نیمه رساناها می‌گردد. یک نیمه رسانای نوع n (n-type) دارای اکثریت الکترون‌های آزاد بوده، در حالی که اکثریت حامل‌های بار آزاد در نیمه رسانای نوع p، (p-type) حفره‌های با بار مثبت می‌باشند (آنچه در غیاب الکترون ایجاد می‌گردد حفره نامیده می‌شود) الکترون‌ها در نوار هدایت و حفره‌ها در نوار ظرفیت، به علت داشتن توانایی حمل جریان الکتریکی، حامل‌های آزاد<sup>۱</sup> نامیده می‌شوند [۳]

## ۲-۱- کاربردهای سلول‌های خورشیدی

خواص الکترونی ماده نیمه رسانا در یک سلول خورشیدی مهمترین فاکتور برای تعیین توانایی تبدیل نور خورشید به الکتریسیته فعالیت (فتوولتایی) می‌باشد. اثر فتوولتایی توصیف کننده‌ی

برهم کنش نور با ماده برای تولید الکتروسیسته می باشد. نور با انرژی فوتونی بزرگتر از شکاف انرژی توسط ماده نیمه رسانا جذب می گردد. در ماده نیمه رسانا، الکترون و حفره به وسیله برانگیختگی نوری توسط نور ایجاد می گردند [۴] از کاربردهای سلول های خورشیدی می توان به بخش های زیر اشاره کرد:

۱- تأمین نیروی حرکت ماهواره ها و سفینه های فضایی

۲- تأمین انرژی لازم برای دستگاه هایی که نیاز به ولتاژهای کم دارند

۳- تهیه ی برق شهر توسط نیروگاه های فوتولتائی

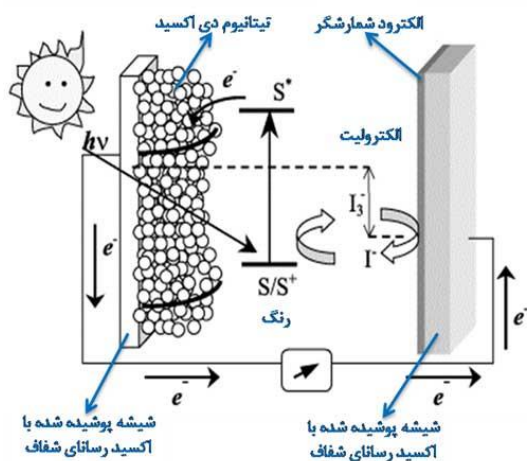
۴- تأمین نیروی لازم برای حرکت خودروها و قایق های کوچ

امروزه، بیشترین سلول های خورشیدی تجاری از سیلیکون بیش از ۸۶% ساخته شده اند، علی رغم بازده خوب این سلول ها، استفاده از سیلیکون در دستگاه فوتولتائی ممکن است به دلیل قیمت بالای تولید محدود شود [۴]

به طور کلی با نگاه اجمالی در ساختار سلول های خورشیدی حساس شده با رنگ، باید این سلول ها را مشابه با یک باتری قلیایی تجاری دانست که در آن یک آند و یک کاتد در دو طرف الکترولیت مایع قرار می گیرند. به این ترتیب که نور خورشید از طریق الکترو شفاف وارد لایه رنگ شده و الکترون های آن را برانگیخته می کند. سپس این الکترون ها به نانوذرات تیتانیوم دی اکسید نیمه رسانا با نوار ممنوعه حدود ۳,۵ الکترون ولت، منتقل خواهد شد. با جذب الکترون ها در این نوار ممنوعه، میدان الکتریکی و سپس جریان ایجاد می شود. این جریان وارد مدار شده و به کاتد انتقال می یابد. کاتد هم چنین نقش یک کاتالیزور را دارد و الکترون ها را

وارد محلول الکترولیت (یدید/ تری یدید) می‌کند تا از طریق واکنش شیمیایی در الکترولیت، الکترون‌ها دوباره وارد مولکول رنگ شوند. در سلول خورشیدی حساس شده با رنگ دو فرآیندی که در سلول‌های قدیمی سیلیکونی توسط سیلیکون انجام می‌شد تفکیک شده‌اند. در سلول‌های قدیمی، سیلیکون هم به عنوان منبع فوتوالکترون به کار می‌رود و هم میدان الکتریکی لازم برای جداسازی بارها و ایجاد جریان را تولید می‌کند؛ در حالی که در سلول خورشیدی حساس شده با رنگ، نیمه‌رسانا تنها برای انتقال بار به کار می‌رود و فوتوالکترون‌ها توسط یک ماده رنگی حساس به نور فراهم می‌شوند.

