

بِسْمِ اللَّهِ الرَّحْمَنِ الرَّحِيمِ



دانشکده: فیزیک

گروه: نانو فیزیک

پایان نامه کارشناسی ارشد

سنتز و مشخصه یابی نانو ساختارهای آلاییده و بدون آلیش TiO_2 برای کاربرد در سلول-

های خورشیدی

صادق بیات

استاد راهنما:

دکتر محمدباقر رحمانی

شهریور ۱۳۹۶

شماره:
تاریخ:

بسمه تعالی



مدیریت تحصیلات تکمیلی

فرم شماره (۳) صورتجلسه نهایی دفاع از پایان نامه دوره کارشناسی ارشد

با نام و پد خداوند متعال، ارزیابی جلسه دفاع از پایان نامه کارشناسی ارشد خانم آقای صادق بیات با شماره دانشجویی ۹۳۰۴۱۴۴ رشته فیزیک گرایش نانو فیزیک تحت عنوان سنتز و مشخصه یابی نانو ساختارهای بدون آلیش و الایسده و TiO_2 برای کاربرد در سلول های خورشیدی که در تاریخ ۹۶/۰۶/۱۵ با حضور هیئت محترم داوران در دانشگاه صنعتی شاهرود برگزار گردید به شرح ذیل اعلام می گردد:

قبول (با امتیاز ۹۰) درجه
مردود عملی نظری
نوع تحقیق: نظری عملی

امضاء	مرتبه علمی	نام و نام خانوادگی	عضو هیات داوران
	استادیار	محمد رفیر رحمانی	۱- استادار همتای اول
			۲- استادار همتای دوم
			۳- استادار مشاور
	استادیار	مصطقی عنایسانی	۴- نماینده تحصیلات تکمیلی
	استاد	حمید هراتی زاده	۵- استادار ممتحن اول
	استادیار	علی خرسند زاک	۶- استادار ممتحن دوم



نام و نام خانوادگی دانشجو: ...

تاریخ و امضاء و مهر: ...

نیز در صورتی که کسی مردود شود حداکثر یکبار دیگر پذیرفته شود و در صورتی که نتواند از پایان نامه خود دفاع نماید دفاع مجدد نباید زودتر از ۴ ماه برگزار شود.

تقدیم اثر

این پایان نامه را به پدر عزیز و مادر مهربانم که در تمام مراحل زندگی پشتیبان و یاور من بوده‌اند، تقدیم میکنم.

مشکر و قدردانی

حمد و سپاس خدای را که به من سعادت گذر از مرحله ای دیگر از دوران

آموختن و توفیق کسب دانش و معرفت عطا فرمود.

بر خود لازم می دانم از تلاش ها و زحمات جناب آقای دکتر رحمانی صمیمانه

مشکر نمایم.

؛ همچنین از زحمات بی منت جناب آقای عسکری، کارشناس محترم آزمایشگاه

تحقیقاتی فیزیک دانشگاه صنعتی شاهرود و هم کلاسی های عزیزم آقای زارع،

موحدی، طاطار، خانم قاسمی، قلعه قانی، ژیان، نقدی کمال مشکر را دارم.

تعهد نامه

اینجانب صادق بیات دانشجوی دوره کارشناسی ارشد رشته نانو فیزیک دانشکده فیزیک و مهندسی هسته‌ای دانشگاه صنعتی شاهرود نویسنده پایان نامه سنتز و مشخصه‌یابی نانو ساختارهای آلاییده و بدون آلیش TiO_2 برای کاربرد در سلول-های خورشیدی تحت راهنمایی آقای دکتر رحمانی متعهد می‌شوم .

- تحقیقات در این پایان نامه توسط اینجانب انجام شده است و از صحت و اصالت برخوردار است .
- در استفاده از نتایج پژوهشهای محققان دیگر به مرجع مورد استفاده استناد شده است .
- مطالب مندرج در پایان نامه تاکنون توسط خود یا فرد دیگری برای دریافت ه بیج نوع مدرک یا امتیازی در ه بیج جا ارائه نشده است .
- کلیه حقوق معنوی این اثر متعلق به دانشگاه صنعتی شاهرود می باشد و مقالات مستخرج با نام « دانشگاه صنعتی شاهرود » و یا « Shahrood University of Technology » به چاپ خواهد رسید .
- حقوق معنوی تمام افرادی که در به دست آمدن نتایج اصلی پایان نامه تأثیرگذار بوده اند در مقالات مستخرج از پایان نامه رعایت می گردد.
- در کلیه مراحل انجام این پایان نامه ، در مواردی که از موجود زنده (یا بافتهای آنها) استفاده شده است ضوابط و اصول اخلاقی رعایت شده است .
- در کلیه مراحل انجام این پایان نامه، در مواردی که به حوزه اطلاعات شخصی افراد دسترسی یافته یا استفاده شده است اصل رازداری ، ضوابط و اصول اخلاق انسانی رعایت شده است .

تاریخ

امضای دانشجو

مالکیت نتایج و حق نشر

- کلیه حقوق معنوی این اثر و محصولات آن (مقالات مستخرج ، کتاب ، برنامه های رایانه ای ، نرم افزار ها و تجه یزات ساخته شده است) متعلق به دانشگاه صنعتی شاهرود می باشد . این مطلب باید به نحو مقتضی در تولیدات علمی مربوطه ذکر شود .

تن این صفحه نیز باید در ابتدای نسخه های تکثیر شده پایان نامه وجود داشته باشد .

چکیده

در سال های اخیر سلول های خورشیدی رنگدانه ای (DSSC) به عنوان کاندیدای امیدوار کننده ای برای توسعه نسل بعدی سلول های خورشیدی مطرح شده اند زیرا این نوع سلول ها با روش های ساده و ارزان قیمتی ساخته می شوند. TiO_2 در شکل های لایه نازک یا پودر نانو ساختار از موفق ترین فوتوآندها در DSSC ها می باشد. در این پایان نامه تجربی با استفاده از روش های اسپری پایرولیزیز و هیدروترمال فوتو آند TiO_2 تهیه شد و ویژگی های ساختاری، اپتیکی و ریخت شناسی آن مورد مطالعه قرار گرفت. نمونه های سنتز شده با دستگاه های میکروسکوپ الکترونی روبشی گسیل میدانی (FESEM)، پراش پرتو ایکس (XRD)، طیف نگاری UV-Vis، شبیه ساز خورشیدی و دستگاه اندازه گیری PV-IV مشخصه یابی شدند. جهت استفاده از روش اسپری پایرولیزیز سه محلول با غلظت های مختلف ۴، ۸ و ۱۲ M آماده گردید. تصاویر FESEM لایه های نازک سنتز شده نشان دهنده سطح اسفنجی شکل آنها می باشد. ضخامت نمونه ها با استفاده از دستگاه FESEM مقادیر ۴/۴۳، ۴/۰۵ و ۱/۵۱ μm به ترتیب برای نمونه های با غلظت محلول اولیه ۴، ۸، ۱۲ M تخمین زده شد. تحلیل الگوی XRD نمونه ها نشان داد که نمونه ها در ساختار چهار گوشه و فاز آاناتاز رشد یافته اند. گاف نواری نمونه ها نیز با افزایش غلظت محلول اولیه از ۳/۴ به ۳/۵۸ eV افزایش داشته است. از نمونه ی ۴ مولار که تخلخل بهتری داشت به عنوان فوتوآند در ساخت قطعه سلول خورشیدی استفاده گردید. سلول ساخته شده دارای بازدهی ۴/۲۷ و ضریب پرشدگی ۰/۴۴ می باشد. همچنین با استفاده از روش هیدروترمال نانو پودر TiO_2 سنتز شد. تصاویر FESEM تشکیل ذراتی با میانگین اندازه ای در حدود ۱۵ nm نشان داد. الگوی XRD رشد در هر دو فاز آاناتاز و روتایل را نشان داد که البته فاز روتایل غالب است. گاف نواری این نمونه ۲/۲ eV محاسبه گردید. سپس از این فوتو آند برای ساخت قطعه سلول خورشیدی استفاده گردید و بازدهی ۰/۴۲۴ و ضریب پرشدگی ۰/۶۵ برای آن بدست آمد. نهایتاً به منظور بهبود عملکرد فوتو آند TiO_2 ، با روش هیدروترمال آلومینیوم نترات (۱ و ۱/۵٪ مولی) به عنوان ناخالصی به محلول اصلی اضافه گردید. با افزودن ناخالصی اندازه ی دانه ها تا میزان ۵ نانومتر کاهش یافت. همچنین با افزایش میزان ناخالصی گاف نواری نمونه ها از ۱/۵ به ۲/۵۲ eV افزایش یافت.

کلمات کلیدی: سلول خورشیدی حساس شده به رنگ، دی اکسید تیتانیوم، اسپری پایرولیزیز، هیدروترمال

مقالات مستخرج از پایان نامه

۱- "بررسی ویژگی های ساختاری و اپتیکی لایه های نازک TiO_2 تهیه شده در غلظت های مختلف محلول اولیه با روش اسپری پایرولیزیز" ، کنفرانس فیزیک ایران ۱۳۹۶، ۶ تا ۹ شهریور ماه ۱۳۹۶، دانشگاه یزد

۲- "ساخت سلول خورشیدی رنگدانه ای بر پایه ی دی اکسید تیتانیوم به روش اسپری پایرولیزیز" ، کنفرانس فیزیک ایران ۱۳۹۶، ۶ تا ۹ شهریور ماه ۱۳۹۶، دانشگاه یزد

فهرست مطالب

۱	فصل اول مقدمه
۲	۱-۱ مقدمه
۲	۲-۱ سلول‌های خورشیدی فوتوولتایی
۳	۳-۱ تقسیم بندی سلول‌های خورشیدی فوتو ولتایی
۳	۱-۱-۳-۱ سلول‌های خورشیدی سیلیکونی
۴	۱-۱-۳-۱ سلول‌های خورشیدی سیلیکونی تک بلور
۴	۲-۱-۳-۱ سلول‌های خورشیدی سیلیکونی بس بلور
۴	۲-۳-۱ نسل دوم-سلول‌های خورشیدی لایه نازک
۵	۳-۳-۱ نسل سوم-سلول‌های خورشیدی پلیمری
۵	۴-۳-۱ نسل چهارم-سلول‌های خورشیدی پروسکایتی
۶	۴-۱ سلول‌های خورشیدی حساس شده به رنگ
۶	۱-۴-۱ نحوه‌ی عملکرد یک سلول خورشیدی حساس شده به رنگ
۸	۲-۴-۱ بررسی اجزای یک سلول خورشیدی حساس شده به رنگ
۸	۱-۲-۴-۱ فوتو آند نیم‌رسانا
۸	۲-۲-۴-۱ زیرلایه رسانای شفاف
۹	۳-۲-۴-۱ رنگدانه
۱۰	۴-۲-۴-۱ الکترولیت
۱۲	۵-۱ جمع بندی
۱۳	فصل دوم مروری بر مقالات
۱۴	۱-۲ مقدمه

۱۴	۲-۲ ساختار بلور دی اکسید تیتانیوم
۱۷	۳-۲ مشخصه یابی ساختاری و نوری TiO_2 آلاینده با نیتروژن به روش اسپری پایرو لیزیز بر روی FTO
۲۳	۴-۲ سنتز فوتو آند ساختار یک بعدی TiO_2 به روش هیدروترمال
۲۷	۵-۲ سنتز میکرو کره‌های TiO_2 به روش هیدروترمال
۳۲	۶-۲ تأثیر آلاینش آلومینیوم بر بازده سلول‌های خورشیدی رنگدانه‌ای
۳۵	۷-۲ جمع بندی
۳۷	فصل سوم معرفی ابزارهای اندازه گیری و مشخصه یابی ساختاری و اپتیکی
۳۸	۱-۳ مقدمه
۳۸	۲-۳ میکروسکوپ الکترونی و روبشی گسیل میدانی (FESEM)
۳۹	۳-۳ پراش پرتو ایکس
۴۳	۴-۳ طیف جذب اپتیکی
۴۴	۵-۳ دستگاه هیدروترمال
۴۵	۶-۳ دستگاه اسپری پایرو لیزیز
۴۶	۷-۳ شبیه ساز نور خورشید
۴۷	۸-۳ جمع بندی
	فصل چهارم : نتایج تجربی سنتز و نانو ساختارها و نانو پودرهای دی اکسید تیتانیوم و ساخت سلول خورشیدی بحث
۴۹	۱-۴ مقدمه
۵۰	۲-۴ تهیه لایه رسانای شفاف FTO به روش افشانه پایرو لیزیز
۵۱	۱-۲-۴ مطالعه‌ی ویژگی ساختاری
۵۲	۲-۲-۴ مطالعه‌ی ویژگی نوری

- ۳-۴ تهیه لایه نازک دی اکسید تیتانیوم بر روی زیر لایه FTO به روش اسپری پایرولیزیز ۵۴
- ۱-۳-۴ آماده سازی FTO ۵۴
- ۲-۳-۴ لایه نشانی دی اکسید تیتانیوم ۵۵
- ۱-۲-۳-۴ مطالعه ویژگی‌های ساختاری ۵۶
- ۲-۲-۳-۴ مطالعه ریخت شناسی سطح ۵۷
- ۳-۲-۳-۴ خواص اپتیکی لایه‌ها ۶۲
- ۳-۳-۴ ساخت سلول خورشیدی حساس شده به رنگ با استفاده از TiO_2 سنتز شده به روش اسپری پایرو لیزیز ۶۴
- ۴-۴ سنتز پودر TiO_2 به روش هیدروترمال ۶۶
- ۱-۴-۴ تهیه پودر TiO_2 ۶۶
- ۲-۴-۴ مطالعه خواص ساختاری ۶۷
- ۳-۴-۴ مطالعه ریخت شناسی سطح لایه ۶۸
- ۴-۴-۴ مطالعه خواص نوری ۶۹
- ۵-۴-۴ ساخت سلول خورشیدی حساس شده به رنگ با استفاده از TiO_2 سنتز شده با روش هیدروترمال ۷۱
- ۱-۵-۴-۴ تهیه خمیر از نانو ذرات TiO_2 ۷۱
- ۲-۵-۴-۴ مراحل ساخت قطعه سلول خورشیدی حساس شده با رنگ ۷۲
- ۵-۴ اثر آرایش آلومینیوم در ویژگی‌های فیزیکی TiO_2 به روش هیدروترمال ۷۳
- ۱-۵-۴ تهیه پودر با روش هیدروترمال با افزودن ناخالصی آلومینیوم نترات ۷۳
- ۲-۵-۴ مطالعه خواص ساختاری با استفاده از پراش پرتو ایکس ۷۴
- ۳-۵-۴ مطالعه ریخت شناسی ۷۵
- ۴-۵-۴ مطالعه خواص اپتیکی ۸۰

۸۲ ۶-۴ جمع بندی
۸۳ فصل پنجم جمع بندی و پیشنهادات
۸۴ ۱-۵ نتیجه گیری
۸۴ ۲-۵ پیشنهادات
۸۶ منابع

فهرست جداول

- جدول ۱-۱ توصیف تاریخ مربوط به سلول‌های خورشیدی حساس شده به رنگ ۳
- جدول ۱-۲ خواص عمومی و ساختار دو فاز آناز و روتایل دی اکسید تیتانیوم ۱۶
- جدول ۲-۲ مقادیر گاف نواری برای زیر لایه‌های شیشه و FTO با دماهای متفاوت زیر لایه ۲۰
- جدول ۳-۲ پارامترهای فوتو ولتایی سلول‌های مونتاژ شده ۲۷
- جدول ۴-۲ پارامترهای فوتو ولتایی سلول‌های مبتنی بر P_{25} تجاری و میکروکره‌های TiO_2 ۳۲
- جدول ۵-۲ ویژگی‌های مربوط به سلول‌های ساخته شده با آلایش و بدون آلایش ۳۴
- جدول ۱-۴ پارامترهای بررسی شده با روش اسپری و نام نمونه‌ها ۵۵
- جدول ۲-۴ نتایج حاصل از XRD لایه‌های نازک TiO_2 بر روی زیرلایه FTO با غلظت‌های مختلف محلول اولیه ۴، ۸، ۱۲ مولار به ترتیب برای نمونه‌های S_1 ، S_2 ، S_3 ۵۷
- جدول ۳-۴ ضخامت نمونه‌های سنتز شده ۶۰
- جدول ۴-۴ درصد اتمی عناصر در نمونه‌های S_1 ، S_2 ، S_3 ۶۲
- جدول ۵-۴ محاسبات مربوط به سلول خورشیدی ساخته شده ۶۶
- جدول ۶-۴ درصد اتمی عناصر در نمونه SH ۶۹
- جدول ۷-۴ محاسبات مربوط به سلول خورشیدی ساخته شده ۷۳
- جدول ۸-۴ نام نمونه‌ها به همراه میزان ناخالصی آلومینیوم ۷۴
- جدول ۹-۴ درصد اتمی عناصر در نمونه‌های S_1 ، S_2 ، S_3 ۷۹

فهرست اشکال و نمودارها

- شکل ۱-۱: طرح واره‌ای از عملکرد سلول‌های خورشیدی حساس شده به رنگ ۷
- شکل ۲-۱: ساختار مولکولی و بازده بالای تبدیل انرژی برای چند رنگ متداول در سلول‌های خورشیدی ۱۰
- شکل ۱-۲: دیاگرام فاز TiO_2 ۱۵
- شکل ۲-۲: نحوه‌ی آرایش هشت وجهی های TiO_2 در سه فاز (الف) آاناتاز (ب) روتایل (ج) بروکیت ۱۶
- شکل ۳-۲: الگوی پراش پرتو ایکس (XRD) لایه‌ها ۱۸
- شکل ۴-۲: نمودار طیف جذب لایه‌های آلییده و بدون آلیش بازپخت شده و بدون باز پخت ۱۹
- شکل ۵-۲: نمودار طیف عبور لایه‌های آلییده و بدون آلیش بازپخت شده و بدون باز پخت ۱۹
- شکل ۶-۲: نمودار $(\alpha hv)^2$ بر حسب $h\nu$ لایه‌های انباشت شده بر روی شیشه و FTO در دماهای متفاوت زیر لایه ۲۰
- شکل ۷-۲: نمودار گاف نواری لایه‌های آلییده و بدون آلیش با زیر لایه FTO ۲۲
- شکل ۸-۲: میکرو گراف EDX نمونه بازپخت داده شده آلییده با نیتروژن ۲۳
- شکل ۹-۲: تصویر از بالای TiO_2 آماده شده و خمیر TiO_2 بر روی FTO پس از آسیاب توپی ۲۴

- شکل ۲-۱۰: الف) تصویر FESEM از فوتو آند تهیه شده ب) تصویر HR-TEM از نانو ساختار TiO_2 و تصویر TEM نانو ساختار TiO_2 پس از آسیاب توپی ۲۵
- شکل ۲-۱۱: طیف پراش پرتو ایکس نانو ساختارهای یک بعدی TiO_2 ۲۶
- شکل ۲-۱۲: طیف عبور UV-Vis فوتو آندهای مختلف ۲۶
- شکل ۲-۱۳: نمودار چگالی جریان-ولتاژ سلول‌های خورشیدی حساس شده به رنگ مونتاژ شده با ضخامت‌های مختلف فوتو آندهای نانو ساختارهای یک بعدی TiO_2 ۲۷
- شکل ۲-۱۴: طیف XRD، TiO_2 تهیه شده ۲۹
- شکل ۲-۱۵: الف و ب) تصویر FESEM از میکرو کره‌های TiO_2 ف با بزرگنمایی مختلف ج) تصویر FESEM از میکرو کره‌های TiO_2 ۳۰
- شکل ۲-۱۶: نمودار چگالی جریان-ولتاژ سلول تهیه شده ۳۱
- شکل ۲-۱۷: الگوی پراش پرتو ایکس نمونه ها الف) با آرایش ب) بدون آرایش ۳۳
- شکل ۲-۱۸: نمودار الگوی جذب نمونه ها الف) با آرایش ب) بدون آرایش ۳۳
- شکل ۲-۱۹: نمودار چگالی جریان-ولتاژ برای نمونه ها الف) با آرایش ب) بدون آرایش ۳۴
- شکل ۳-۱: الف) نمایی از یک میکروسکوپ الکترونی روبشی اثر میدانی استفاده شده در این پایان نامه ب) طرح واره‌ای از اجزای یک میکروسکوپ الکترونی روبشی ۳۰
- شکل ۳-۲: یک طرح وار از نمونه پراش از صفحات بلور ۴۰
- شکل ۳-۳: تصویری از یک دستگاه پراش پرتو ایکس که در این پایان نامه برای اندازه گیری XRD به