اما در نگاه دقیق‌تر در یک سلول خورشیدی حساس شده با رنگ، جهت بررسی مرحله به مرحله، فوتون‌های نور خورشید طی مراحل زیر به جریان الکتریکی تبدیل می‌شوند:



- 1)  $S + h\nu \rightarrow S^*$
- 2)  $S^* \rightarrow S^+ + e^- (\text{TiO}_2)$
- 3)  $I_3^- + 2e^- \rightarrow 3I^-$
- 4)  $3I^- \rightarrow I_3^- + 2e^-$
- 5)  $S^+ + e^- \rightarrow S$

شکل ۱-۱- نحوه عملکرد دقیق یک سلول خورشیدی حساس به رنگ

۱- رنگ نشانده شده روی سطح تیتانیوم دی‌اکسید، شار فوتون گسیل شده را جذب می‌کند

(معادله ۱)



۲- به دلیل انتقال بار از فلز مرکزی به لیگاند، رنگ از حالت پایه (S) به حالت برانگیخته ( $S^*$ ) می‌رسد. الکترون‌های برانگیخته شده به نوار رسانایی الکتروود تیتانیوم دی‌اکسید تزریق شده و منجر به اکسایش رنگ می‌شوند (معادله ۲)

۳- الکترون‌های تزریق شده در نوار رسانایی تیتانیوم دی‌اکسید بین نانوذرات تیتانیوم دی‌اکسید انتشار یافته و میدان الکتریکی و سپس جریان را ایجاد می‌کنند. جریان به اکسید رسانای شفاف انتقال داده می‌شود تا از طریق سیم‌کشی خارجی به الکتروود شمارشگر و سپس محلول الکتروولیت برسد.

۴- یون تری یدید موجود در محلول الکتروولیت، الکترون‌ها را از الکتروود شمارشگر گرفته و به یون یدید کاهش پیدا می‌کند (معادله ۳)

۵- رنگ اکسید شده ( $S^+$ ) در تماس با محلول الکتروولیت، الکترون‌ها را از یون یدید پذیرش کرده و به حالت پایه (S) برمی‌گردد (معادله ۵). یون یدید نیز پس از انتقال الکترون به حالت اکسید شده خود یعنی یون تری یدید تبدیل می‌شود [۸]

### ۳-۱- انواع سلول‌های خورشیدی

#### ۳-۱-۱- سلول‌های خورشیدی مبتنی بر سیلیکون کریستالی

رایج‌ترین ماده توده برای سلول خورشیدی، سیلیکون کریستالی (c-Si) است. ماده توده سیلیکون با توجه به نوع کریستال و اندازه کریستال به چندین بخش تقسیم می‌شود [۵]

✓ سیلیکون تک کریستالی (c-Si)

✓ سیلیکون پلی کریستالی (poly-Si) یا چند کریستالی (mc-Si)

### ۲-۳-۱- سلول‌های خورشیدی مبتنی بر سیلیکون لایه نازک غیر کریستالی (آمورف)

هزینه پایین، یکی از مزایای سلول‌های خورشیدی بر پایه سیلیکون آمورف (a-Si) می‌باشد. دو جزء اصلی آلیاژ a-Si، سیلیکون و هیدروژن است. علاوه بر این، مشخصه یک آلیاژ a-Si داشتن ضریب جذب بالاست. تنها یک لایه نازک برای جذب نور نیاز است و این باعث کاهش هزینه مواد می‌شود [۶]