- کار گرفته شد. ۴۲
- شکل ۳-۴: (الف) طیف نگار UV-Vis، (ب) جایگاه‌های نمونه‌های مرجع و شاهد. ۴۳
- شکل ۳-۵: (الف) اتو کلاو مورد استفاده در این پایان نامه (ب) کوره آون. ۴۵
- شکل ۳-۶: (الف) دستگاه اسپری پیرولیز استفاده شده در این پایان نامه، (ب) طرح واره‌ای از دستگاه اسپری پیرولیز شامل قسمت‌های مهم. ۴۵
- شکل ۳-۷: (الف) شبیه ساز نور خورشید شرکت نانو شات (ب) مشخصه یاب پارامترهای سلول خورشیدی شرکت نانو شات. ۴۷
- شکل ۴-۱: الگوی XRD لایه نازک FTO سنتز شده بر روی زیر لایه ی شیشه. ۵۱
- شکل ۴-۲: طیف عبور نور برای لایه نازک FTO سنتز شده بر روی زیر لایه ی شیشه. ۵۲
- شکل ۴-۳: طیف جذب نور برای لایه نازک FTO سنتز شده بر روی زیر لایه ی شیشه. ۵۳
- شکل ۴-۴: گاف نواری برای لایه نازک FTO سنتز شده بر روی زیر لایه ی شیشه. ۵۳
- شکل ۴-۵: الگوی XRD لایه‌های نازک TiO_2 بر روی زیر لایه FTO سنتز شده با غلظت‌های مختلف ۴، ۸، ۱۲ مولار به ترتیب برای نمونه‌های S_1 ، S_2 ، S_3 . ۵۶
- شکل ۴-۶: تصویر FESEM برای نمونه S_1 در مقیاس $5\mu m$ ، 500 nm . ۵۸
- شکل ۴-۷: تصویر FESEM برای نمونه S_2 در مقیاس $5\mu m$ ، 500 nm . ۵۸
- شکل ۴-۸: تصویر FESEM برای نمونه S_3 در مقیاس $5\mu m$ ، 500 nm . ۵۹
- شکل ۴-۹: (الف) ضخامت برای نمونه S_1 ، (ب) ضخامت برای نمونه S_2 ، (ج) ضخامت برای نمونه S_3 . ۶۰

- شکل ۴-۱۰: EDAX لایه‌های نازک TiO_2 بر روی زیر لایه FTO سنتز شده با غلظت‌های مختلف ۴، ۸، ۱۲ مولار به ترتیب برای نمونه‌های S_1 ، S_2 ، S_3 ۶۱
- شکل ۴-۱۱: طیف عبور نمونه‌های TiO_2 بر روی زیر لایه FTO سنتز شده با غلظت‌های مختلف ۴، ۸، ۱۲ مولار به ترتیب برای نمونه‌های S_1 ، S_2 ، S_3 ۶۳
- شکل ۴-۱۲: طیف جذب نمونه‌های TiO_2 بر روی زیر لایه FTO سنتز شده با غلظت‌های مختلف ۴، ۸، ۱۲ مولار به ترتیب برای نمونه‌های S_1 ، S_2 ، S_3 ۶۳
- شکل ۴-۱۳: نمودارهای تغییرات (αhv) بر حسب انرژی فوتون (hv) نمونه‌های TiO_2 بر روی زیر لایه FTO سنتز شده با غلظت‌های مختلف ۴، ۸، ۱۲ مولار به ترتیب برای نمونه‌های S_1 ، S_2 ، S_3 ۶۴
- شکل ۴-۱۴: الف) نمایی از تزریق الکترولیت برای ساخت سلول خورشیدی ب) نمایی از یک سلول ساخته شده ۶۵
- شکل ۴-۱۵: منحنی چگالی جریان-ولتاژ برای سلول ساخته شده ۶۶
- شکل ۴-۱۶: الگوی XRD لایه نازک TiO_2 سنتز شده به روش هیدروترمال ۶۷
- شکل ۴-۱۷: تصویر FESEM در مقیاس 100 nm ، $1\text{ }\mu\text{m}$ به همراه اندازه‌ی دانه ها ۶۸
- شکل ۴-۱۸: نمودار EDAX مربوط به نمونه SH ۶۹
- شکل ۴-۱۹: نمودار طیف عبور برای پودر ساخته شده به روش هیدروترمال ۷۰
- شکل ۴-۲۰: نمودار طیف جذب برای پودر ساخته شده به روش هیدروترمال ۷۰
- شکل ۴-۲۱: نمودار گف اپتیکی برای پودر ساخته شده به روش هیدروترمال ۷۱

- شکل ۴-۲۲: منحنی چگالی جریان-ولتاژ برای سلول ساخته شده به روش دکتر بلید. ۷۳
- شکل ۴-۲۳: طیف پراش پرتو ایکس مربوط به نمونه‌های SH_1 ، SH_2 ، SH_3 ۷۵
- شکل ۴-۲۴: تصویر FESEM برای نمونه SH_1 بدون ناخالصی در مقیاس $1\mu m$ ، 100 nm ۷۶
- شکل ۴-۲۵: تصویر FESEM برای نمونه SH_2 با آلیاژ در مقیاس $1\mu m$ ، 100 nm ۷۶
- شکل ۴-۲۶: تصویر FESEM برای نمونه SH_3 با آلیاژ در مقیاس $1\mu m$ ، 100 nm ۷۷
- شکل ۴-۲۷: اندازه‌ی ذرات برای نمونه‌های SH_1 ، SH_2 ، SH_3 ۷۸
- شکل ۴-۲۸: نمودار EDAX مربوط به نمونه‌های SH_1 ، SH_2 ، SH_3 ۷۹
- شکل ۴-۲۹: نمودار طیف جذب نمونه‌های SH_1 ، SH_2 ، SH_3 ۸۰
- شکل ۴-۳۰: نمودار طیف عبور برای نمونه‌های SH_1 ، SH_2 ، SH_3 ۸۱
- شکل ۴-۳۱: نمودار گاف اپتیکی نمونه‌های SH_1 ، SH_2 ، SH_3 ۸۲

فصل اول - مقدمه

۱-۱ مقدمه

در دوران باستان خورشید به عنوان یک سیاره‌ی زندگی دهنده پرستش می شد. پس از افزایش دانش بشر و تکامل صنعتی، خورشید را به چشم منبع انرژی مشاهده کردند. آب، انرژی باد، انرژی زیستی منابع انرژی مورد استفاده در جوامع اولیه‌ی بشری است که هر کدام به صورت مستقیم یا غیر مستقیم به انرژی حاصل از خورشید مربوط است [۱]. افزایش مصرف انرژی به علت رشد تکنولوژی و ازدیاد جمعیت و بنابراین به دنبال آن افزایش قیمت انرژی و همچنین نگرانی بابت تمام شدن سوخت‌های فسیلی بشر را واداشته است تا به دنبال انرژی های پاک و تجدید پذیر باشند [۲]. انرژی حاصل از نور خورشید یکی از در دسترس‌ترین و پاک‌ترین منابع تأمین انرژی جهان است. بدین جهت سال‌هاست که سلول‌های فوتو ولتایی برای تبدیل انرژی خورشید به الکتریسیته به کار می روند [۳].

۱-۲ سلول های خورشیدی فوتو ولتایی

تاریخ سلول‌های فوتو ولتایی از سال ۱۸۳۹، زمانی که الکساندر ادmond بکرل جریان‌های الکتریکی را از واکنش‌های شیمیایی خاصی که توسط نور ایجاد شد مشاهده نمود، آغاز شد. اثرهای مشابه توسط دانشمندان دیگر در سلنیوم، چند دهه‌ی بعد مشاهده شد. اولین سلول خورشیدی سیلیکونی فوتو ولتایی در سال ۱۹۵۴ با بهره‌وری ۶ درصد ساخته شد [۴, ۵]. استفاده از اثر فوتو ولتایی در دهه ۱۹۷۰ به جای سوخت‌های فسیلی از طرف دانشمندان پیشنهاد شد، زیرا استفاده از زغال سنگ، گاز و نفت برای تولید انرژی الکتریکی مقادیر زیادی آلودگی (دی اکسید کربن) منتشر می‌کند که مخاطرات زیست محیطی دارد [۵]. در جدول ۱-۱ توصیف تاریخ مربوط به سلول های فوتو ولتایی و پدیده‌های مربوط به آن گزارش داده شده است. تولید اولین سلول خورشیدی سیلیکونی، تاثیری اساسی در فن آوری فوتو ولتایی گذاشت. رشد چنین فن آوری بستگی به توسعه‌ی مواد و ساختار آن ها دارد. اما با این حال هدف همیشه بیشترین توان با کمترین هزینه است. سیستم‌های فوتو ولتایی،

در مقایسه با انواع دیگر روش‌های تولید انرژی الکتریکی، انرژی الکتریکی تمیز و دسترسی آسان به آن را بدون صرف هر گونه فعالیت مکانیکی و یا مصرف سوخت فسیلی تولید می‌کنند [۶].

جدول ۱- ا توصیف تاریخ مربوط به سلول های فوتو ولتایی و پدیده های مربوط به آن

سال	دانشمندان و نوع پدیده ی اکتشافی
۱۸۳۹	کشف پدیده ی فوتو ولتایی توسط بکرل
۱۸۷۶	کشف تاثیرات فوتو ولتایی در ماده ی سلنیوم توسط آدامز
۱۹۰۰	ادعای پلانک مبنی بر کوانتومی بودن نور
۱۹۳۰	پیشنهاد نظریه کوانتومی مواد جامد توسط ویلسون
۱۹۴۰	توسعه ی نظریه ی یکسو کننده ی حالت جامد توسط مات و شاتکی(دیود)
۱۹۴۹	برادین،براتین و شاگلی اختراع ترانزیستور
۱۹۵۴	ساخت سلول خورشیدی با بهره وری ۶ درصد توسط چاپرین،فولر و پیرسون
۱۹۵۴	رینولدز و همکاران ساخت سلول خورشیدی بر اساس سولفید کادمیوم
۱۹۵۸	اولین استفاده از سلول های خورشیدی در ماهواره ی ونگارد ۱

۳-۱ تقسیم بندی سلول های خورشیدی

۳-۱-۱ نسل اول - سلول های خورشیدی سیلیکونی

سلول های سیلیکونی اولین نسل از سلول های خورشیدی فوتو ولتایی است که از ساختار بلوری برخوردار می باشند که از سیلیکون برای ساخت سلول خورشیدی استفاده شده است. با وجود روش های دیگر با بازدهی بیشتر اما این فن آوری به طور مداوم در حال توسعه به منظور بهبود قابلیت و کارایی آن است. سلول های تک بلور و بس بلور انواع سلول های سیلیکونی هستند که در زیر به صورت مختصر مورد معرفی قرار می گیرند.

۳-۱-۱-۱ سلول های خورشیدی سیلیکونی تک بلور

سلول های خورشیدی سیلیکونی تک بلور بیشترین استفاده را دارد و حدود ۸۰ درصد از بازار جهان را در اختیار خود دارد. این دسته از سلول ها تا زمانی که سلول دیگری با بازده بیشتر و مقرون به صرفه توسعه داده شود مورد استفاده قرار خواهد گرفت. این سلول با استفاده از سیلیکون تک بلور پیوندگاه p-n ایجاد شده است. با توجه به خاصیت مواد موجود در سیلیکون، در حال حاضر تلاش برای افزایش بهره وری با استفاده از انرژی تحریک شده توسط فوتون در طول موج های بالاتر کاهش یافته است. علاوه بر این، تابش با طول موج های بالاتر باعث ایجاد حرارت می شود و تأثیری در افزایش بهره وری ندارد. حداکثر بهره وری از سلول های تک بلور ۲۳ درصد است [۶, ۷].

۳-۱-۲ سلول های خورشیدی سیلیکونی بس بلور

تلاش برای کاهش در هزینه ها و همچنین افزایش بهره وری سلول های خورشیدی منجر به ساخت سلول های خورشیدی بس بلوری شده است. بازده و هزینه ی سلول های پلی بلور نسبت به تک بلور کمتر است [۷, ۸].

۱-۳-۲ نسل دوم - سلول های خورشیدی لایه نازک

در مقایسه با سلول های خورشیدی سیلیکونی بلوری، تکنولوژی مربوط به لایه های نازک نوید کاهش هزینه های سلول های فوتو ولتایی را با استفاده از کاهش در هزینه های مواد، افزایش طول عمر سلول ها و همچنین کاهش مخاطرات محیط زیستی را داده است. مزیت سلول های خورشیدی نسل دوم این است که به دلیل جذب نوری بالاتر نیم رساناهای به کار برده شده در نسل دوم نسبت به سیلیکون، ضخامت لایه در این نسل در مقیاس کمتر از میکرومتر است در حالی که در سلول های سیلیکونی ضخامت آن به حدود چند صد میکرون می رسد. کاهش هزینه های مواد و همچنین کاهش هزینه های تولید، نتیجه ی استفاده از لایه های نازک در سلول های خورشیدی است. سلول های نسل دوم از موادی مانند سیلیکون بی شکل، سیلیکون بس بلور نازک بر روی زیر لایه های کم هزینه، کادمیوم تلوراید ساخته می شود [۹].

۱-۳-۳ نسل سوم - سلول های خورشیدی پلیمری

در این نوع از سلول ها از اتصال p-n برای جداسازی حامل های بار برای تولید الکتریسیته که در نسل های قبل استفاده شده است بهره برده نشده است. سلول های خورشیدی نانو ساختار، سلول های خورشیدی پلیمری، سلول های خورشیدی حساس شده به رنگ از انواع سلول های خورشیدی نسل سوم هستند. از آنجایی که کار پژوهشی این پایان نامه در مورد سلول های خورشیدی حساس شده به رنگ است پس از بررسی نسل های مختلف سلول های خورشیدی به بحث و بررسی این نوع از سلول ها پرداخته خواهد شد.

۱-۳-۴ نسل چهارم - سلول های خورشیدی پروسکایتی

در سال ۲۰۰۹ اولین سلول خورشیدی پروسکایتی ساخته شد [۱۰]. در سال های اخیر بازده سلول های خورشیدی از % ۹/۷ تا % ۲۰/۱ افزایش یافته است [۱۱]. اما در مورد ثبات و طول عمر

سلول‌های خورشیدی پروسکایتی مطالعات کمتری صورت گرفته است. محققان، تحقیقات گسترده‌ای برای بازده بهتر و طول عمر طولانی برای سلول‌های خورشیدی پروسکایتی شروع کرده‌اند.

۱-۴ سلول‌های حساس شده به رنگ

ساخت سلول‌های حساس شده به رنگ توسط گراتزل و همکارانش در سال ۱۹۹۱ آغاز شد امروزه این نوع از سلول‌ها با نام سلول گراتزل شناخته می‌شوند [۳]. بازده اولین قطعه‌ی ساخته شده به وسیله‌ی گراتزل ۷/۱٪ گزارش شد. این نتیجه برای بسیاری از دانشمندان شگفت‌انگیز بود. سلول‌های حساس شده به رنگ یا سلول‌های گراتزل در فلزات واسطه یا مولکول‌های رنگ آلی که بر روی یک نیمه هادی جذب شده است ساخته شده اند. پس از جذب نور توسط رنگ یک الکترون از رنگ کننده شده و به نیمه‌هادی تزریق می‌شود. به عنوان نیمه هادی، بسیار متخلخل، نانو بلور دی اکسید تیتانیوم بهترین بهره‌وری را داشته است [۱۲، ۱۳].

۱-۴-۱ نحوه‌ی عملکرد یک سلول خورشیدی حساس شده به رنگ

در شکل ۱-۱ طرح واره‌ای از عملکرد سلول‌های خورشیدی حساس شده به رنگ نشان داده شده است.

ساز و کار یک سلول خورشیدی حساس شده به رنگ به صورت کلی به ترتیب ذیل قابل توصیف است:

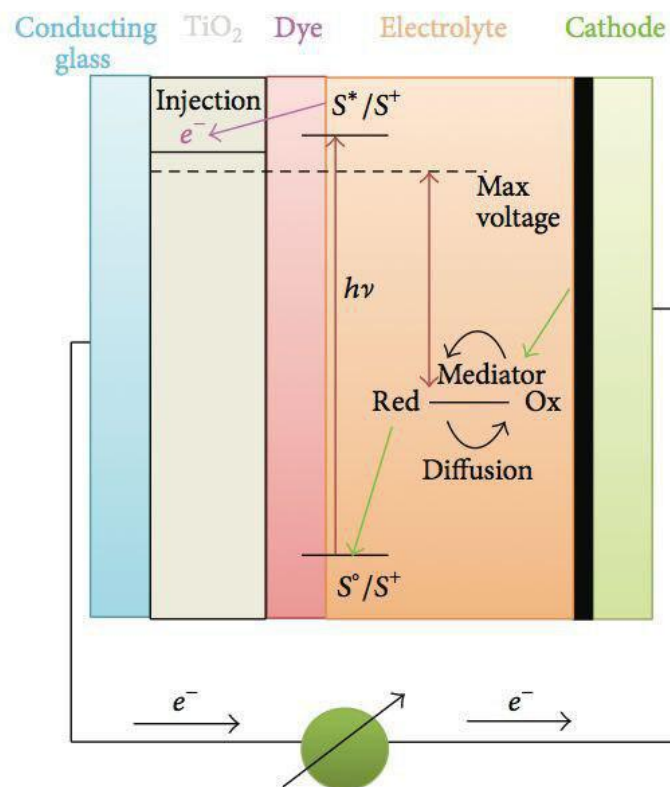
۱- شار فوتون‌های گسیل شده توسط رنگ نشانده شده روی سطح دی اکسید تیتانیوم جذب می‌شود و به دلیل انتقال الکترون، رنگ از حالت پایه (S^+) به حالت برانگیخته (S^*) تبدیل می‌شود.

۲- الکترون‌های برانگیخته شده به نوار رسانایش الکتروود دی اکسید تیتانیوم تزریق و منجر به اکسایش رنگ می‌شوند.

۳- الکترون های تزریق شده، بین نانو ذرات دی اکسید تیتانیوم انتشار یافته و میدان الکتریکی و در نتیجه جریان الکتریکی ایجاد می کنند. جریان الکتریکی به اکسید رسانای شفاف منتقل می شود و می تواند از طریق از طریق سیم کشی خارجی به الکتروود شمارشگر و سپس محلول الکتروولیت برسد.

۴- الکترون ها توسط یون تری یدید موجود در الکتروولیت با جذب الکترون ها از الکتروود شمارشگر و به یون یدید کاهش پیدا می کند.

۵- رنگ اکسید شده (S°) که در تماس با الکتروولیت است، الکترون ها را از یون یدید پذیرش کرده و به حالت پایه (S^{+}) بر گشته است. یون یدید نیز پس از انتقال الکترون به حالت اکسید شده ی خود یعنی یون تری یدید تبدیل شده است [۱۴, ۱۵].



شکل ۱-۱ طرح واره ای از عملکرد سلول های خورشیدی حساس شده به رنگ [۱۶]

۱-۴-۲ بررسی اجزای یک سلول خورشیدی حساس شده به رنگ

۱-۴-۲-۱ فوتو آند نیمرسانا

نیمرساناهایی مانند دی اکسید تیتانیوم، اکسید روی و کالکوژن‌ها به دلیل کاربرد گسترده‌ی خود در ذخیره‌سازی انرژی و اینکه اثرات زیست محیطی مخربی ندارند مورد تحقیقات گسترده‌ای قرار گرفته‌اند. با تاباندن یک پرتو فوتون پرا انرژی برابر یا بیشتر از انرژی گاف، الکترون از نوار رسانش کنده شده و یک حفره بر جای می‌گذارند. این الکترون‌ها به نوار ظرفیت رفته و در آنجا با انتقال به مدار خارجی می‌توانند جریان الکتریکی ایجاد کنند [۱۷، ۱۸].

نیمرسانا سطحی را برای جذب رنگدانه ایجاد می‌کند و الکترون‌ها را از رنگدانه گرفته و آنها را به مدار خارجی برده و ایجاد جریان الکتریکی می‌کند. نرخ حمل و نقل الکترون‌ها به میزان بلورینگی و ریخت شناسی سطح بستگی دارد و مساحت سطح نیمرساناها در بهره‌وری سلول‌های خورشیدی تاثیر گذار است. تا کنون اکسیدهای فلزی مانند دی اکسید تیتانیوم، اکسید روی و اکسید قلع به عنوان نیمه رسانا در سلول‌های خورشیدی حساس شده به رنگ استفاده شده است، اما آزمایشات نشان داده است که سلول‌های ساخته شده از نیمرساناهای اکسید روی و اکسید قلع بهره‌وری کمتری نسبت به دی اکسید تیتانیوم داشته‌اند. دو فاز آاناتاز و روتایل از دی اکسید تیتانیوم در سلول‌های خورشیدی حساس شده به رنگ استفاده شده است که فاز آاناتاز به دلیل انتقال بالای الکترون از رنگدانه به مدار خارجی جهت تولید جریان الکتریکی نسبت به فاز روتیل، ترجیح داده می‌شود. همچنین فرآیند انتقال الکترون در روتایل کندتر از آاناتاز است [۱۹].

۱-۴-۲-۲ زیر لایه رسانای شفاف:

به طور معمول FTO (اکسید قلع با آرایش فلئور) و ITO (اکسید قلع با آرایش ایندیوم) به عنوان زیرلایه رسانای شفاف در سلول‌های خورشیدی حساس شده به رنگ کاربرد دارند. یک ITO نوعی

دارای عبور بالای ۸۰ درصدی است و میزان مقاومت آن کمتر از $18 \Omega/\text{cm}^2$ است. در حالی که برای یک FTO نوعی میزان عبور بالای ۷۵ درصد و مقاومت آن نیز در حدود $8 \Omega/\text{cm}^2$ است [۲۰].

[۲۱]. پلیمرهای رسانا نیز می توانند به عنوان یک جایگزین برای زیرلایه های شیشه ای به دلیل انعطاف پذیری و کم هزینه بودن آن استفاده شود. همچنین فلزاتی مانند فولاد ضد زنگ، تنگستن و تیتانیوم نیز می تواند به عنوان بستر رسانای شفاف در سلول های خورشیدی مورد استفاده قرار گیرد [۲۱].

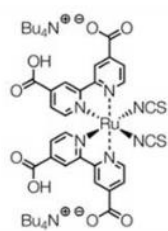
۱-۴-۲-۳ رنگدانه

وظیفه ی رنگدانه در سلول های خورشیدی حساس شده به رنگ جذب نور و انتقال الکترون به نوار رسانش نیمه هادی است. از لحاظ شیمیایی رنگدانه با سطح متخلخل نیمه رسانا پیوند خورده است [۲۲]. ویژگی های رنگدانه خوب شامل توانایی جذب بالا در طول موج ناحیه ی مرئی، اتصال قوی به سطح نیمه رسانا، ضریب خاموشی بالا و پایداری شیمیایی بالا می باشد.

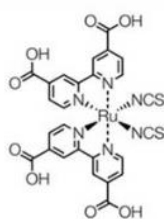
N۳ یا رنگدانه ی قرمز، NV۱۹، NV۴۹ یا رنگدانه ی سیاه و Z۹۰۷ مؤثرترین رنگدانه های به کار

رفته در سلول های خورشیدی حساس شده به رنگ هستند. شکل ۵ ساختار مولکولی و بازده بالای

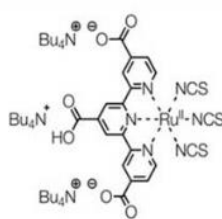
تبدیل انرژی را برای هر رنگ نشان داده است [۲۳].



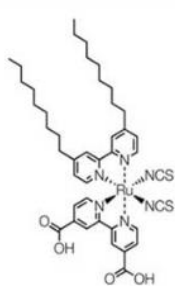
N719
 $\eta = 11.18\%$



N3
 $\eta = 11.03\%$



N749
 $\eta = 11.10\%$



Z907
 $\eta = 9.50\%$

η : بازده تبدیل انرژی

شکل ۱-۲ ساختار مولکولی و بازده بالای تبدیل انرژی برای چند رنگ متداول در سلول‌های خورشید [۲۳, ۲۴].

۱-۴-۲-۴ الکترولیت

جریان اتصال کوتاه و ولتاژ مدار باز، به طور قابل توجهی به الکترولیت بستگی دارند. الکترولیت مورد استفاده در سلول‌های خورشیدی عمدتاً یدید و تری یدید است که وظیفه‌ی انتقال الکترون بین الکتروود شمارشگر و الکتروود نوری را دارد. الکترولیت یک جز کلیدی از تمام سلول‌های خورشیدی حساس شده به رنگ است. با این حال وجود برخی خواص ذاتی نامطلوب در الکترولیت بر دوام و پایداری الکترولیت مایع در سلول‌های خورشیدی حساس شده به رنگ در طولانی مدت اثر گذار است. به عنوان مثال نه تنها از نشت محلول آلی سمی باعث آلودگی محیط زیست می شود بلکه با تبخیر یون ید فرار مقاومت داخلی کلی را با کاهش غلظت حامل های بار افزایش خواهد داد. الکترولیت مایع،

الکترولیت حالت جامد و الکترولیت شبه جامد سه نوع از الکترولیت های قابل کاربرد در سلول های خورشیدی حساس شده به رنگ هستند که در ذیل به طور مختصر بررسی خواهند شد [۲۴].

الکترولیت مایع: الکترولیت مایع که بیشترین استفاده از آن صورت می گیرد، یدید/تری یدید است. این نوع الکترولیت به دلیل سینیتیک آن بهترین کارایی را دارد. تزریق الکترون به فوتو الکتروود در محدوده ی زمانی فمتو ثانیه است که بسیار سریع تر از بازه ی زمانی است که با تری یدید صورت می گیرد. هنگام استفاده از یدید/تری یدید باید غلظت آن در نظر گرفته شود. وقتی غلظت ید کم است، حفظ رسانایی الکترولیت دشوار است. از سوی دیگر زمانی که غلظت ید بالاست، بعلت نوترکیبی الکترون با الکتروود نوری باعث افت عملکرد سلول های خورشیدی حساس به رنگ شده است [۲۴].

الکترولیت جامد: الکترولیت جامد یک جایگزین مناسب برای الکترولیت های مایع است، چون می تواند پایداری مکانیکی بهتر نسبت به الکترولیت مایع داشته باشد و همچنین فرآیندهای ساخت مربوط به آن ساده تر است [۲۵].

الکترولیت شبه جامد: بسیاری از تحقیقات نشان داده است که استفاده از الکترولیت جامد در سلول های خورشیدی حساس شده به رنگ کمتر از ۵ درصد است. این به دلیل کم بودن تماس با الکتروود نوری و همچنین کم بودن هدایت در این نوع از الکترولیت ها است. برای حل مشکلات بالا، یک راه حل جایگزین پیشنهاد شده است و آن ترکیب الکترولیت مایع با الکترولیت جامد به صورت یک الکترولیت شبه جامد یا ژل الکترولیت است .

۱-۵ جمع‌بندی

در سال‌های اخیر، استفاده از انرژی خورشیدی، به عنوان منبع پاک و تجدید پذیر گسترش یافته است.

ساخت سلول‌های خورشیدی از قرن نوزدهم شروع شد، زمانی که بشر خاصیت فوتوولتایی را کشف

کرد و دریافت که می‌توان از تابش مستقیم نور خورشید، الکتریسیته تولید کرد. هم‌اکنون، محققان

بر روی افزایش بازده سلول‌های خورشیدی، با استفاده از مواد ارزان قیمت برای پایین آوردن هزینه‌ی

تولید تلاش می‌نمایند.

فصل دوم

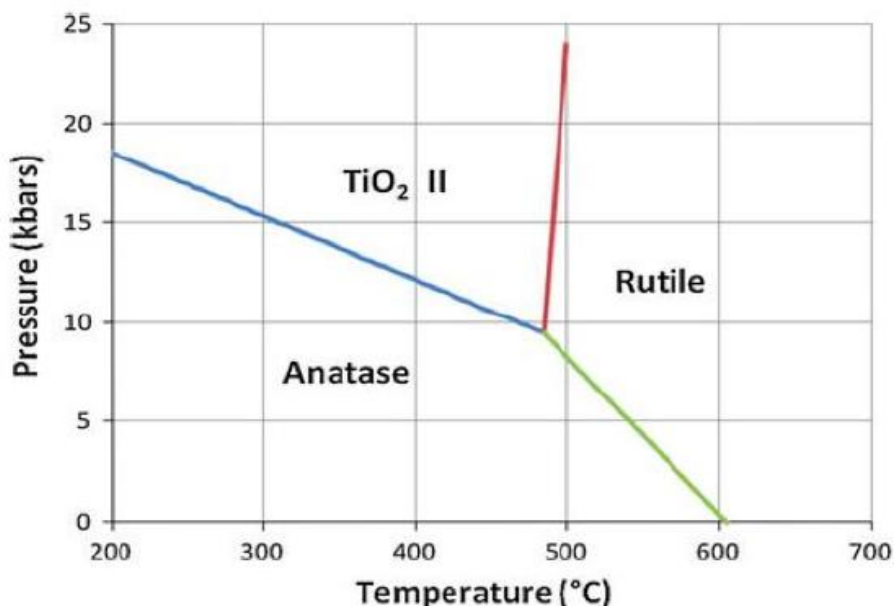
مروری بر مقالات

۲-۱ مقدمه:

ساختار و خواص نوری TiO_2 به روش‌های انباشت بستگی دارد. روش‌های مختلفی برای انباشت این لایه‌ها استفاده می‌شود که از این میان می‌توان به غوطه‌وری، سل-ژل، هیدروترمال، اکسایش حرارتی و اسپری نام برد. روش‌های لایه‌نشانی بر ویژگی‌های فیزیکی از قبیل ساختار بلوری و ریخت‌شناسی سطحی ماده تأثیر بسزایی دارد. با تغییر در برخی پارامترهای ترمودینامیکی رشد می‌توان در ویژگی‌های لایه نازک تغییر ایجاد کرد. در این فصل به بررسی تعدادی از مقالات گزارش شده که به بررسی خواص نوری لایه‌های اکسید تیتانیوم به روش اسپری و هیدروترمال با تغییر پارامترهای رشد و آرایش به منظور استفاده در ساخت سلول‌های خورشیدی پرداخته می‌شود.

۲-۲ ساختار بلوری دی‌اکسید تیتانیوم

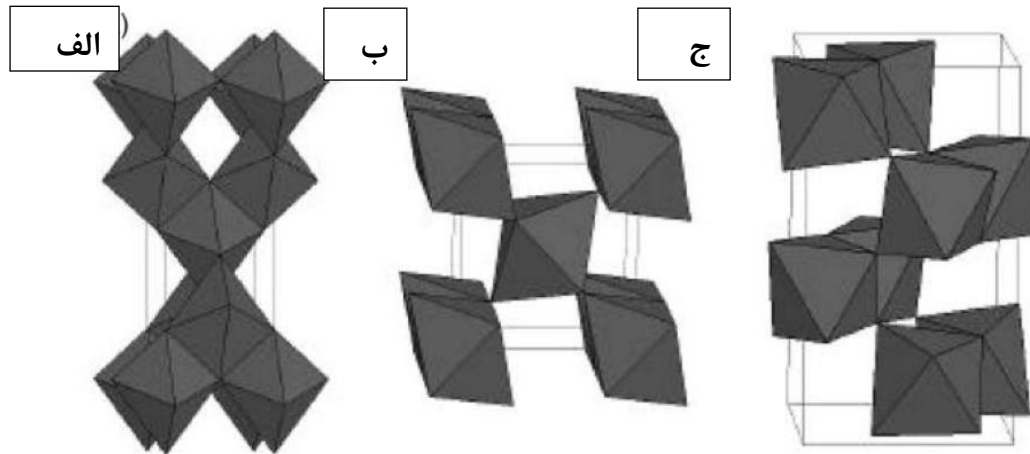
عملکرد دی‌اکسید تیتانیوم یا تیتانیا به عنوان اکسید فلزی نیم‌رسانا به دلیل خواص کاتالیزوری نوری خود بسیار مورد مطالعه قرار گرفته است. آناتاز و روتایل و بروکیت سه فاز مختلف از ساختار بلوری دی‌اکسید تیتانیوم است. به لحاظ ترمودینامیکی آناتاز و بروکیت شبه پایدار هستند ولی روتایل در فشار معمولی پایدارتر است [۲۶]. ساخت بروکیت بدون حضور آناتاز یا روتایل دشوار است بنابراین مطالعه بر روی بروکیت به ندرت انجام شده است [۲۷]. دمایی در حدود 700°C و بالاتر برای تولید ساختار روتایل گزارش شده است [۲۸]. همانطور که در شکل ۱-۲ نشان داده شده است دمایی بالاتر از 600°C درجه‌ی سانتی‌گراد برای تبدیل ساختار آناتاز به روتایل نیاز است [۲۸].



شکل ۲-۱ دیاگرام فاز TiO_2

همانطور که در شکل ۲-۲ نشان داده شده است ساختار بلوری آناتاز متشکل از ۴ لبه به اشتراک گذاری است در حالی که ساختار بلوری روتایل متشکل از ۲ لبه ی به اشتراک گذاشته شده است. ساختار آناتاز و روتایل هر دو چهار گوش است. انرژی گاف نواری برای دی اکسید تیتانیوم در حدود ۳eV گزارش شده است. مقادیر ۳/۲۶eV و ۳/۰۵eV نیز به ترتیب برای فاز آناتاز و روتایل گزارش شده‌اند. آقای ویلیام گریگور در سال ۱۷۹۱ در انگلستان حضور یک عنصر جدید را در ماده‌ی معدنی به رسمیت شناخته شده ی $(FeTiO_3)$ حدس زد و این موضوع منجر به کشف عنصر تیتانیوم شد [۲۹]. سه حالت شناخته شده ی ساختار بلوری دی اکسید تیتانیوم آناتاز، روتایل، بروکیت به ترتیب (تتراگونال، $a=b=3,782A, c=9,502A$)، (تتراگونال، $a=b=4,854A, c=2,953A$)، (قائم الزاویه، $a=5,436A, b=9,166A, c=5,135A$) است [۳۰]. واحدهای ساختاری اساسی آناتاز و روتایل از هشت وجهی که در آن اتم تیتانیوم در مرکز قرار گرفته است و توسط شش اتم اکسیژن احاطه شده است. ساختار آناتاز متشکل از زنجیر کج و معوج از هشت وجهی، از طریق لبه های به اشتراک گذاشته

شده به هم مربوط است. در حالی که در روتایل به صورت زنجیره ای خطی به اشتراک گذاشته شده است.



شکل ۲-۲ نحوه ی آرایش هشت وجهی های TiO_2 در سه فاز الف) آناتاز ب) روتایل ج) بروکیت

خواص عمومی و ساختار دو فاز آناتاز و روتایل دی اکسید تیتانیوم در جدول ۱-۲ نشان داده شده است [۳۱]. استفاده از فاز آناتاز و روتایل دی اکسید تیتانیوم، شامل طیف گسترده ای از زمینه هایی مانند لوازم الکترونیکی [۳۲]، حسگر گازی [۳۳] و کاربردهای ضد باکتری [۳۴] است.

جدول ۱-۲ خواص عمومی و ساختار دو فاز آناتاز و روتایل دی اکسید تیتانیوم

روتایل	آناتاز	نوع ساختار
۴/۲	۳/۸	چگالی (gr/m^3)
چهار گوش	چهار گوش	ساختار بلوری
۰/۷۱	۰/۷۱	گرمای ویژه ($J/k.kg$)
۳/۰۲	۳/۲۰	انرژی گاف (eV)

۲-۳ مشخصه یابی ساختاری و نوری TiO_2 آلاینده با نیتروژن به روش اسپری

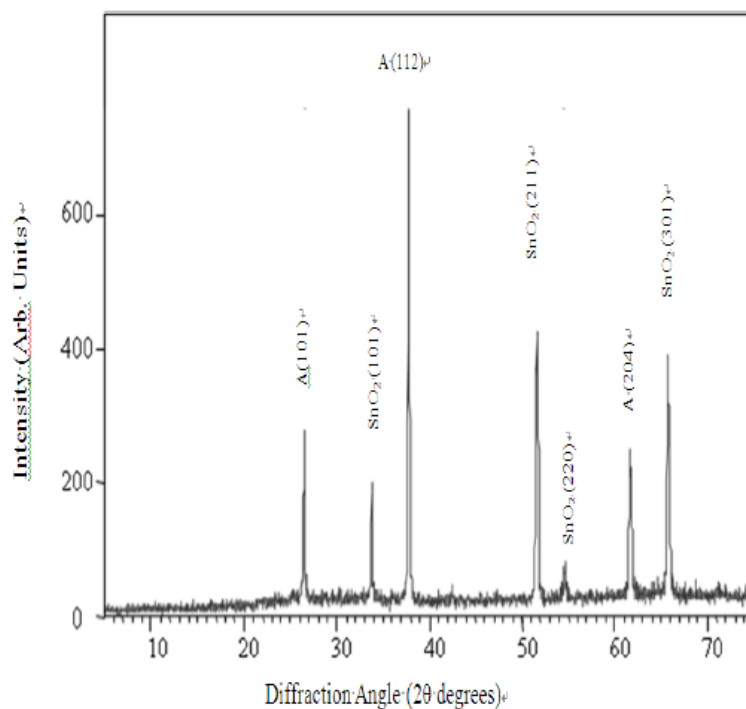
پایرولیز بر روی FTO

لایه های نازک اکسید تیتانیوم (TiO_2) آلاینده با نیتروژن با ضخامت 400 nm به روش اسپری پایرولیز توسط آیکو و همکاران او انباشته شدند و اثر دمای زیرلایه بر خواص نوری لایه نیز مورد بررسی قرار گرفتند [۳۵]. در این تحقیق از FTO و شیشه به عنوان زیرلایه استفاده شد. قبل از لایه نشانی زیرلایه ها با حمام التراسونیک پر از آب مقطر به مدت 2 min شستشو داده شد. پس از آن به مدت 20 min در استون نگهداری و سپس مجدداً در آب مقطر شستشو داده شد. از زیر لایه شیشه و FTO برای بررسی ویژگی های نوری استفاده گردید.