### ۳-۳-۱- سلول‌های خورشیدی لایه نازک GaAs

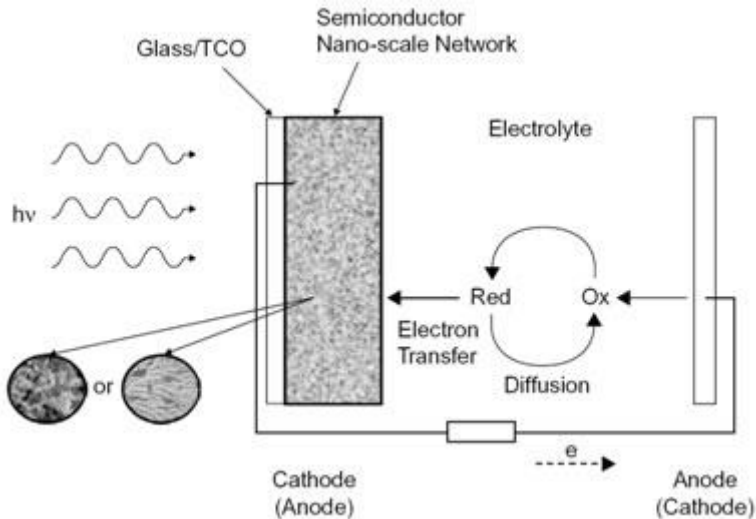
تطبیق گاف انرژی با طیف خورشیدی اولین لازمه موادی است که باید در یک قطعه مبدل انرژی فوتولتائیک خورشیدی به کار برود، و نیز داشتن قابلیت تحرک بالا و طول عمر حامل‌های زیاد می‌باشند. این شرایط توسط بسیاری از ترکیبات II-VI، III-V و Si برآورده می‌شوند. مواد گروه III - V علی‌رغم هزینه‌های بالای استحصال و ساخت این نیمه هادی‌ها، با موفقیت زیاد در کاربردهای فضایی که در آنها هزینه، فاکتور مهمی نیست مورد استفاده قرار گرفته‌اند. در سال ۱۹۶۱، شاکللی<sup>۲</sup> و کوایزر<sup>۳</sup> با در نظر گرفتن یک سلول خورشیدی پیوندی به شکل یک جسم سیاه با دمای ۳۰۰ کلوین نشان دادند که بیشترین بازدهی یک سلول خورشیدی صرف نظر از نوع تکنولوژی بکار رفته در آن، ۳۰٪ است که برای سلولی با گاف انرژی ماده برابر ۱،۳۹ الکترون ولت بدست می‌آید. با توجه به اینکه انرژی شکاف گالیم آرسناید برابر ۱،۴۲۴ الکترون ولت است می‌تواند ماده مناسبی برای طراحی سلول‌های خورشیدی باشد. سلول‌های خورشیدی ساخته شده بر پایه لایه نازک GaAs به عنوان نسل دوم سلول‌های خورشیدی نامگذاری می‌شوند [۷-۹]

#### ۴-۳-۱- سلول‌های خورشیدی مبتنی بر مواد آلی

سلول‌های خورشیدی تهیه شده از مواد آلی در مقایسه با مشابهان دیگر خود بازده بسیار پایین تری دارند. اما به خاطر هزینه ساخت پایین و همچنین قابلیت‌هایی مانند انعطاف پذیری برای مصارف غیرصنعتی مناسب هستند. انواعی از سلول‌های خورشیدی مبتنی بر مواد آلی شامل سلول‌های خورشیدی حساس به رنگ، سلول‌های خورشیدی پلیمری و سلول‌های خورشیدی مبتنی بر کریستال‌های مایع هستند [۱۱۰ و ۱۱۱].

#### ۴-۳-۱-۱- سلول‌های خورشیدی حساس به رنگ (DSSC)

ساختار پایه یک DSSC وارد کردن بهینه یک نیمه هادی نوع n شفاف (با شکاف انرژی پهن) در یک شبکه ای از ستون‌ها در ابعاد نانو در تماس با نانوذره‌ها یا برآمدگی‌های مرجانی شکل است.