برای لایه نشانی TiO_2 توسط اسپری پایرولیز، $120\text{ }\mu\text{L}$ از تیتانیم (IV) ایزوپروپوکساید ($\text{C}_{12}\text{H}_{28}\text{O}_4\text{Ti}$) و 200 mL ایزوپروپانول (I) در یک ظرف 500 mL مخلوط شدند. این مخلوط در دمای 50°C با یک همزن مغناطیسی حدود 15 min مخلوط گردید. این مخلوط، پیش ماده تولید شده ای است که توسط سیستم اسپری با استفاده از نیتروژن فشرده به عنوان گاز حامل، اسپری شد. فاصله نازل اسپری تا زیرلایه حدود 15 cm و دمای زیرلایه برای تهیه نمونه های مختلف 150 ، 200 و 300°C تنظیم شد. عمل اسپری به صورت پالسی انجام گرفت. هر پالس شامل 5 s اسپری و 30 s مکث بود. ده پالس برای هر نمونه با آهنگ جریان پیش ماده $2/6\text{ mL/min}$ انجام شد.

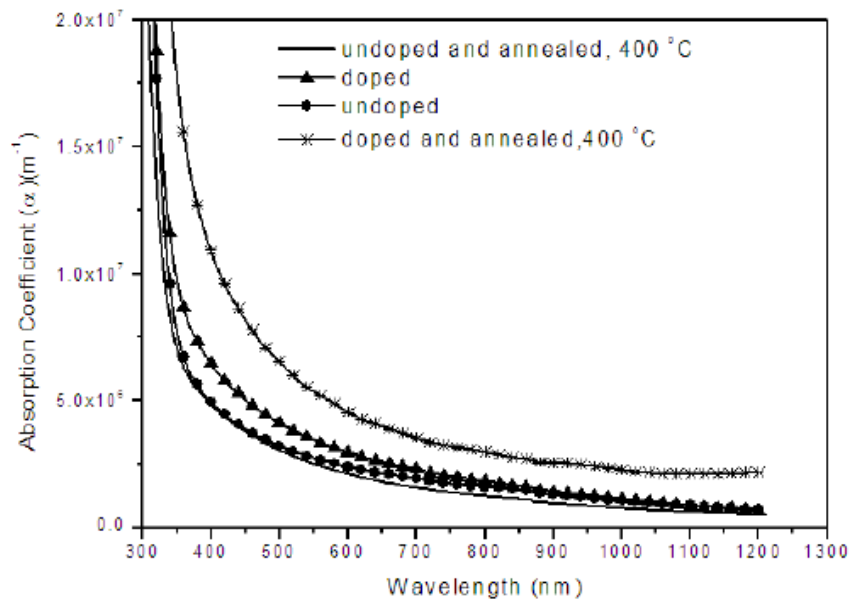
برای آرایش نیتروژن، از یک لوله شیشه ای پریکس که در یک کوره لوله افقی قابل برنامه ریزی قرار دارد جهت گرم کردن نمونه ها در فضای گاز نیتروژن استفاده می شود. کوره لوله با یک دماسنج دیجیتالی برای اندازه گیری دمای محفظه نمونه نصب شده اند. نمونه ها با استفاده از نگهدارنده نمونه فلزی، داخل محفظه قرار گرفته و به تدریج از دمای اتاق تا دمای ثابت 450°C گرم می شوند. جریان گاز نیتروژن به داخل محفظه با آهنگ $20\text{ cm}^3/\text{s}$ نگاه داشته شد. پس از 30 دقیقه، نمونه ها بدون قطع کردن جریان نیتروژن تا دمای اتاق خنک شدند.

شکل ۲-۳، الگوی پراش پرتو ایکس (XRD) لایه های نازک TiO_2 را که روی زیرلایه های FTO در دمای زیرلایه 200°C پوشیده شده است را نشان می دهد. این لایه ها آمورف هستند، اما زمانی که در دمای 400°C در هوا بازپخت داده شدند، قله هایی متمایز جهت گیری های (۱۰۱)، (۱۱۲) و (۲۰۴) را نشان می دهد که نمایانگر بلوری شدن است. این نتایج با یافته های محققان دیگر که دمای حرارت انتقال بلورین-آمورف را به دمای 350°C برای TiO_2 بدست آورده اند، مطابقت دارد. قله SnO_2 در الگو مربوط به زیرلایه FTO است.

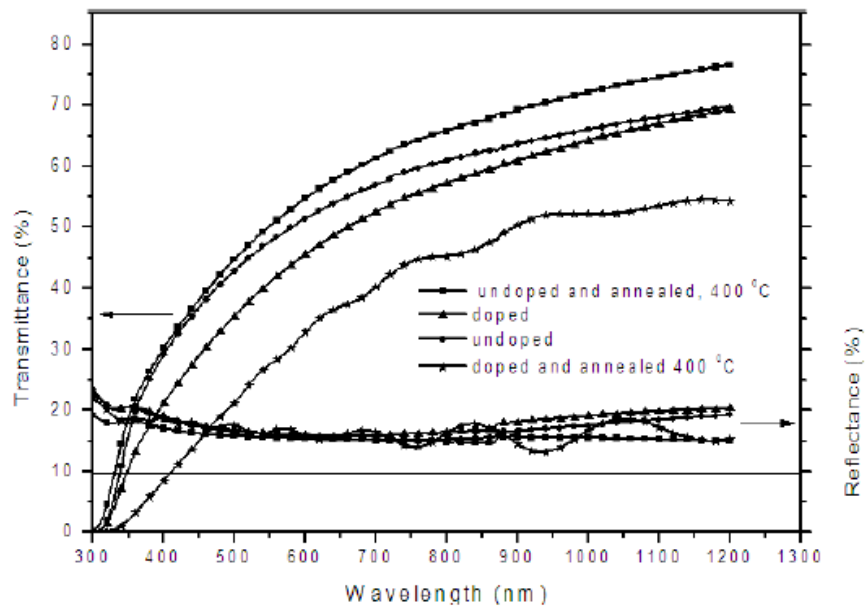


شکل ۲-۳ الگوی پراش پرتو X لایه ها [۳۵].

شکل ۲-۴ ضریب جذب، (α) نمونه های مختلف آلاینده با نیتروژن و بدون آلاینش TiO_2 بازپخت شده و بدون بازپخت را نشان می دهد، مشاهده می شود که در همه طول موج ها، لایه های نازک آلاینده در مقایسه با لایه های بدون آلاینش ضریب جذب بزرگتری دارند.



شکل ۲-۴ نمودار ضریب جذب لایه های آلیایده و بدون آلیایش بازپخت داده شده و بدون بازپخت [۳۵].

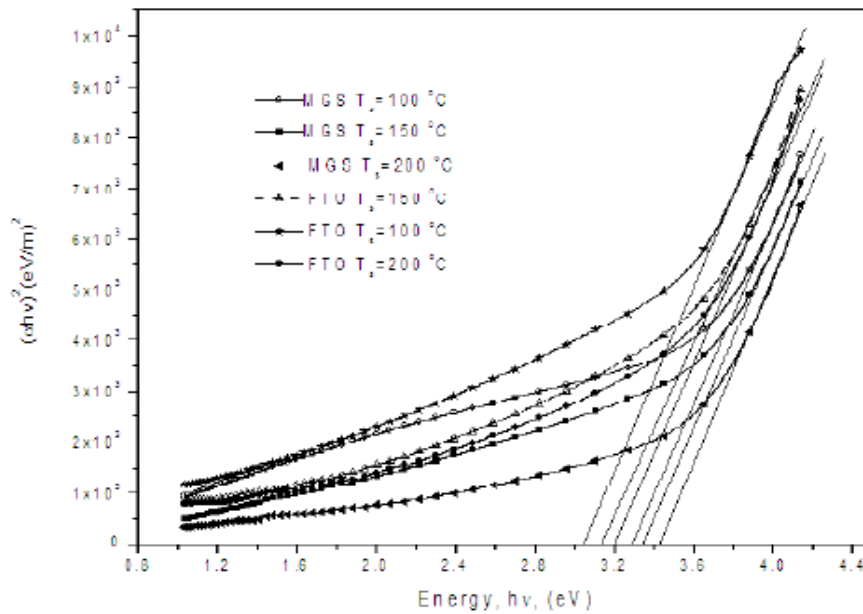


شکل ۲-۵ نمودار طیف عبور و بازتاب نمونه های آلیایده و بدون آلیایش بازپخت داده شده و بدون بازپخت [۳۵].

شکل ۲-۵ خواص عبور و بازتابی را برای نمونه های بدون آلیایش و آلیایده با نیتروژن نشان می

دهد.

شکل ۲-۶ نمودار $(\alpha h\nu)^2$ بر حسب $h\nu$ برای تعیین فاصله گاف نواری برای لایه رشد یافته بر روی هر دو زیرلایه شیشه و FTO را نشان می دهد.



شکل ۲-۶ نمودار $(\alpha h\nu)^2$ بر حسب $h\nu$ لایه‌های انباشت شده بر روی شیشه و FTO در دماهای زیرلایه متفاوت [۳۵].

مقادیر گاف نواری در جدول ۲-۲ نشان داده شده است که مشخص است که با خطای آزمایش $(\pm 0.8 \text{ eV})$ ، گاف نواری در دماهای و برای هر دو زیرلایه تغییر نکرده است.

جدول ۲-۲ مقادیر گاف نواری برای زیرلایه های شیشه و FTO با دماهای زیرلایه متفاوت.

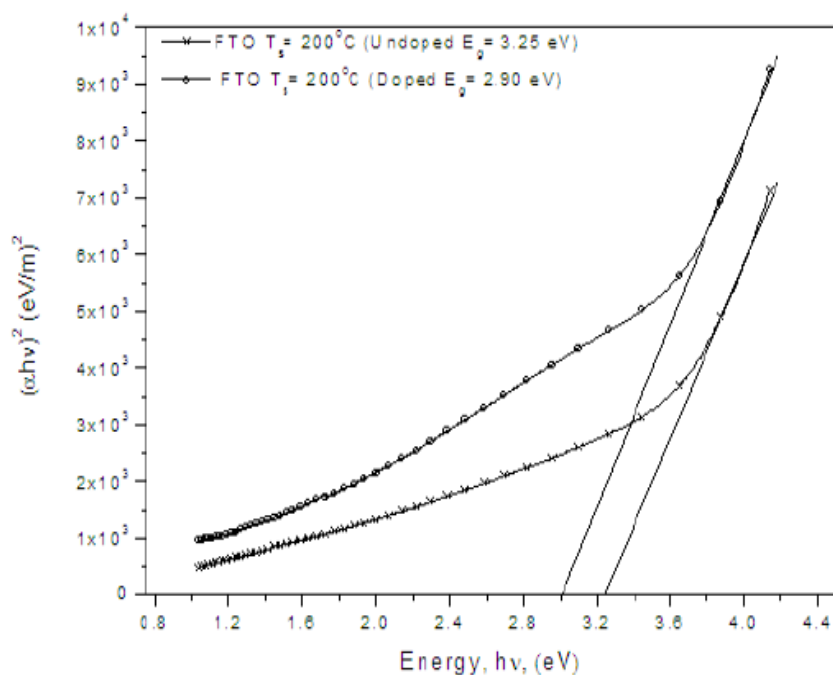
دما	۲۰۰	۱۵۰	۱۰۰	دمای زیرلایه
انرژی گاف نواری	۳/۲۰	۳/۱۸	۳/۱۵	FTO
انرژی گاف نواری	۳/۴۰	۳/۳۰	۳/۲۵	شیشه

در همه دماهای زیرلایه، گاف نواری لایه‌های نازک TiO_2 با زیرلایه شیشه، بالاتر از گاف نواری ثبت شده برای لایه‌های پوشش داده شده بر روی FTO بوده، که می‌تواند به دلیل ترکیب لایه نازک TiO_2 و اکسید قلع آلیبده با فلورین مربوط به زیرلایه FTO باشد که در نتیجه به طور موثر یک لایه بسیار ضخیم تر در مقایسه با لایه انباشته بر روی شیشه است. این افزایش ضخامت، باعث افزایش مقدار جذب برای لایه نازک TiO_2 با زیرلایه FTO می‌شود. گاف نواری از معادله زیر محاسبه شد:

$$\alpha h\nu = a(h\nu - E_g)^r \dots\dots\dots(1-2)$$

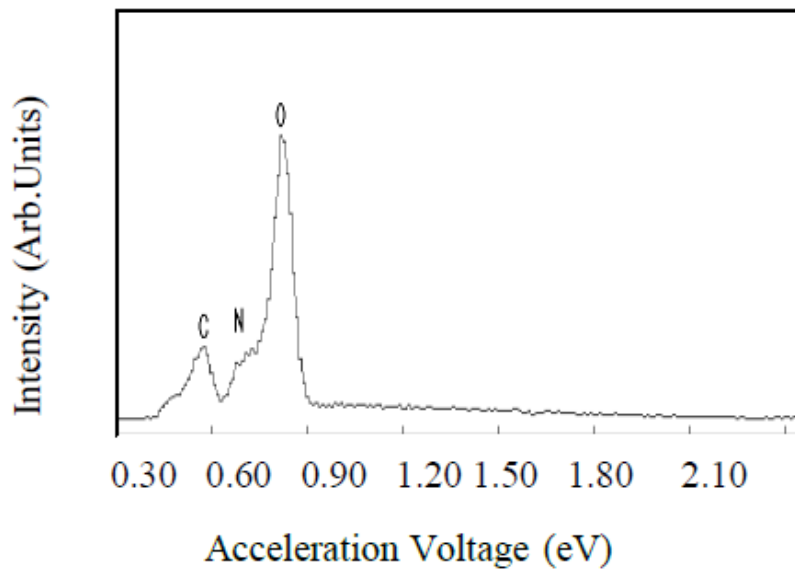
که در آن α ضریب جذب، a یک ثابت که به انرژی فوتون وابسته نیست و r ثابت عددی با مقدار $1/2$ است، گاف نواری (E_g) با مربع جذب (α^2) تغییر می‌کند به گونه‌ای که با افزایش آن کاهش می‌یابد. بدین ترتیب مقادیر کوچک گاف نواری برای لایه نازک TiO_2 با زیرلایه FTO که جذب آنها بالاتر است، توجیه می‌شود. علیرغم تفاوت در گاف های نواری لایه ها با زیرلایه‌های متفاوت، مقادیر گاف نواری همانطور که در شکل ۲-۷ نشان داده شده است، هنوز هم در محدوده ۳/۴۰-۳/۱۰ eV است که در مطالعات قبلی برای لایه های TiO_2 به دست آمده مشاهده شده بودند.

شکل ۲-۷ گاف نواری لایه‌های تهیه شده بر روی زیرلایه FTO و بازپخت داده شده در دمای 400°C را نشان می‌دهد. لایه های بدون آرایش گاف نواری ۳/۲۵eV دارند در حالی که لایه‌های آلیبده با نیتروژن دارای گاف نواری ۲/۹۰eV هستند. این مشاهدات با نتایج به دست آمده توسط باوشون در توافق است که کاهش خاصی را در گاف نواری TiO_2 تهیه شده به روش کندوپاش از ۳/۲ به ۲/۷eV به دلیل آرایش نیتروژن، مشاهده کرد. این کاهش در اثر سطوح ناخالصی نیتروژن است که سطوح دنباله نواری انرژی را در نوار رسانش و ظرفیت و یا هر دو از اکسید تیتانیوم ایجاد می‌کند.



شکل ۲-۷ نمودار گاف نواری لایه های آلیایده و بدون الایش با زیرلایه FTO.

نیترژن موجود در ساختار TiO_2 به وسیله نتایج EXD در شکل ۲-۸ تایید شد. قله که نشان دهنده اکسیژن است به اکسیژن ترکیب شده در اکسید قلع (F: SnO_2) و اتصال پشتی TiO_2 مربوط می شود. از آنجا که خمیر کربن برای ساختن اتصال لایه‌ها در تجزیه و تحلیل SEM استفاده می شود، قله کربن دیده شده می تواند ناشی از خمیر باشد. قله تیتانیوم در میکروگراف دیده نمی شود، زیرا حضور عناصر در میکروگراف به آرایش الکترونی آن و ولتاژ شتاب بستگی دارد که در برخی از محدوده ها تنها عناصر با اعداد اتمی داده شده می توانند شناسایی شوند. لایه نازک دی اکسید تیتانیوم که توسط اسپری پایرولیزیز در دمای 100°C لایه نشانی شده، آمورف است. اما با بازپخت در دمای 400°C فاز آن به آنازاز تغییر کرد. با توجه به طیف عبور و بازتاب لایه‌های آلیایش یافته با نیترژن جذب بیشتری در مقایسه با لایه‌های آلیایش نیافته داشتند. آلیایش لایه‌ی TiO_2 با نیترژن گاف انرژی را کاهش داد اما انرژی یوباخ را افزایش داد که هر دو مربوط به وارد کردن حالت‌های ناخالصی در نوار رسانش یا نوار ظرفیت یا هر دوی آنها می‌شود.



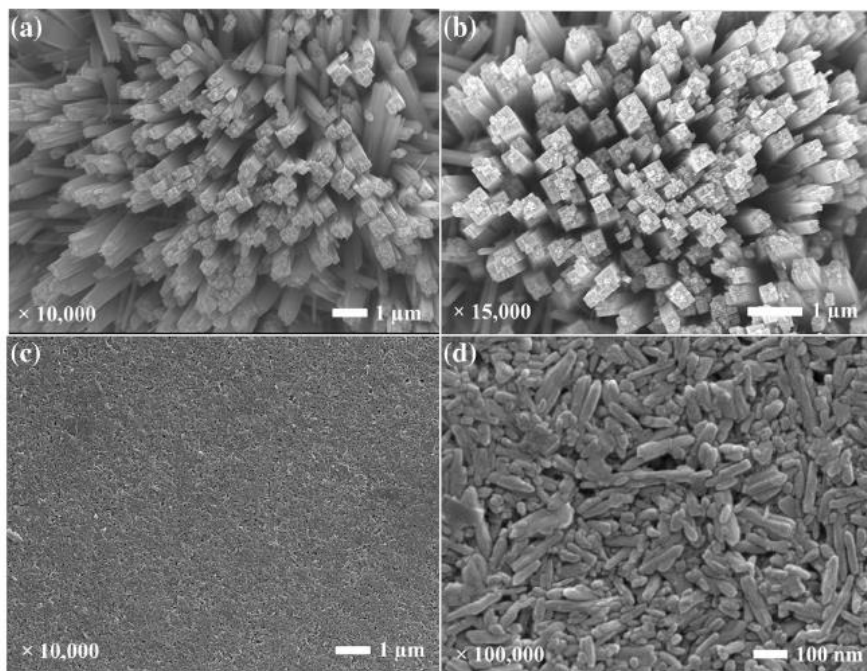
شکل ۸-۲ میکروگراف EDX نمونه بازپخت داده شده آلائیده با نیتروژن.