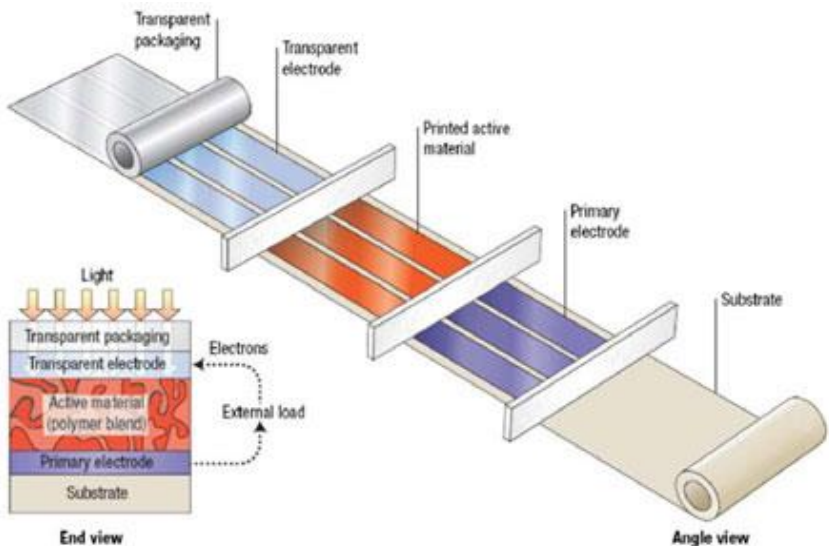


### شکل ۱-۲- شماتیک یک سلول خورشیدی حساس به رنگ

سطح شبکه بزرگ طراحی می‌شود و هر قسمت آن با یک تک لایه‌ای از یک رنگ یا پوششی از نقاط کوانتومی، که به عنوان رنگ عمل می‌کنند، پوشانده می‌شود. سپس یک الکترولیت برای نفوذ ساختار شبکه پوشش داده شده حاصل، مورد استفاده قرار می‌گیرد تا یک کانال یا مجرای بین رنگ و آند ایجاد کند. رنگ نور را جذب می‌کند و تولید اکسیژن می‌کند، که در سطح مشترک رنگ - نیمه هادی تفکیک می‌شود و منجر به ایجاد الکترون‌ها توسط فوتون برای نیمه هادی و مولکول‌های رنگ اکسید شده به وسیله الکترولیت (که باید کاهش یابند و دوباره تولید شوند) می‌شود [۱۲ و ۱۳]

### ۲-۴-۳-۱- سلول‌های خورشیدی پلیمری

سلول‌های خورشیدی پلیمری دارای ویژگی‌های خاصی هستند. چون مواد اکتیو استفاده شده برای ساخت قطعات قابل حل شدن در حلال‌های آلی بسیاری هستند، بنابراین سلول‌های خورشیدی پلیمری دارای پتانسیل لازم برای انعطاف پذیری و قابلیت ساخت در یک فرایند چاپ پیوسته همانند چاپ روزنامه را دارند. اخیراً بازده تبدیل توان حدود ۶٪ گزارش شده است ولی این مقدار با مقادیر لازم برای کاربردهای معمول فاصله دارد [۱۴]



شکل ۱-۳- قابلیت ساخت سلول های خورشیدی پلیمری به صورت یک فرایند ساخت پیوسته

### ۳-۴-۱- سلول های خورشیدی مبتنی بر نقاط کوانتومی

یک فاکتور محدود کننده برای بازده تبدیل انرژی در سلول های خورشیدی با یک شکاف انرژی این است که انرژی فوتون جذب شده بالای شکاف انرژی نیمه هادی در اثر اندرکنش الکترون - فونون به صورت گرما تلف می شود تا حامل ها به لبه شکاف باند انرژی رسیده و به اصطلاح به آرامش برسند در سال های اخیر روش هایی برای کاهش این تلفات با استفاده از ساختارهای کوانتومی از جمله چاه های کوانتومی و نقاط کوانتومی ارائه شده است. در این ساختارها هنگامی که حامل ها در نیمه هادی به وسیله سدهای پتانسیل به نواحی خاصی که کوچکتر یا قابل مقایسه با طول موج دوبروی آنها یا شعاع بوهر اکسیتون ها در نیمه هادی توده است محدود می شوند، دینامیک آرامش کاملا متفاوت خواهد بود [۱۶ و ۱۵]