۴-۲ سنتز فوتوآند نانو ساختار یک بعدی TiO_2 به روش هیدروترمال

کارتیکی و همکارانش فوتوآند TiO_2 با نانوساختارهای یک بعدی برای کاربرد در سلول خورشیدی حساس به رنگ (DSSC) به روش هیدروترمال تهیه کردند که انتقال و طول عمر الکترون را بهبود بخشیده است [۳۶]. نانوساختار TiO_2 به طور مستقیم بر روی زیرلایه‌های FTO روش هیدروترمال رشد یافت. تیتانیوم (IV) ایزوپروپوکساید و تیتانیوم (IV) کلرید ($TiCl_4$)، به عنوان پیش ماده تیتانیوم، آب دو بار تقطیر به عنوان حلال و اسید هیدروکلریک به عنوان محیط اسیدی استفاده شد. در این روش ۱۵mL HCl به ۱۵mL آب اضافه شده و ۰/۵mL از TTIP و ۰/۵mL $TiCl_4$ به صورت قطره ای اضافه شد در حین اضافه کردن مواد اولیه محلول به طور مداوم هم زده شد تا محلول کاملاً شفاف به دست آید. زیرلایه در یک ظرف تفلون ۵۰mL همراه با محلول گذاشته شد و سپس در یک اتوکلاو فولاد ضد زنگ و به مدت ۱۲h در دمای $150^\circ C$ قرار داده شد. پس از خنک کردن اتوکلاو تا دمای اتاق، لایه برداشته شد و با آب دوبار تقطیر شسته شد. لایه TiO_2 سفید، به طور یکنواخت سراسر زیرلایه را پوشش داده بود که می‌توانست به آسانی با استفاده از پنس برداشته شود. لایه TiO_2 تهیه

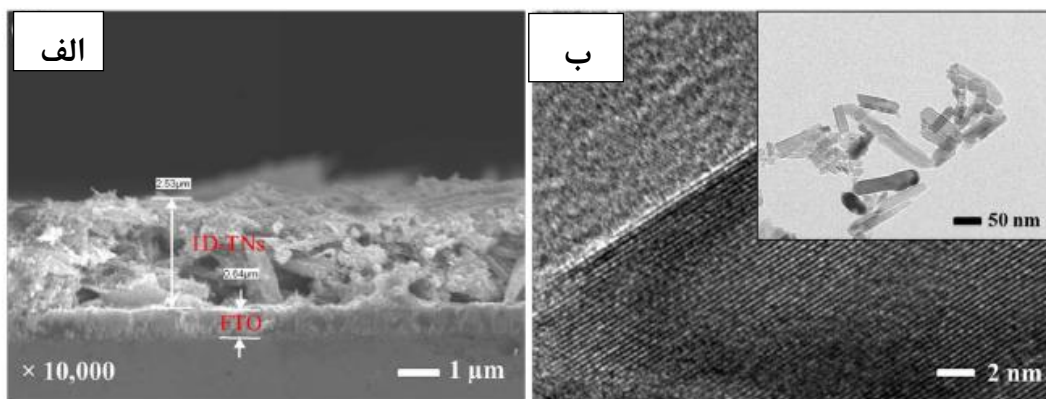
شده با پلی اتیلن گلیکول و اتانول در نسبت ۱:۱:۳ همراه با ۱ قطره تریتون-ایکس ۱۰۰ و ۵g از واسطه های سایش (توپ های سراسر زیرکونیومی ۳ میلیمتری) در بطری ۳۰ میلی لیتری قرار داده شده و به منظور داشتن خمیری همگن، برای خورد شدن به مدت چند ساعت در آن نگهداری شد. با اسنفاده از خمیر بدست آمده به روش دکتر بلید سلول خورشیدی ساخته شد.

شکل ۲-۹ تصاویر FESEM، TiO_2 آماده شده و خمیر TiO_2 را بر روی FTO پس از آسیاب توپی نشان را می دهد. برای TiO_2 آماده شده ساختار متوازی السطوحی را نشان می دهد، در حالی که پس از آسیاب توپی، لایه TiO_2 دکتر بلید بر روی FTO پوشش یکنواختی از ساختار مانند دانه برنج را داراست. بزرگنمایی FESEM، TiO_2 پس از آسیاب توپی در شکل d نشان داده شده است. آسیاب خمیر TiO_2 ، نانوساختارهای آن را ریز کرده و اندازه ذرات را کاهش می دهد. پیش از این گزارش شده است که آسیاب توپی اندازه دانه را از چند میکرومتر تا حدود ۲۰nm کاهش و سطح ویژه را افزایش می دهد.



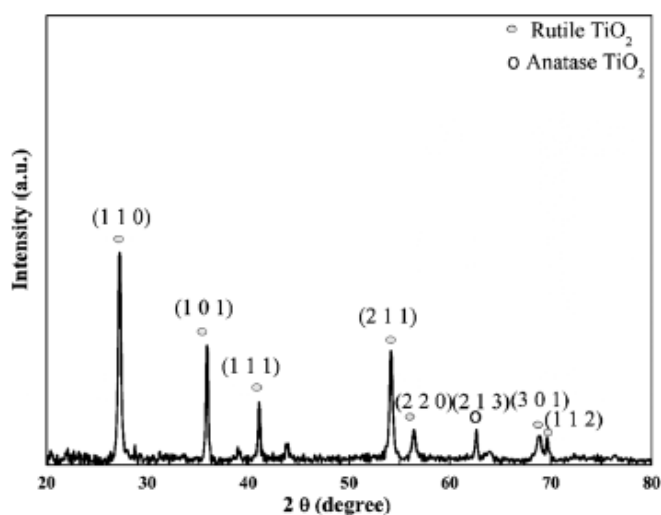
شکل ۲-۹ تصویر از بالای TiO_2 آماده شده و خمیر TiO_2 بر روی FTO پس از آسیاب توپی .

شکل ۲-۱۰ الف تصویر FESEM از فوتوآند آماده شده را نشان می‌دهد. به وضوح می‌توان مشاهده کرد که مورفولوژی یک بعدی پس از پوشش روی FTO حفظ می‌شود. ضخامت لایه برای تک لایه پوشش داده شده در حدود $2/53 \mu\text{m}$ است که با اندازه گیری ضخامت با استفاده از پروفیل سنج تایید شد. همچنین تصویر HR-TEM از نانوساختار TiO_2 و تصویر FETEM نانوساختار TiO_2 را پس از آسیاب توپی در شکل ۲-۱۰ ب نشان داده شده است، که خرد شدن TiO_2 را تایید می‌کند.

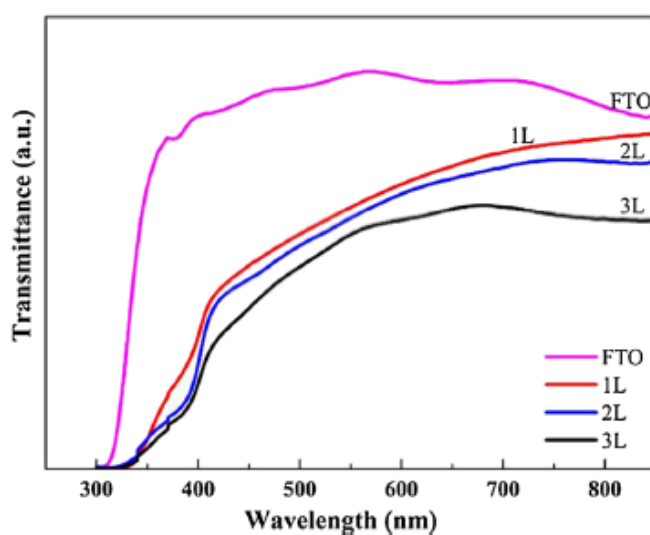


شکل ۲-۱۰ الف تصویر FESEM از فوتوآند تهیه شده و ب تصویر HR-TEM از نانوساختار TiO_2 و تصویر TEM نانوساختار TiO_2 پس از آسیاب توپی.

شکل ۲-۱۱ الگوی XRD نانوساختارهای یک بعدی TiO_2 را نشان می‌دهد که قله‌های مربوط به ساختار روتیل از TiO_2 و همچنین برخی از قله‌های فاز آناتاز در آن مشخص است. برای مشاهده اثر ضخامت بر روی عبور فوتوآند، طیف عبور UV-Vis آنها اندازه گیری شده و در شکل ۲-۱۵ نشان داده شده است [۳۷].

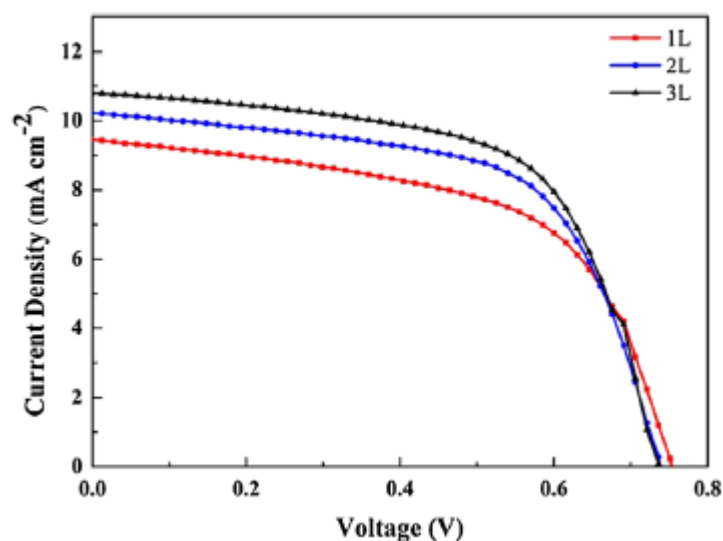


شکل ۱۱-۲ طیف پراش پرتو X نانوساختارهای یک بعدی TiO_2 .



شکل ۱۲-۲ طیف عبور UV-Vis فوتوآندهای مختلف.

مشخصه یابی چگالی جریان-ولتاژهای سلول‌های خورشیدی حساس به رنگ مونتاژ شده با ضخامت های مختلف فوتوآندهای نانوساختارهای یک بعدی TiO_2 در شرایط آزمایشی استاندارد ($1/5 \text{ AM}$, 100 mW/cm^2) با استفاده از شبیه ساز خورشیدی اندازه گیری و در شکل ۱۷-۲ نشان داده شده است [۳۸].



شکل ۲-۱۳ نمودار چگالی جریان-ولتاژ سلول‌های خورشیدی حساس به رنگ مونتاژ شده با ضخامت‌های مختلف فوتوآندهای نانوساختارهای یک بعدی TiO_2 .

پارامترهای فتوولتائیک سلول‌های مونتاژ شده که از منحنی‌های $J-V$ به دست آمده در جدول ۲-۳ ذکر شده است. نانو ساختارهای آماده شده توسط آسیاب سیاره‌ای، سبب افزایش مساحت سطح به حجم شده است. این امر راهی برای سوار شدن مؤثر رنگدانه و بهبود عملکرد سلول رنگدانه‌ای فراهم می‌کند.

جدول ۲-۳ پارامترهای فتوولتایی سلول‌های مونتاژ شده.

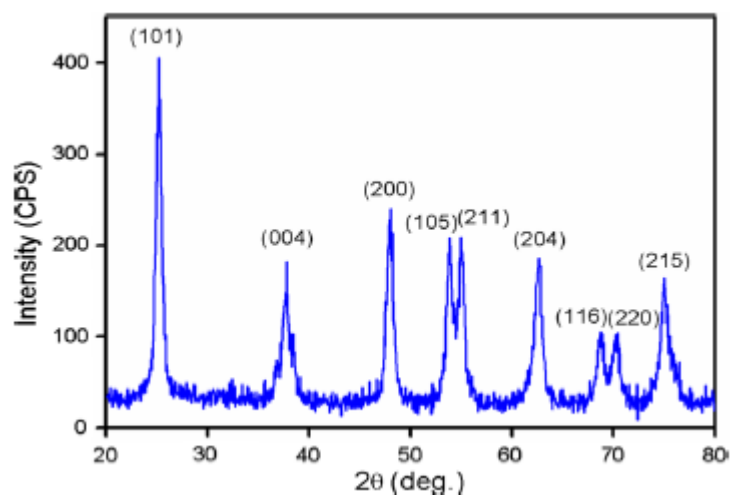
Coating	Thickness (μm)	Absorbed dye ($\times 10^{-7}$ mol/cm ²)	V_{oc} (V)	J_{sc} (mA/cm ²)	FF	η (%)
1	2.5	1.32	0.754	9.44	0.678	4.83
2	4	1.56	0.740	10.21	0.720	5.44
3	5	1.65	0.736	10.82	0.727	5.77

۲-۵ سنتز میکروکره‌های TiO_2 به روش هیدروترمال

سانتوش و همکاران میکروکره‌های تخلخل متوسط TiO_2 را با موفقیت به روش هیدروترمال تهیه و محصول به دست آمده را در 45.0°C پخت دادند [۳۹]. بدین منظور ۱۵ mL تیتانیوم (IV) بوت

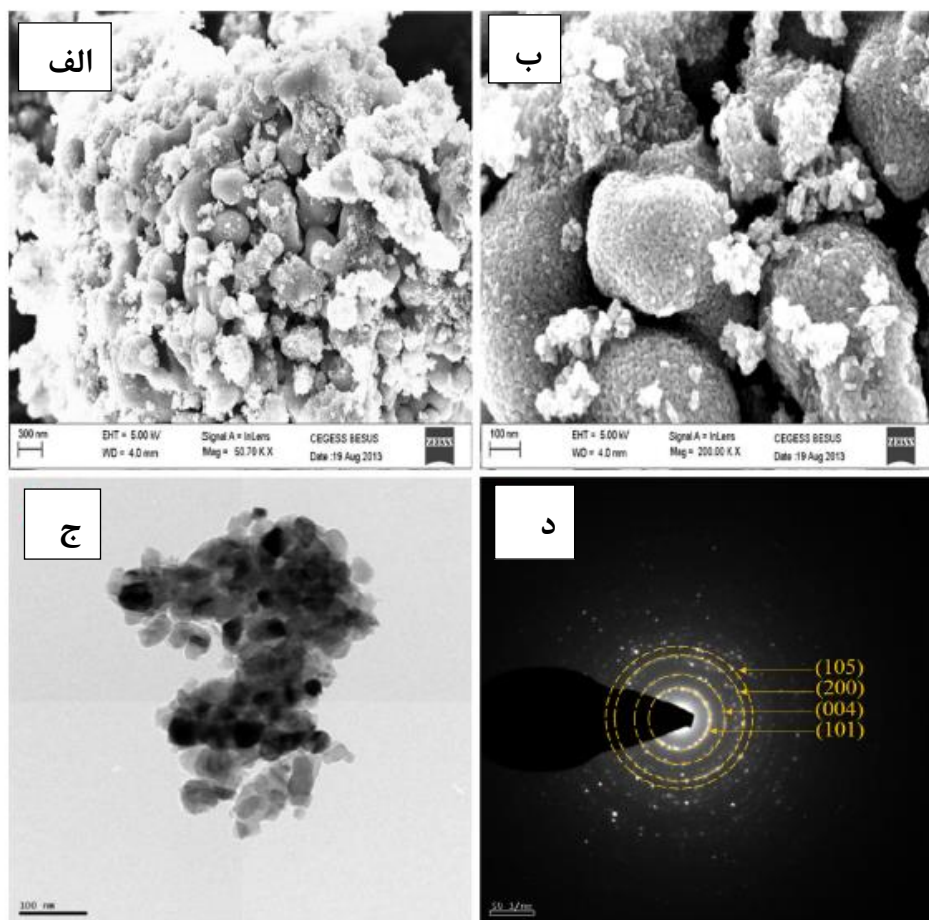
اکساید (به آرامی به ۰/۵ mL آب (H₂O) اضافه شد و پس از ۱۵min هم زدن، ۰/۵ mL اتانول نیز به آنها اضافه و به مدت ۱۵min تحت هم زدن شدید قرار گرفت. محلول به ظرف فولاد ضد زنگ اتوکلاو که با تفلون پوشانده شده، انتقال یافته و سپس در کوره هوای داغ قرار گرفت تا دمای آن به ۱۲۰°C برسد و به مدت ۲۴h در آن نگهداری شد. پس از آن اتوکلاو به طور عادی سرد شده و دمای آن تا دمای اتاق (۲۸°C) کاهش یافت. رسوب باقی مانده صاف شد و جهت از بین بردن ناخالصی ها چند مرتبه با اتانول تحت شستشو قرار گرفت. سپس رسوب به دست آمده در دمای ۱۱۰°C برای مدت زمان ۵h خشک سازی شد. رسوب خشک شده در دمای ۴۵۰°C و زمان ۱h در کوره با درجه حرارت قابل برنامه ریزی پخت داده شد. برنامه رسیدن به دمای ۴۵۰°C به این صورت است: ۱۵۰°C به مدت ۱۰min، ۳۰۰°C به مدت ۱۰min، ۴۵۰°C به مدت ۱h.

شکل ۲-۱۴ الگوی پراش پرتو ایکس TiO₂ تهیه شده را نشان می دهد. الگوی XRD نشان دهنده فاز آناتاز TiO₂ بوده و هیچ قله مشخصی از فاز روتیل و بروکیت مشاهده نشده است، که نشان می دهد ماده تهیه شده از فاز آناتاز خالص است. قله های مشخص شده برای مقادیر ۲θ، ۲۵، ۳۷، ۴۸، ۵۴، ۵۵، ۶۳، ۶۹، ۷۰ و ۷۵ درجه، به ترتیب مطابق با صفحات بلوری (۱۰۱)، (۰۰۴)، (۲۰۰)، (۱۰۵)، (۲۱۱)، (۲۰۴)، (۱۱۶)، (۲۲۰) و (۲۱۵) از فاز آناتاز TiO₂ هستند. تیزی و شدت در ۲۵ درجه برای صفحه بلوری (۱۰۱) نشان می دهد که مواد تهیه شده طبیعت بلوری خوبی دارند. از داده XRD، میانگین اندازه بلوری با استفاده از معادله شرر محاسبه شد که تقریباً ۳۰nm بودند.



شکل ۲-۱۴ طیف XRD TiO₂ تهیه شده.

بررسی‌های مورفولوژی از FESEM و HRTEM در شکل ۲-۱۵ الف و ب نشان دهنده شکل
 کروی میکروکره‌ها و اندازه ذرات در حدود ۱۰۰ تا ۳۰۰nm است. منافذ قابل مشاهده در سطح
 نمونه‌ها وجود دارد. ساختار منافذی که در فضای بین نانو ذرات دیده می‌شود، نشان می‌دهد تخلخل
 بین ذره‌ای به صورت تخلخل متوسط است. میکروکره‌های تخلخل متوسط TiO₂ از طریق تراکم
 نانوذرات TiO₂ تشکیل می‌شوند. تصویر HRTEM از نانوذرات تهیه شده به روش هیدروترمال در
 شکل ۲-۱۸ ج نشان داده شده است.

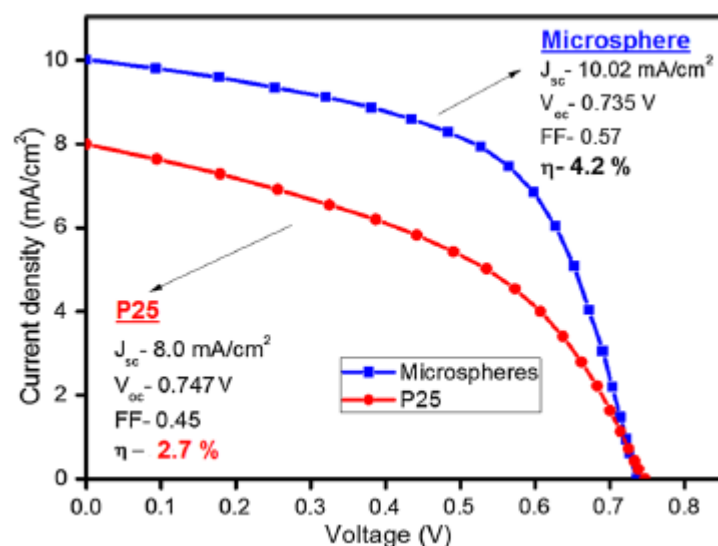


شکل ۲-۱۵ الف وب تصویر FESEM از میکروکره‌های TiO_2 با بزرگنمایی‌های مختلف، ج تصویر

HRTEM از میکروکره‌های TiO_2 ، د الگوی SAED از میکروکره‌های TiO_2 .

این تصویر تایید می‌کند ذرات تقریباً کروی هستند و همچنین نشان می‌دهد که میکروکره‌های

TiO_2 به علت تراکم نانوذرات TiO_2 سطحی درشت دارند. اندازه متوسط نانوذرات حدود ۳۰ nm است.



شکل ۲-۱۶ نمودار ولتاژ-چگالی جریان سلول تهیه شده.

منحنی‌های ولتاژ-جریان نوری توسط منبع سنج دیجیتالی کیتلی تحت تابش $1/5$ AM، 1 mW cm^{-2} مورد اندازه‌گیری قرار گرفت. قبل از اندازه‌گیری I-V، شدت نور با یک سلول خورشیدی بلور سیلیکونی استاندارد کالیبره شد. مساحت فعال سلول خورشیدی حساس به رنگ 0.25 cm^2 بود. شکل ۲-۱۶، اندازه‌گیری I-V از میکروکره‌های تخلخل متوسط TiO_2 و سلول‌های حساس به رنگ مبتنی بر مواد فوتوآند $\text{P}25$ تجاری را نشان می‌دهد. با توجه به منحنی I-V، عامل پر شدن و بازده تبدیل توان (PCE) محاسبه شد.

از جدول ۲-۴ مشخص است که سلول‌های خورشیدی مبتنی بر میکروکره‌های TiO_2 عملکرد بهتری نسبت به سلول‌های خورشیدی مبتنی بر $\text{P}25$ دارند. ولتاژ مدار باز (V_{oc}) سلول‌های خورشیدی در هر دو سلول تقریباً یکسان است، با این حال میکروکره‌های TiO_2 عامل پر شدن را به میزان 12% بیشتر نسبت به مواد فوتوآند مبتنی بر $\text{P}25$ می‌دهند.

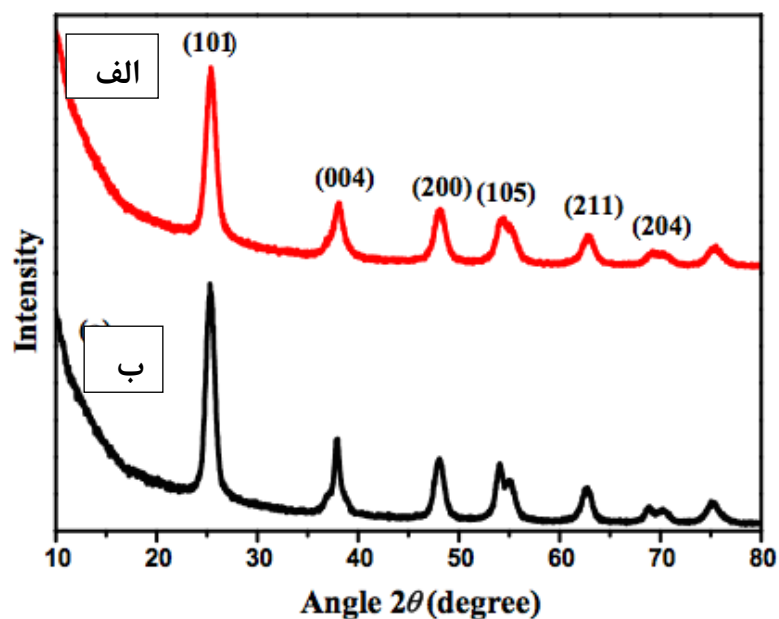
جدول ۲-۴ پارامترهای فوتوولتایی سلول‌های خورشیدی مبتنی بر P^{25} تجاری و میکروکره‌های TiO_2 .

Photoanode	J_{sc} ($mA\ cm^{-2}$)	V_{oc} (V)	FF (%)	Efficiency (η) (%)
P25	8.0	0.747	45	2.7
TiO_2 microsphere	10.02	0.735	57	4.2

میکروکره آناتاز تخلخل متوسط TiO_2 کارایی بالاتری نسبت به P^{25} تجاری به علت مرزدهانه‌ای کمتر لایه فوتوآند پوشش داده شده بر روی زیرلایه FTO دارد. بنابراین محل به دام انداختن الکترون بسیار افزایش یافته و بازده تبدیل توان سلول‌های خورشیدی حساس به رنگ ۴/۲ درصد است که جریان مدار کوتاه (J_{sc})، ولتاژ مدار باز (V_{oc}) و عامل پر کردن (FF) آن به ترتیب برابر با $10.02\ mAcm^{-2}$ ، $0.735\ V$ و ۵۷٪ دارد. علاوه بر این، ریزساختار آماده دارای ویژگی تخلخلی متوسط خوب است؛ این کمک خواهد کرد که بارگذاری رنگ و نفوذ الکتروولت بهتر شود [۲۹].

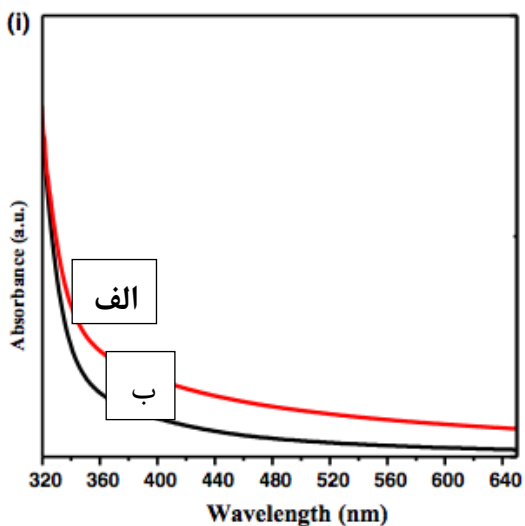
۲-۶ تأثیر آلایش آلومینیوم بر بازده سلول‌های خورشیدی رنگدانه‌ای

در این مقاله نانو ذرات دی اکسید تیتانیوم با آلایش آلومینیوم تهیه شدند و برای ساخت سلول‌های خورشیدی حساس شده با رنگ مورد استفاده قرار گرفتند [۴۰]. مشاهده شد که آلایش آلومینیوم منجر به افزایش بازده سلول خورشیدی شده است. الگوی پراش پرتو ایکس در شکل ۲-۱۷ نشان داده شده است، دارای فاز آناتاز می‌باشد و قله‌های آن در راستاهای $25/3^\circ$ ، $37/8^\circ$ ، $48/1^\circ$ ، $54/3^\circ$ و $62/7^\circ$ در شکل مشخص است [۴۱].



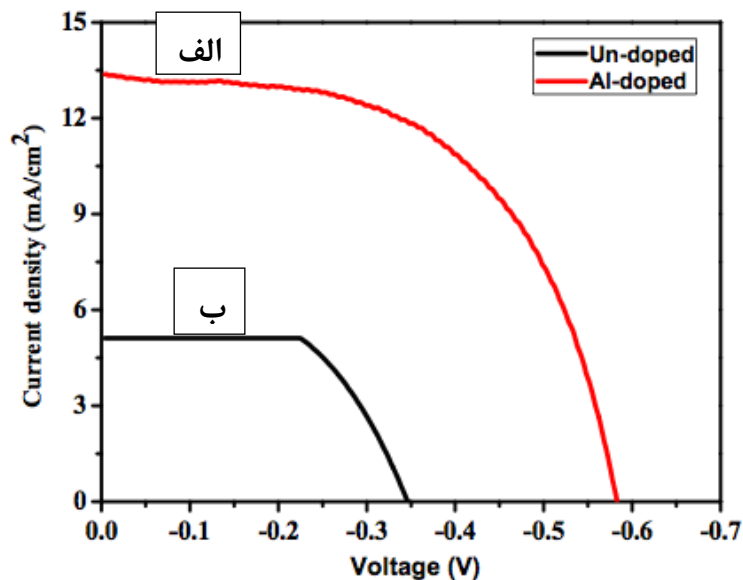
شکل ۲-۱۷ نمودار الگوی پراش X نمونه ها الف) با آلیش ب) بدون آلیش

در شکل ۲-۱۸ نمودار مربوط به جذب با آلیش و بدون آلیش نشان داده شده است. همانطور که مشخص است آستانه‌ی جذب برای بدون آلیش در ناحیه ی UV و برای نمونه با آلیش آستانه ی جذب در ناحیه‌ی مرئی قرار دارد.



شکل ۲-۱۸ نمودار الگوی جذب X نمونه ها الف) با آلیش ب) بدون آلیش

در شکل ۲-۱۹ نمودار منحنی چگالی جریان-ولتاژ برای نمونه‌های با آلایش و بدون آلایش نشان داده شده است. همانطور که مشاهده می‌شود توان بیشینه در منحنی مربوط به آلایش بیشتر است.



شکل ۲-۱۹ نمودار منحنی چگالی جریان-ولتاژ برای نمونه‌های با آلایش (الف) و بدون آلایش (ب)

در جدول ۲-۵ ویژگی‌های مربوط به سلول‌های ساخته شده با آلایش و بدون آلایش آمده است. همانطور که مشاهده می‌شود بازده سلول با آلایش آلومینیوم افزایش یافته است.

جدول ۲-۵ ویژگی‌های مربوط به سلول‌های ساخته شده با آلایش و بدون آلایش

Sample	J_{sc} (mA/ cm ²)	V_{oc} (V)	FF	% η	%IPCE	Dye adsorption amount (mol cm ⁻²)
Un-doped TiO ₂	5.12	-0.346	0.59	1.06	38	5.88×10^{-7}
Al-doped TiO ₂	13.39	-0.581	0.55	4.27	67	9.25×10^{-7}

در این مقاله لایه‌ی نازک با آلایش آلومینیوم و بدون آلایش بر روی نیم‌رسانای FTO نشانده شد و از این لایه بعنوان فوتوآنود در سلول‌های خورشیدی حساس شده به رنگ استفاده گردید. قطعه‌های

ساخته شده با یکدیگر مقایسه گردید. مشاهده شد که سلولهای ساخته شده با آرایش نسبت به نمونه ی بدون آرایش بازده بهتری داشت.

۷-۲ جمع بندی

در این فصل ابتدا در مورد تاریخچه ی ماده دی اکسید تیتانیوم صحبت شد. مرور بر مقالات در اینجا به دو قسمت کلی تقسیم شد. در ابتدا سنتز و ساخت فوتوآند برای کاربرد در سلول خورشیدی با استفاده از دی اکسید تیتانیوم با روش های اسپری و هیدروترمال بیان شد. در قسمت دوم در مورد آرایش آلومینیوم و کاربرد آن به عنوان فوتوآند بحث گردید. با بررسی این مقالات می توان به این نتیجه رسید که افزودن آرایش باعث افزایش بازده سلول های خورشیدی حساس شده به رنگ می شود.

فصل سوم

معرفی ابزارهای اندازه‌گیری و مشخصه‌یابی ساحتاری

و لپتیبی

۳-۱- مقدمه

امکان بررسی ویژگی‌های مواد در پیشرفت روز افزون و هر چه بیشتر علوم و تجهیزات مدرن نقش بسزایی داشته است. امروزه این قابلیت با استفاده از تجهیزات و روش‌های مشخصه‌یابی امکان پذیر شده است. بسیاری از پژوهش‌گران به دنبال یافتن ارتباط بین پارمترهای تجربی و ویژگی بدست آمده از لایه‌های نازک به منظور کاربردی‌تر شدن این ساختارها می‌باشند. در این فصل به معرفی وسایل و ابزارهای مورد استفاده که در سنتز دی‌اکسیدتیتانیوم و مشخصه‌یابی فیزیکی نمونه‌ها پرداخته شده است. این ابزارها شامل میکروسکوپ الکترونی روبشی (SEM)، دستگاه پراش پرتو ایکس (XRD)، طیف نگار (Uv-Vis)، دستگاه اسپری پایرولیزیز، دستگاه.... دستگاه هیدروترمال (آون) می‌باشند.

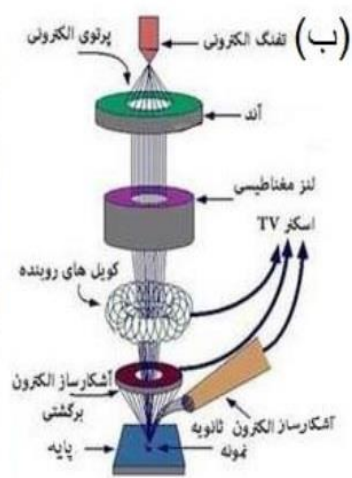
۳-۲- میکروسکوپ الکترون روبشی گسیل میدانی (FESEM)^۱

در میکروسکوپ‌های الکترونی روبشی اثر میدانی از اعمال یک میدان الکتریکی قوی برای تولید پرتو الکترونی مبتنی بر پدیده تونل‌زنی استفاده می‌شود (شکل ۳-۱). اعمال یک میدان الکتریکی قوی بر سطح فلز سبب کاهش ارتفاع سد پتانسیل الکترون شده و احتمال تونل زنی از سطح فلز افزایش می‌یابد. بدین ترتیب شار بزرگی از الکترون‌ها فراهم می‌گردد. در این فرایند مقدار بار گسیل شده به بزرگی میدان الکتریکی اعمال شده بستگی دارد. معمولاً برای بدست آوردن بهره هر چه بیشتر برای تولید جریان التریکی لازم است از فلزی با نوک تیز استفاده کرد و برای جلوگیری از اکسید شدن نوک فلز به خلا بسیار بالا نیاز است.

الکترون‌های ایجاد شده را می‌توان به کمک میدان‌های مغناطیسی (موسوم به لنز مغناطیسی) کانونی کرده و باریکه الکترونی با ماده الکترون‌های ثانویه تولید می‌شوند. علاوه بر الکترون‌های ثانویه الکترون‌های پس‌پراکنده شده (بازگشتی) نیز وجود دارند. پرتو الکترون‌های ثانویه که از نزدیکی سطح گسیل می‌شوند، حاوی اطلاعاتی از توپوگرافی سطح نمونه هستند، درحالی‌که پرتو الکترون‌های پس

^۱ Field Effect Scanning Electron Microscope (FESEM)

پراکنده شده حاوی اطلاعاتی در رابطه با ترکیب شیمیایی ماده می باشند [۴۲]. در آماده‌سازی مواد نارسانا معمولاً سطح نمونه را با لایه‌نازکی از کربن، طلا، یا آلیاژ طلا پوشش می‌دهند. علت این امر آن است که باید بین نمونه و پایه، اتصال الکتریکی برقرار شود. در مورد نمونه‌های پودری باید ابتدا پودر را بر روی یک لایه نازک رسانا پخش و کاملاً خشک نمود. نمونه‌ها باید عاری از مایعاتی با فشار بخار بالا نظیر آب، محلول‌های پاک‌کننده آلی و لایه‌های روغنی باقی‌مانده باشند.



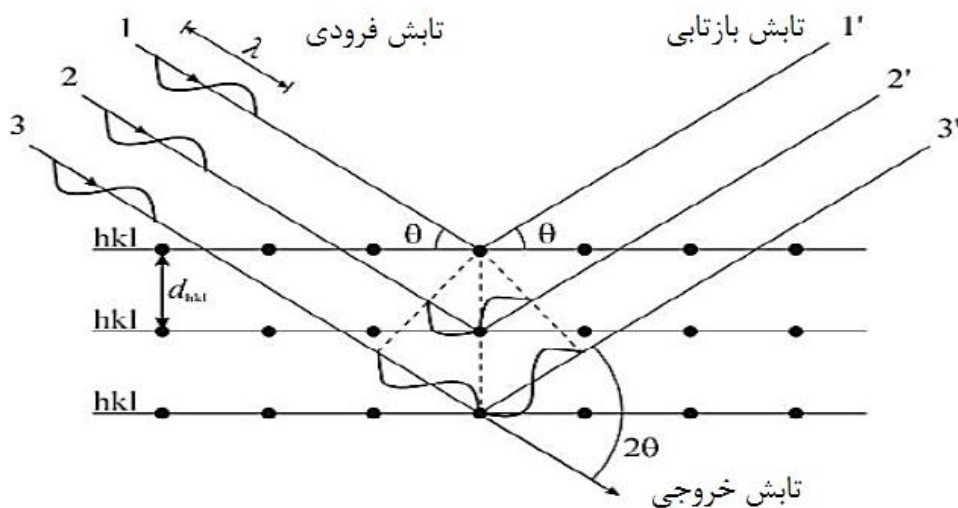
شکل ۳-۱: (الف) نمایی از میکروسکوپ الکترونی روبشی اثر میدانی استفاده شده در پایان نامه. (ب) طرح‌واره-

ای از اجزاء اصلی یک میکروسکوپ الکترونی روبشی

۳-۳- پراش پرتو ایکس

برای مطالعه ساختار مواد بلوری از پراش پرتو ایکس استفاده می‌شود. پراش پرتو ایکس در طیف الکترومغناطیس در محدوده بین پرتو گاما و فرابنفش قرار دارد. با استفاده از این روش می‌توان اطلاعاتی نظیر فازهای تشکیل شده، نوع ساختارهای بلوری، ثابت‌های شبکه بلوری، اندازه بلورک‌ها را به دست آورد. برای یک ماده خالص، الگوی پراش پرتو X ، همانند اثر انگشت برای آن ماده است. با

استفاده از این پایگاه داده موسوم به *JCPDS*^۲ و به کمک روش تطبیق و جستجو می‌توان ترکیب هر ماده را مشخص نمود. ویژگی‌های نوری و الکتریکی لایه‌ها تا حد زیادی تحت تاثیر طبیعت بلوری لایه‌ها قرار دارد. پراش پرتو *X* وسیله‌ی برای مطالعه آرایش اتم‌ها در بلورها است و در سال ۱۹۱۲ توسط فون لاهه کشف و در سال ۱۹۱۳ توسط ویلیام هنری و ویلیام لورنتس براگ برای بررسی بلورها به کار گرفته شد. بررسی کمی این آرایش مستلزم آن است که طول موج پرتوهای *X* معلوم باشد. قانون براگ تعیین کننده‌ی شرایطی است که در آن خروج باریکه‌های پراشیده‌ی پرتو *X* از بلور امکان دارد. این روش براساس ویژگی طول موجی پرتو *X* استوار است. شبکه‌ی بلوری یک مجموعه‌ای از صفحات موازی را تشکیل می‌دهد. هنگامی که موج فرودی به خانواده‌ای از صفحات می‌تابد برای هر یک از این صفحه‌ها بازتابش آینه‌وار در زوایای مشخصی اتفاق می‌افتد. بازتابش پرتو یکس از این صفحات متوالی منجر به تداخل سازنده یا ویرانگر امواج می‌شود. در حالت تداخل سازنده شکل ۳-۲ با استفاده از فرمول براگ، رابطه (۳-۱) می‌توان فاصله صفحات بلوری را بدست آورد. [۴۳].