#### ۴-۱- مکانیسم کارکرد سلول‌های خورشیدی

اساس کار سلول‌های خورشیدی فتوولتاییک بر مبنای جذب انرژی خورشید است. انرژی خورشیدی باعث ایجاد الکترون‌های با بار الکتریکی منفی و حفره با بار الکتریکی مثبت می‌شود. نیمه رساناهای معدنی دارای ثابت دی الکتریک بالایی هستند و ذرات الکترونی تولید شده در دمای اتاق ناپیوسته هستند و از طریق هدایت الکتریکی نیمه رساناها، به سرعت جابه جا می‌شوند که به آنها حامل‌های آزاد یا بارهای الکتریکی آزاد اطلاق می‌شود. نیمه رساناهای آلی دارای ثابت دی الکتریک پایینی هستند و حامل‌های بار پیوسته هستند و زوج الکترون-حفره را تشکیل می‌دهند که اکسایتون نامیده می‌شوند. در نیمه هادی‌های معدنی برای تفکیک الکترون‌های آزاد و حفره، میدان الکتریکی داخلی مورد نیاز است و سپس هر کدام از آنها در الکترودهای با بار الکتریکی مخالف جمع می‌شوند و در سلول‌های فتوولتاییک مورد استفاده قرار می‌گیرند. این میدان الکتریکی از اتصال p-n در تجهیزات به وجود می‌آید [۱۷] در نیمه هادی‌های آلی، اکسایتون‌ها باید طوری تفکیک شوند که اجزای جدا شده‌ی آن در الکترودهای با بار الکتریکی مخالف جمع شوند فناوری فتوولتاییک باید پایدار، کارا و کم هزینه باشد. فتوولتاییک سیلیکون بلوری خیلی پایدار و طول عمر موثر تخمینی بالغ بر ۲۵ سال و کارایی تبدیل انرژی %۲۰ را دارد. با این حال فتوولتاییک پلیمری در این زمینه ارزش و قابلیت خود را در مقایسه با سلول‌های سیلیکونی به خوبی نشان داده و در جایی که فناوری فتوولتاییک معدنی عملکرد موفقی به همراه نداشته است (هزینه، سازگاری با محیط زیست و تهیه‌ی سخت) به عنوان فن‌آوری مکمل مناسب برای سلول‌های خورشیدی سیلیکونی مورد استفاده قرار گرفته است. این در حالی است که سلول‌های فتوولتاییک آلی پایداری و بازده کمی را از خود نشان می‌دهند [۱۸ و ۱۹]

به منظور تولید جریان الکتریکی، به الکترون‌ها نیاز داریم. در واقع، باید بتوانیم تعدادی الکترون را تولید کرده و آن‌ها را در یک سیم یا مدار به حرکت درآوریم. پس دو شرط لازم برای تولید جریان الکتریکی عبارتند از: اول تولید الکترون و دوم به حرکت در آوردن الکترون تولید شده. مواد رسانا به خودی خود تعداد بسیار زیادی الکترون آزاد دارند و شرط اول را به خوبی مهیا می‌کنند. برای تولید الکترون در مواد نیمه‌رسانا و نارسانا، لازم است شرایطی فراهم شود که الکترون‌های تراز ظرفیت بتوانند برسد پتانسیل ناشی از گاف انرژی غلبه کرده و خود را به تراز هدایت ماده برسانند. در این صورت، این الکترون‌ها می‌توانند در هدایت الکتریکی ماده نقش ایفا کنند. برای غلبه بر این سد انرژی، باید به ماده انرژی بدهیم. این انرژی می‌تواند به شکل گرما یا امواج الکترومغناطیسی باشد. همچنین امواج الکترومغناطیسی نیز دارای انرژی هستند [۲۰-۲۲]