شکل ۳-۲: یک طرح‌وار از نمونه پراش از صفحات بلوری.

$$2d_{(hkl)} \sin(\theta) = n\lambda \quad (۱-۳)$$

^۲ Joint Committee of Powder Diffraction Society

در این رابطه $d_{(hkl)}$ فاصله‌ی بین صفحات بلوری مشخص شده با اندیس‌های میلر (hkl) ، λ طول موج پرتوهای فرودی، n مرتبه‌ی پراش (عدد صحیح) و θ زاویه‌ی براگ است. اکنون با معلوم شدن d و با استفاده از روابط (۲-۳) و (۳-۳) زیر به ترتیب می‌توان ثابت‌های شبکه ساختارهای شش‌گوشی و مکعبی را بدست آورد [۴۴].

$$\frac{1}{d_{hkl}^2} = \frac{4}{3} \left[\frac{h^2 + kh + k^2}{a^2} \right] + \frac{l^2}{c^2} \quad (۲-۳)$$

$$\frac{1}{d_{hkl}^2} = \left[\frac{h^2 + k^2 + l^2}{a^2} \right] \quad (۳-۳)$$

در فیزیک لایه‌های نازک از الگوی پراش پرتو ایکس برای اندازه‌گیری دقیق پارامترهای وابسته به شبکه استفاده می‌شود، که از این جمله می‌توان به تعیین فازهای بلوری، جهت‌گیری صفحات بلوری، ثابت‌های شبکه‌ای، اندازه بلورک‌ها و همچنین شناسایی فازهای تشکیل شده با استفاده از اطلاعات موجود در بانک‌های اطلاعاتی اشاره کرد. در این دستگاه لایه‌های مورد بررسی در محل معینی قرار گرفته و پرتویی با خط تابش $Cu K\alpha$ (برابر با طول موج 1.54 \AA) به سمت آنها گسیل می‌شود. قابل چرخش بودن نگهدارنده لایه این امکان را فراهم می‌کند تا پرتوی فرودی بتواند سطح نمونه را در بازه‌ی زاویه‌ای ($10-70^\circ = 2\theta$) جاروب کند. اندازه بلورک‌ها (D) برای نمونه را می‌توان از فرمول دبای-شرر^۳ را بدست آورد [۴۵].

$$D = \frac{k\lambda}{\beta \cos \theta} \quad (۴-۳)$$

در این رابطه λ طول موج پرتو ایکس (nm)، β پهنا در نیم بیشینه (درجه)، θ زاویه‌ی پراش براگ (درجه) و k ثابت (تقریباً برابر با ۰.۹) می‌باشد. شکل ۳-۳ دستگاه پراش پرتو ایکس را نشان می‌دهد که در این پایان‌نامه برای اندازه‌گیری‌های XRD استفاده شد.

^۳ Debye-Scherrer



شکل ۳-۳: تصویری از یک دستگاه پراش پرتو X که در این پایان‌نامه برای اندازه‌گیری‌های XRD به کار گرفته شد

از نتایج مربوط به آنالیز ساختاری نمونه‌ها، می‌توان کمیت‌های دیگری مانند کرنش (ε) و چگالی در رفتگی (δ) را محاسبه کرد. کمیت کرنش (ε) با استفاده از اطلاعات مربوط به قله‌های پراش از رابطه‌ی (۵-۳) بدست می‌آید [۴۶].

$$\varepsilon = \frac{\beta \cos \theta}{4} \quad (۵-۳)$$

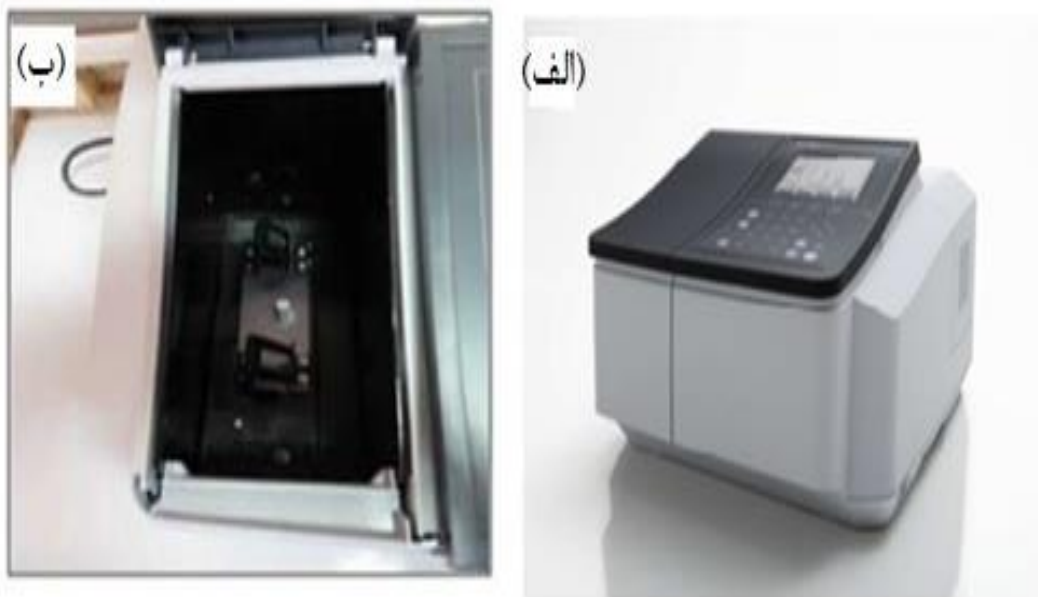
همچنین چگالی در رفتگی ها (δ) ($\text{nm}^{-۲}$) (تعداد در رفتگی ها در واحد حجم بلور) از رابطه‌ی (۶-۳) بدست می‌آید [۴۶].

$$\delta = \frac{1}{D^2} \quad (۶-۳)$$

در این رابطه D اندازه بلورک (nm) است. کاهش اندازه‌ی بلورک‌ها سبب افزایش پهنای قله‌های پراش و کاهش شدت آن شده و بر اثر جهت‌گیری ترجیحی دانه‌ها در ساختار، شدت برخی از قله‌ها افزایش و برخی دیگر کاهش می‌یابد.

۴-۳- طیف جذب اپتیکی

با استفاده از طیف جذب اپتیکی نمونه‌ها و روابط فیزیکی مربوط به آنها می‌توان برخی از پارامترهای وابسته به ویژگی‌های نوری ماده از جمله گاف نواری نمونه را به دست آورد. نمونه دستگاه طیف سنج نوری (UV-VIS) که در این پایان نامه استفاده شده است در شکل (۴-۳) نشان داده شده است.



شکل ۴-۳: الف) طیف نگار UV-VIS به کار رفته در این پایان نامه ب) جایگاه‌های نمونه‌های شاهد و مرجع.

هرگاه انرژی فوتون فرودی ($h\nu$) با گاف نواری برابر یا بیشتر از آن باشد، این انرژی جذب می‌شود و الکترون‌ها از نوار ظرفیت به حالت‌های خالی در نوار رسانش برانگیخته می‌شوند. فرایند جذب در نیمرساناها به نوع گاف نواری ماده (مستقیم یا غیر مستقیم) بستگی دارد. رابطه ضریب جذب (α) با گاف نواری ماده (E_g) طبق فرمول (۱۰-۳) داده می‌شود.

$$(ah\nu)^m = A(h\nu - E_g) \quad (10-3)$$

در این رابطه A مقداری ثابت و m برای نمونه با گاف نواری مستقیم برابر ۲ و برای نمونه با گاف نواری غیر مستقیم برابر ۰/۵ می‌باشد. به کمک این معادله می‌توان با رسم منحنی $(ahv)^m$ بر حسب $h\nu$ و برونمایی قسمت خطی منحنی با محور افقی، مقدار گاف نواری را برای هر نمونه را به دست آورد [۳۵].

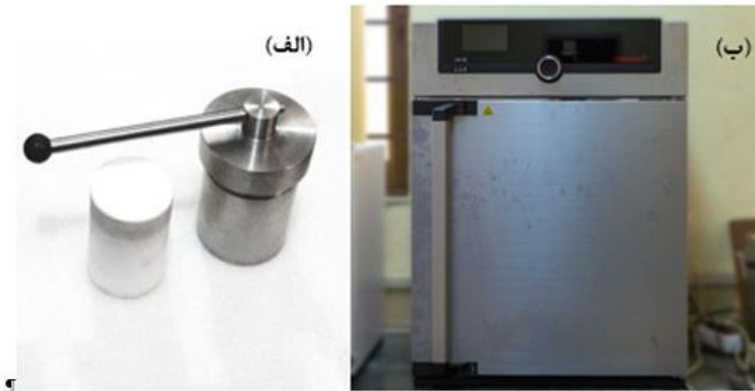
برای به دست آوردن ضریب جذب از قانون بیر-لمبرت (رابطه ۳-۱۱) استفاده شد:

$$a = 2.303 \frac{A}{t} \quad (۳-۱۱)$$

که در این رابطه A جذب اپتیکی، t ضخامت نمونه و a نیز ضریب جذب نوری است [۴۷].

۳-۵ دستگاه هیدروترمال

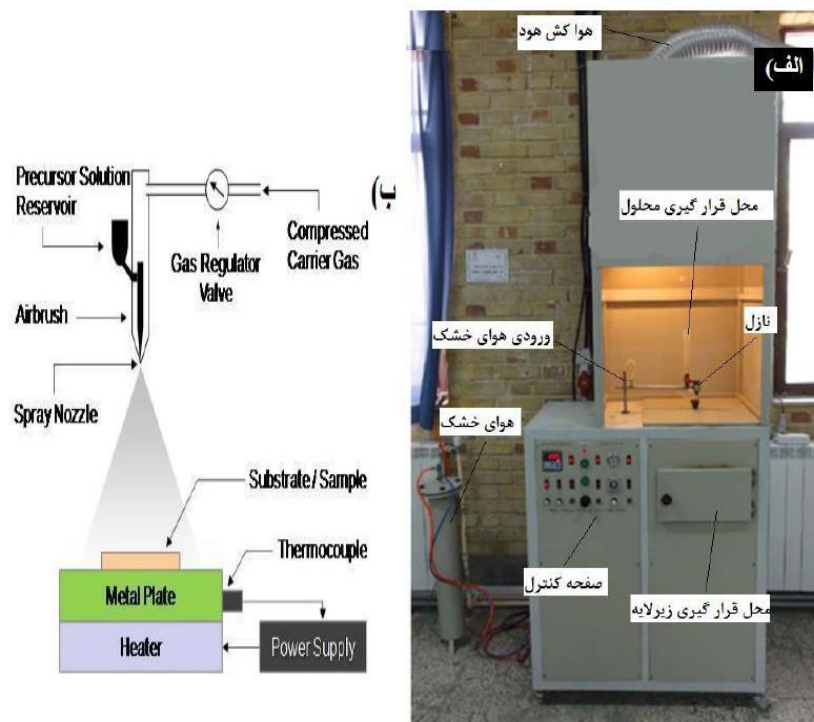
هیدروترمال یکی از پرکاربردترین روش‌های سنتز می‌باشد که به دلیل قیمت مقرون به صرفه و همچنین ساده بودن، این روش بسیار مورد استفاده‌ی پژوهشگران قرار گرفته است. روش هیدروترمال بر اساس رشد بلورها در یک محلول آبی تحت دما و فشار مناسب به وسیله‌ی واکنش‌های شیمیایی صورت می‌گیرد. در این روش ابتدا محلول مورد نظر قبل آماده می‌شود. سپس محلول آماده شده درون اتوکلاو ریخته و به خوبی عایق بندی می‌شود. در شکل ۳-۵ الف اتوکلاو استفاده شده در این پایان نامه نشان داده شده است. سپس اتوکلاو حاوی محلول، حرارت داده می‌شود. در اثر حرارت فشار درون اتوکلاو بالا رفته و شرایط واکنش را فراهم می‌کند. در شکل ۳-۵ ب کوره‌ی آون که در آن اتوکلاو حاوی محلول قرار داده می‌شود نشان داده شده است.



۳-۵ الف) اتوکلاو مورد استفاده در این پایان نامه ب) کوره‌ی آون

۳-۶ دستگاه اسپری پایرولیزیز

دستگاه لایه‌نشانی اسپری پایرولیزیز تکنولوژی ساده‌تری نسبت به دیگر روش‌ها می‌باشد، به ویژه نسبت به روش‌های فیزیکی که اغلب نیازمند خلأ نیز هستند. در این روش امکان لایه‌نشانی در سطوح بزرگ وجود دارد. این روش به طور گسترده در کارهای تحقیقاتی و صنعتی استفاده می‌شود که در شکل ۳-۶ نشان داده شده است.



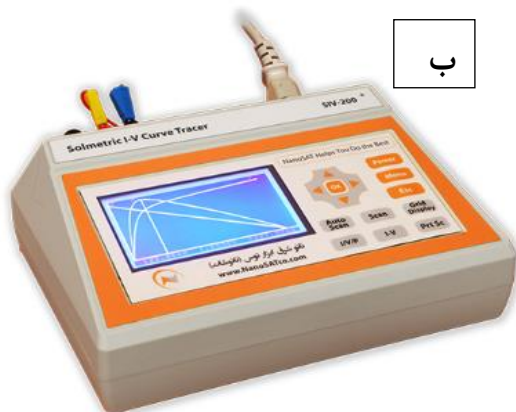
شکل ۳-۶: الف) دستگاه اسپری پایرولیزیز استفاده شده در این تحقیق ب) طرح واره‌ای از دستگاه اسپری شامل قسمت‌های مهم

دستگاه

همانطور که در شکل ۳-۶ ب نشان داده شده است محفظه‌ی اسپری شامل افشانه، صفحه گرماده زیر لایه، صفحه‌ی کنترل کننده‌ی فشار هوا و دما می‌باشد. از جمله پارامترهای قابل کنترل در این دستگاه عبارتند از: دمای زیر لایه، آهنگ افشاندن محلول بر روی زیر لایه، فشار گاز حامل و فاصله نازل تا زیر لایه. محلول اسپری توسط کمپرسور هوای خشک موجود در این سیستم و با آهنگی که مورد نظر است از استوانه مدرج حاوی محلول واقع در قسمت بالایی نازل خارج و به صورت پودر بر روی سطح زیر لایه اسپری می‌شود. دمای زیر لایه نیز از طریق تغییر میزان جریان الکتریکی عبوری از المنت‌ها تنظیم می‌شود. به دلیل بالا بودن دمای زیر لایه عمل تجزیه حرارتی پس از اسپری محلول بر اثر دما رخ داده و لایه مورد نظر رسوب می‌کند. برای کم کردن احتمال آلودگی لایه‌ها قبل از هر بار اسپری کردن باید نازل و صفحه‌ای که زیر لایه‌ها در آن قرار می‌گیرند را به خوبی تمیز کرد.

۳-۷ شبیه ساز نور خورشید

برای تعیین نحوه‌ی عملکرد سلول‌های خورشیدی رنگدانه‌ای ساخته شده در این پایان نامه و همچنین تعیین پارامترهای فوتو ولتایی مربوط به آن، از شبیه ساز نور خورشید شرکت نانو شات و دستگاه مشخصه یاب پارامترهای سلول‌های خورشیدی شرکت نانو شات استفاده شد. در شکل ۳-۷ شبیه ساز نور خورشید و دستگاه مشخصه یاب نشان داده شده است. سیستم شبیه ساز خورشیدی بر اساس استفاده از منابع نوری LED ها در کنار لامپ زنون و با هدف ایجاد طیف‌های تابشی مشابه طیف‌های متنوع خورشید طراحی و ساخته شده است تا بر این پایه امکان مطالعات فتو ولتاییکی در محیط آزمایشگاهی را به آسانی و با دقت بالا فراهم آورد.



ب



الف

شکل ۳-۷ الف) شبیه ساز خورشید شرکت نانو شات ب) مشخصه یاب پارامترهای سلول خورشید شدت نانو شات

۳-۸ جمع بندی

در این فصل دستگاه‌های رشد و مشخصه یابی استفاده شده در این پایان نامه از قبیل XRD، FESEM، شبیه ساز خورشیدی، مشخصه یاب پارامترهای خورشیدی، اسپری پایرولیزیز معرفی شدند. همچنین به روش‌های رشد با روش اسپری و هیدروترمال اشاره شد.

فصل چهارم: نتایج تجربی سنتز نانو ساختارها و نانو

پودرهای دی اکسید تیتانیوم و ساخت سلول های

خورشیدی و بحث

۴-۱ مقدمه

در این فصل به گزارش فعالیت‌های انجام شده در این پایان نامه و بررسی مشخصات نوری، ساختاری و ریخت‌شناسی سطح لایه‌های نازک دی‌اکسیدتیتانیوم با آلایش و بدون آلایش با تأکید بر نقش آن به عنوان فوتوآند در سلول‌های خورشیدی، پرداخته می‌شود. لایه‌های نازک دی‌اکسید-تیتانیوم به روش اسپری پایرولیز تهیه و ویژگی‌های آن بررسی شدند. همچنین با استفاده از روش هیدروترمال نیز پودر دی‌اکسیدتیتانیوم با آلایش و بدون آلایش سنتز شد و در ادامه با تهیهی خمیر از پودر به دست آمده فوتوآند ساخته شد. با استفاده از فوتوآندهای سنتز شده، سلول خورشیدی حساس شده به رنگ ساخته و ویژگی‌های آن بررسی شد.

۴-۲ تهیهی لایه‌ی رسانای شفاف FTO به روش افشانه پایرولیز

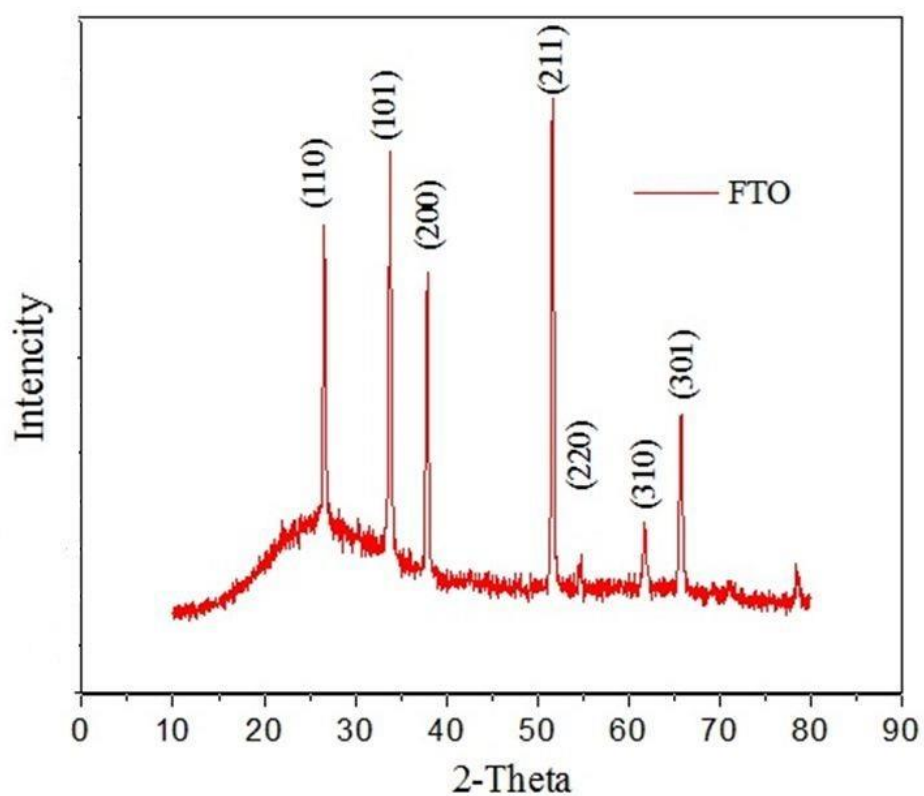
لایه‌های نازک (اکسید قلع با آرایش فلوتور) (FTO) به عنوان الکتروود در سلول خورشیدی، علاوه بر رسانایی الکتریکی خوب باید از شفافیت بالایی نیز برخوردار باشند. در این پایان‌نامه از روش اسپری پایرولیز برای ساخت FTO استفاده شد. برای آماده‌سازی محلول اولیه، $1/0\ 134\ \text{mL}$ محلول SnCl_4 (خلوص ۹۹/۷٪ درصد از شرکت مرک) در $200\ \text{mL}$ اتانول ریخته و روی همزن مغناطیسی قرار داده شد تا به طور همگن مخلوط شده و محلول شفاف حاصل شود سپس $0/113\ \text{gr}$ پودر NH_4F (با خلوص ۹۸٪ شرکت مرک) به آن اضافه گردید. پس از حل شدن کامل NH_4F در محلول مقدار $1\ \text{mL}$ آب مقطر دو بار یونیزه شده به آن اضافه گردید. در پایان برای شفاف شدن کامل محلول $1\ \text{mL}$ اسید هیدروکلریک (HCL با خلوص ۳۷٪ شرکت مرک) به آن اضافه گردید.