در سلول‌های خورشیدی، برای تولید الکترون و در نتیجه ایجاد جریان، از مواد نیمه‌رسانا استفاده می‌شود. در واقع، قلب یک سلول خورشیدی، یک ماده نیمه‌رسانا است که می‌تواند با دریافت نور خورشید، الکترون تولید کند. در فیزیک کوانتوم گفته می‌شود که نور خورشید شامل بسته‌های انرژی است. در واقع فرض می‌شود که انرژی، به صورت بسته‌های مجزا و جداگانه منتقل می‌شود. این بسته‌های جداگانه، فوتون نامیده می‌شوند. می‌توان این گونه فرض کرد که یک باریکه نور خورشید، شامل تعداد بسیار زیادی تک موج است که هر کدام از آن‌ها را می‌توان معادل یک بسته انرژی یا فوتون فرض کرد. انرژی هر فوتون، بر اساس همان رابطه انرژی موج که قبلاً به آن اشاره شد، مشخص می‌شود. زیرا هر فوتون مانند یک موج، دارای طول موج معین است. پس از برخورد فوتون با ماده نیمه‌رسانا، انرژی فوتون به الکترون داده می‌شود. اگر انرژی فوتون برابر یا بیشتر از انرژی سد پتانسیل یا همان گاف انرژی باشد،

الکترون می‌تواند بر سد انرژی گاف غلبه کرده و خود را به تراز هدایت ماده برساند [۲۳] به محض این که الکترون از تراز ظرفیت ماده جدا شده و به سمت تراز هدایت می‌رود، به جای آن یک حفره ایجاد می‌شود. مادامی که نور خورشید در حال برخورد به ماده نیمه‌رسانا است، الکترون تولید شده و به تراز هدایت ماده می‌رود. مشابه این پدیده را در زندگی روزمره خود بسیار دیده‌ایم. برای مثال، توپی را در نظر بگیرید که در حالت طبیعی خود تمایلی به بالا رفتن ندارد. پرتاب کردن این توپ به ارتفاع بالاتر از دیدگاه «انرژی» معادل این است که بخواهید آن را از سطح انرژی پتانسیل گرانشی پایین‌تر (ارتفاع کمتر) به سطح انرژی پتانسیل گرانشی بالاتر (ارتفاع بالاتر) منتقل کنید. بنابراین اگر بخواهید به نحوی توپ را به بالا پرتاب کنید، باید مقدار مناسبی انرژی به توپ بدهید تا بتواند برسد پتانسیل گرانشی زمین غلبه کرده و به بالا برود؛ مثلاً توپ را شوت کنید! پس از این که توپ بالا رفت و به ارتفاع مورد نظر رسید، چون این سطح انرژی برای توپ غیرتعادلی است، توپ برای رسیدن به تعادل، دوباره به پایین برمی‌گردد. در واقع توپ تمایل دارد با کاهش انرژی پتانسیل خود، به شرایط تعادلی اولیه‌اش برگردد. بنابراین به پایین سقوط می‌کند [۲۴ و ۲۵]

#### ۵-۱- مزایای سلول‌های خورشیدی

با تهدید فزاینده‌ی تغییرات آب و هوایی بر اثر نشر بیش از اندازه‌ی کربن، بسیاری از کشورها به دنبال جایگزین‌های انرژی تمیز برای سوخت‌های فسیلی سنتی خود هستند. از میان تمام جایگزین‌های انرژی، انرژی خورشیدی بیشترین هزینه را داشته است. با این حال، با در نظر گرفتن مزایا و معایب و کاهش ۸۰ درصدی قیمت پنل‌های خورشیدی در پنج سال گذشته، انرژی خورشیدی آینده‌ی درخشانی خواهد داشت. انرژی خورشیدی جایگزین پایداری برای سوخت‌های فسیلی به شمار می‌رود. با اینکه سوخت‌های فسیلی تاریخ انقضا دارند؛ اما انرژی



خورشید حداقل چند میلیارد سال در دسترس خواهد بود. علاوه بر این، هر روز ۷۳ هزار تراوات انرژی خورشید به سطح زمین می‌رسد که ۱۰۰۰۰۰ برابر بیشتر از مصرف روزانه‌ی انرژی در کل جهان است. برای استفاده از این منبع انرژی عظیم تنها لازم است فناوری موردنیاز آن پیاده‌سازی شود. تأثیر انرژی خورشیدی بر محیط در مقایسه با سوخت‌های فسیلی، بسیار کمتر است. این انرژی گاز گلخانه‌ای منتشر نمی‌کند زیرا فناوری مربوط به آن نیاز به احتراق سوخت ندارد. اگرچه نیروگاه‌های گرمایی خورشیدی (CSP) به دلیل مصرف آب و بر اساس نوع فناوری به کاررفته، نسبتاً غیربهبینه هستند، استفاده از فناوری مناسب می‌تواند بازدهی را افزایش دهد برای مثال سلول‌های خورشیدی فتوولتائیک (PV) برای تولید برق نیازی به آب ندارند [۲۶ و ۲۷]

از آنجا که نور خورشید در اغلب کشورهای دنیا فراوان است، بنابراین می‌تواند هر کشوری را به یک تولیدکننده‌ی انرژی بالقوه تبدیل کند و وابستگی کشورها به انرژی را کاهش دهد و از طرفی امنیت آن‌ها را افزایش دهد. انرژی خورشیدی تنها در سطح ملی امنیت و استقلال را افزایش نمی‌دهد؛ بلکه در مقیاس‌های کوچک‌تر برای مثال با نصب پنل‌های خورشیدی روی بام خانه‌ها هم می‌توان نیروی برق موردنیاز هر خانوار را تأمین کرد [۲۸]

## ۷-۱- ساختار سلول خورشیدی

کوچکترین بخش سازنده فتوولتائیک ها سل نامیده می‌شود. با قرار گرفتن این سل‌ها در کنار هم، ماژول ساخته می‌شود و پس از اتصال ماژول‌ها به همدیگر آرایه خورشیدی ساخته می‌شود. نحوه تبدیل نور خورشید به الکتریسیته در سلول‌های خورشیدی در شکل (۱-۳) نشان

Title and Author:	<b>Investigation on the electronic excitations of an organic dye in order to determination of its efficiency for dye-synthesized solar cells/shaghayegh Aslani</b>
Supervisor:	<b>Amir Naser Shamkhali (Ph.D)</b>
Graduation date:	<b>Mohammad Reza Zamanloo (Ph.D)</b>
Number of pages:	<b>100</b>

### **Abstract**

**Research Amin:** The solar energy is the largest and purest source of energy in the earth to convert light into electricity. Solar cells, based on organic pigments, are a type of thin-layer solar cells. In these cells, the organic dye acts as an anode and its electrons are excited by the absorption of light and transmitted to the TiO<sub>2</sub> conduction band, which lead to production of electric field and current. The cathode also plays a catalytic role and reinserts the electron into the electrolyte.

**Research Method:** In this study, we investigated the electronic excitation of three, new synthetic dyes using the UV<sub>vis</sub> spectroscopic technique and compared the results with density functional and time dependent density functional calculations.

**Finding :**The results indicated that N=N bond length is decreased with increase of the number of azo groups in the molecule due to smaller resonance ability in larger molecules. Also, this resonance is stronger in solution in comparison with the gas phase.

**Conclusion:**The results of TDDFT calculations demonstrated that electronic excitation of these molecules at  $\lambda_{max}$  is local excitations and charge transfer dose not occur. These findings indicates that electronic excitation for dyes containing azo groups is strongly depended on molecular conformations and the other substituents around the azo groups in such way that to determine what molecule can increase the efficiency of the solar cell, the effects of these conformations and substituents should be studied by computational method before the synthesis of these solar cells.

**Keywords :**Solar Cells, Electron Excitation, Density Function Theory



**University of Mohaghegh Ardabili**  
**Faculty of Science**  
**Department of Chemistry**

Thesis submitted in partial fulfillment for the degree of  
**M.Sc. in Condensed Matter Chemistry**

**Investigation on the Electronic Excitations of an  
Organic Dye in Order to Determination of Its  
Efficiency for Dye-Synthesized Solar Cells**

By:

**Shaghayegh Aslani**

Supervisor:

**Amir Naser Shamkhali (Ph.D)**

Advisor:

**Mohammad Reza Zamanloo (Ph.D)**

**September 2019**