زیرلایه‌های شیشه‌ای قبل از عمل اسپری به روش زیر کاملاً شستشو داده شدند. ابتدا زیرلایه‌ها با آب و صابون شستشو داده شد. در ادامه درون محلول اتانول و آب یونیزه شده قرار داده و اجازه داده شد تا بجوشد. و در انتها نیز درون التراسونیک قرار داده و سپس با باد تمیز خشک گردید. برای لایه نشانی FTO به روش اسپری پیرولیزیز دستگاه اسپری پیرولیزیز نیز به دقت تمیز شد و در نهایت عمل افشاندن محلول بر روی زیرلایه‌های شیشه انجام گرفت. در این فرآیند آهنگ افشاندن ۵ mL/min، دمای زیرلایه ۵۰۰°C، فشار گاز حامل ۲/۵ bar و فاصله‌ی بین نازل و زیرلایه بر روی ۳۵ Cm تنظیم گردید.

خواص لایه‌های حاصل شامل، الگوی پراش پرتو ایکس و مشخصات نوری نوری از جمله تغییرات طیف عبوری و جذبی نمونه‌ها مورد مطالعه قرار گرفت.

۴-۲-۱ مطالعه‌ی ویژگی ساختاری

برای مطالعه ساختاری لایه‌های نازک FTO بر روی زیرلایه شیشه الگوی پراش پرتو ایکس (XRD) آنها ثبت گردید شکل (۴-۱).



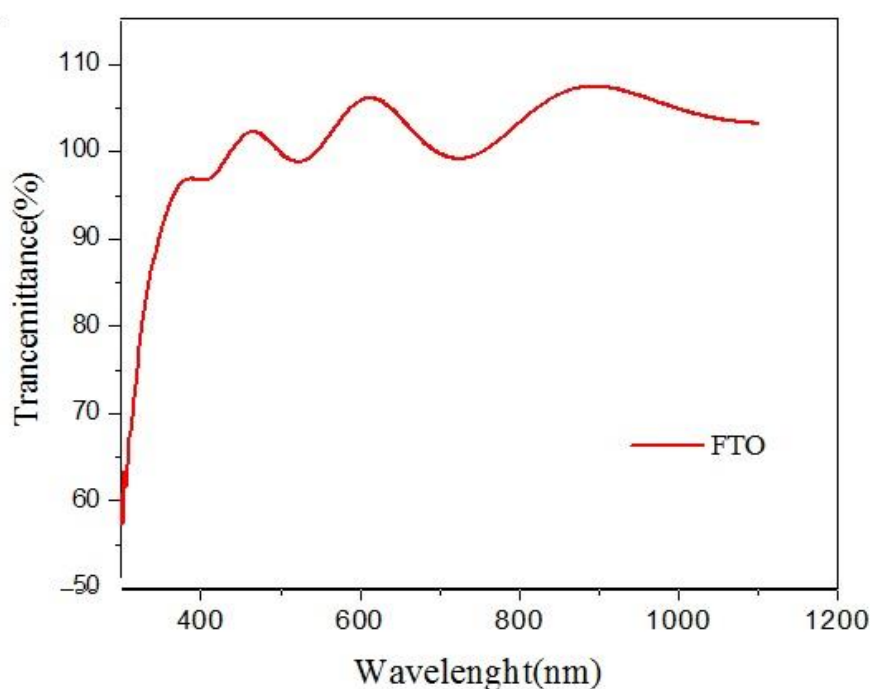
شکل ۴-۱: الگوی XRD لایه نازک FTO سنتز شده بر روی زیر لایه شیشه در دمای ۵۰۰°C.

قله‌های مشاهده شده در راستاهای (۱۱۰)، (۱۰۱)، (۲۰۰)، (۲۱۱)، (۲۲۰)، (۳۱۰)، (۳۰۱) طیف‌های

پراش اشعه ایکس نمونه نشان دهنده تشکیل ساختار بس بلوری چهارگوش می‌باشد.

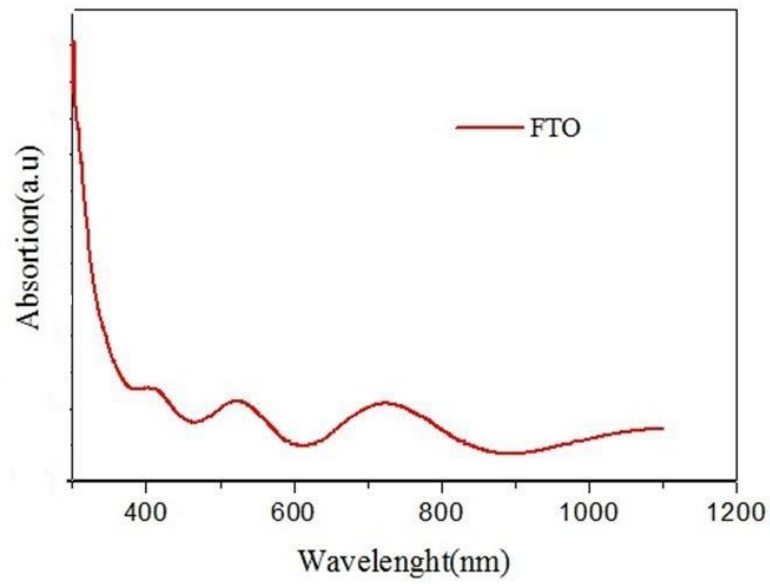
۲-۲-۴ مطالعه‌ی ویژگی نوری

در شکل (۲-۴) طیف عبور نور از لایه FTO تهیه شده با روش اسپری پایرولیزیز نشان داده شده است. مشاهده می‌شود که FTO در طول موج‌های بالاتر از ۳۰۰ nm، UV را از خود عبور می‌دهند و هر چه طول موج به مرز ناحیه مرئی نزدیک‌تر می‌شود، میزان عبور بیش‌تر می‌شود و در ناحیه مرئی بیش از ۸۰٪ طول موج‌های مرئی را از خود عبور می‌دهند.



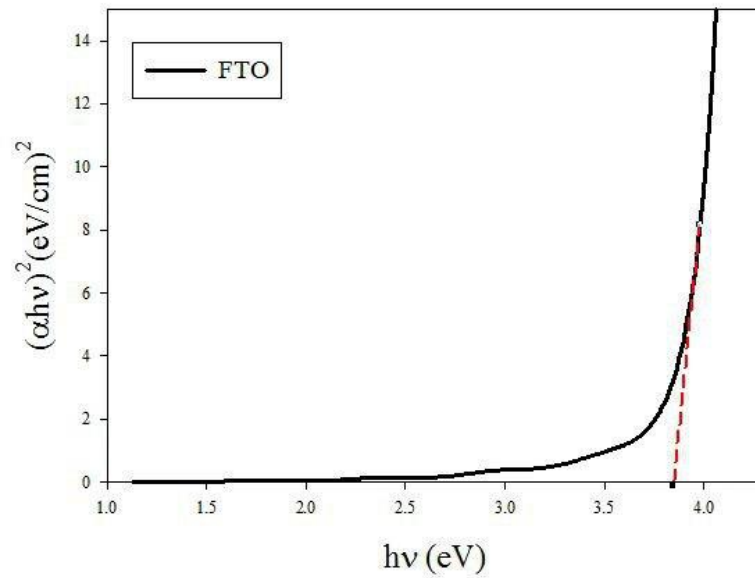
شکل ۲-۴: طیف عبور نور برای لایه نازک FTO سنتز شده به روش اسپری پایرولیزیز بر روی زیرلایه شیشه

به منظور بررسی خواص اپتیکی لایه نازک FTO بر روی زیرلایه شیشه، طیف جذب آن به کمک طیف سنج نوری در بازه طول موجی ۳۰۰-۱۱۰۰ nm اندازه‌گیری شد. در شکل (۳-۴) میزان جذب نور توسط لایه FTO که با استفاده از دستگاه UV-Vis اندازه‌گیری شد نشان داده شده است. همانطور که از شکل ۳-۴ مشخص است با افزایش طول موج میزان جذب اپتیکی کاهش می‌یابد. روند روبه کاهش جذب اپتیکی نکته‌ای حائز اهمیت در بخش سلول‌های خورشیدی رنگدانه‌ای است.



شکل ۴-۳: طیف جذب نور برای لایه نازک FTO سنتز شده به روش اسپری پایرولیز بر روی زیرلایه شیشه

در شکل ۴-۴ نمودار انرژی گاف نشان داده شده است. گاف نواری نمونه‌ی ساخته شده برابر ۳/۸۵ است که در تطابق با کارهای گزارش شده است.



شکل ۴-۴: گاف نواری برای لایه نازک FTO سنتز شده به روش اسپری پایرولیز بر روی زیرلایه شیشه

۳-۴ سنتز لایه نازک دی اکسید تیتانیوم بر روی زیر لایه FTO به روش اسپری

پایرولیز

۴-۳-۱ آماده سازی FTO

لایه‌ی فوتوآند در سلول‌های خورشیدی حساس شده به رنگ شامل یک لایه‌ی دی‌اکسید تیتانیوم است. دی‌اکسید تیتانیوم یکی از ارکان مهم سلول‌های خورشیدی حساس شده به رنگ است. بنابراین قبل از فرآیند لایه نشانی دی‌اکسید تیتانیوم، فرآیند تمیز کردن FTO برای برطرف نمودن گردوغبار سطحی ضروری است. ابتدا سمتی از شیشه که پوشش رسانا دارد مشخص گردید، در ادامه به اندازه‌ی ابعاد سلول شیشه برش داده شد. شستشوی شیشه‌ی رسانا به ترتیب زیر انجام شد:

۱. شستشو با آب و صابون در حمام التراسونیک به مدت ۲ دقیقه

۲. شستشو با آب مقطر دو بار یونیزه شده

۳. شستشو با اتانول و اسید هیدروکلریدریک در حمام التراسونیک به مدت ۲ دقیقه

۴. شستشو با آب مقطر دو بار یونیزه شده

۵. شستشو با استون در حمام التراسونیک به مدت ۲ دقیقه

۶. شستشو با آب مقطر دو بار یونیزه شده

۷. شستشو با اتانول در حمام التراسونیک به مدت ۲ دقیقه

۴-۳-۲ لایه نشانی دی اکسید تیتانیوم

در حال حاضر از روش های گوناگونی برای سنتز نانو ذرات دی اکسید تیتانیوم استفاده می شود. در هر روش سنتز، تغییر پارامترهای رشد ممکن است منجر به تولید لایه های نازک با ریخت شناسی و ساختارهای متفاوت شود. در این پژوهش اثر غلظت محلول بر روی ویژگی های لایه نازک دی اکسید تیتانیوم تهیه شده بررسی شد. در جدول ۴-۱ نامگذاری نمونه های تهیه شده و پارامترهای مورد بررسی با روش اسپری پیرولیزیز نشان داده شده است.

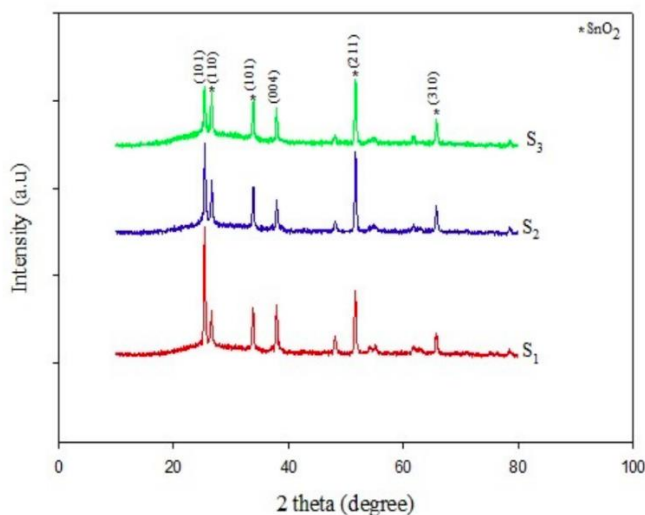
جدول ۴-۱: پارامترهای بررسی شده با روش اسپری و نام نمونه ها

نام نمونه	S _۱	S _۲	S _۳
غلظت محلول اولیه	۴ مولار	۸ مولار	۱۲ مولار

برای تهیه لایه های نازک دی اکسید تیتانیوم جهت استفاده به عنوان فوتوآند در سلول های خورشیدی حساس شده به رنگ، از تیتانیوم ایزوپروپوکساید (TTIP) (C_{۱۲}H_{۲۸}O_۴Ti) و محلول ایزوپروپانول (C_۳H_۸O) مرکب، خلوص ۹۹/۹٪) استفاده شد. ابتدا ۲۰۰ mL از محلول ایزوپروپانول روی همزن مغناطیسی قرار داده شد و به مدت ۵ دقیقه در دمای ۵۰° C حرارت دهی گردید. سپس ۰/۲ mL از محلول تیتانیوم ایزوپروپوکساید به آن اضافه گردید و به مدت ۱۵ دقیقه در همان دما قرار داده شد. محلول نهایی، محلولی شفاف است که برای عمل اسپری آماده می باشد. در نهایت عمل افشاندن بر روی زیر لایه FTO انجام گرفت در این فرآیند آهنگ افشاندن ۳ mL/min و به صورت پالسی (۵ ثانیه اسپری-۳۰ ثانیه وقفه)، دمای زیر لایه ۱۵۰° C، فشار گاز حامل ۱/۵ bar و فاصله ی بین نازل و زیر لایه ۱۵ cm تنظیم گردید.

۴-۳-۲-۱ مطالعه‌ی ویژگی‌های ساختاری

الگوی پراش پرتو ایکس (XRD) لایه‌های نازک TiO_2 بر روی FTO در غلظت‌های مختلف محلول اولیه در شکل (۴-۵) نشان داده شده است. قله‌های دی‌اکسید تیتانیوم و اکسید قلع (FTO) در این الگو مشخص گردیده است. قله‌ها حاکی از رشد دی‌اکسید تیتانیوم در فاز آاناتاز است. با اطلاع از زاویه پراش براگ در این الگوها و رابطه‌ی براگ می‌توان مقادیر مربوط ثابت‌های شبکه‌ای این نمونه‌ها را با استفاده از رابطه‌ی دبی-شرر محاسبه کرد. مشاهده می‌شود با استفاده از داده‌های پراش پرتو ایکس چگالی دررفتگی، اندازه‌ی بلورک‌ها و کرنش برای نمونه‌های S_1 ، S_2 ، S_3 محاسبه شدند. نتایج حاصل از محاسبه در جدول (۴-۲) آمده است. نتایج حاصل از پراش اشعه ایکس نشان می‌دهد که با افزایش غلظت شاهد افزایش اندازه بلورک، افزایش کرنش و همچنین کاهش چگالی در رفتگی در نمونه‌ها بودیم و پارامترهای شبکه نمونه‌ها تغییر چندانی نداشتند.



شکل ۴-۵ الگوی XRD لایه‌های نازک TiO_2 بر روی زیر لایه FTO سنتز شده با غلظت‌های مختلف محلول اولیه

۴، ۸، ۱۲ مولار به ترتیب مربوط به نمونه‌های S_1 ، S_2 ، S_3 .

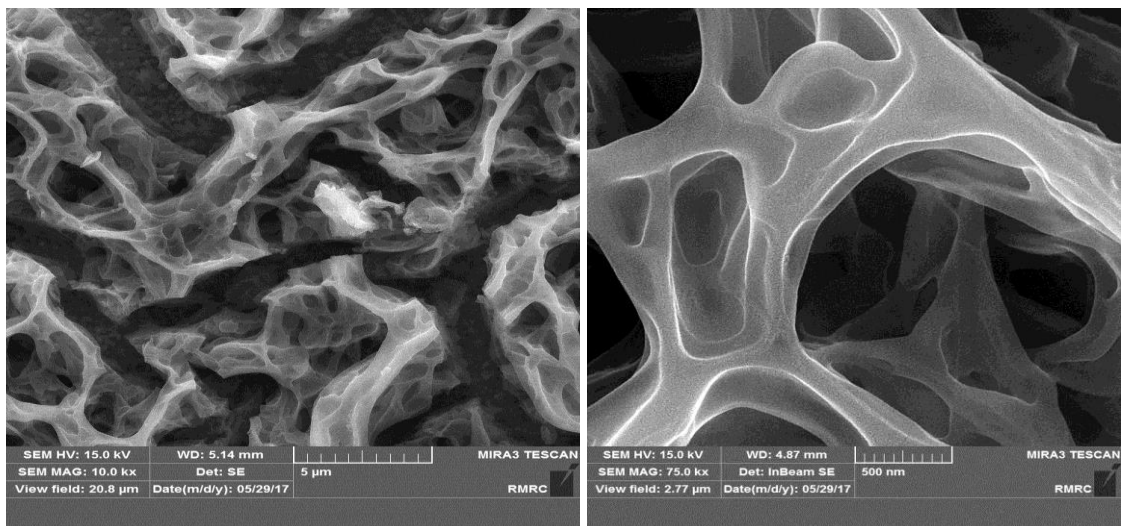
جدول ۴-۲: نتایج حاصل از XRD لایه‌های نازک TiO_2 بر روی زیر لایه FTO سنتز شده با غلظت‌های مختلف محلول اولیه

۴، ۸، ۱۲ مولار به ترتیب مربوط به نمونه‌های S_1 ، S_2 ، S_3 .

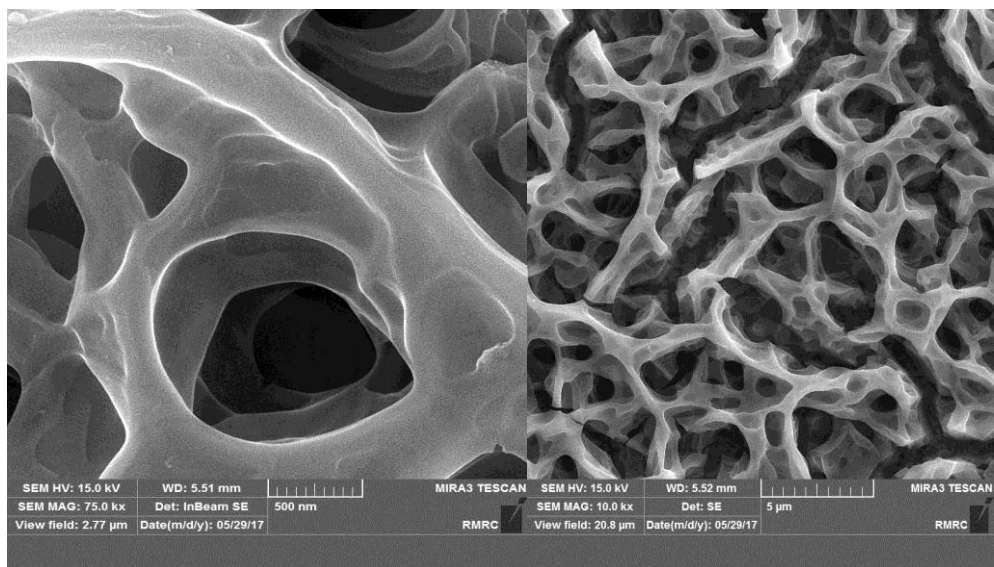
نمونه	S_1	S_2	S_3
اندازه بلورک (nm)	۲۴/۵۳	۲۵/۰۹	۲۶/۸۰
کرنش $\times 10^{-3}$	۴/۲۸	۴/۳۰	۴/۳۹
چگالی دررفتگی 10^{-3} $(\text{nm}^{-2}) \times$	۱/۸۳	۱/۷۲	۱/۶۴
ثابت شبکه $A^\circ(a)$	۳/۷۸	۳/۷۸	۳/۷۸
ثابت شبکه $A^\circ(c)$	۹/۵۱	۹/۵۱	۹/۵۱

۴-۳-۲-۲ مطالعه ریخت‌شناسی سطح

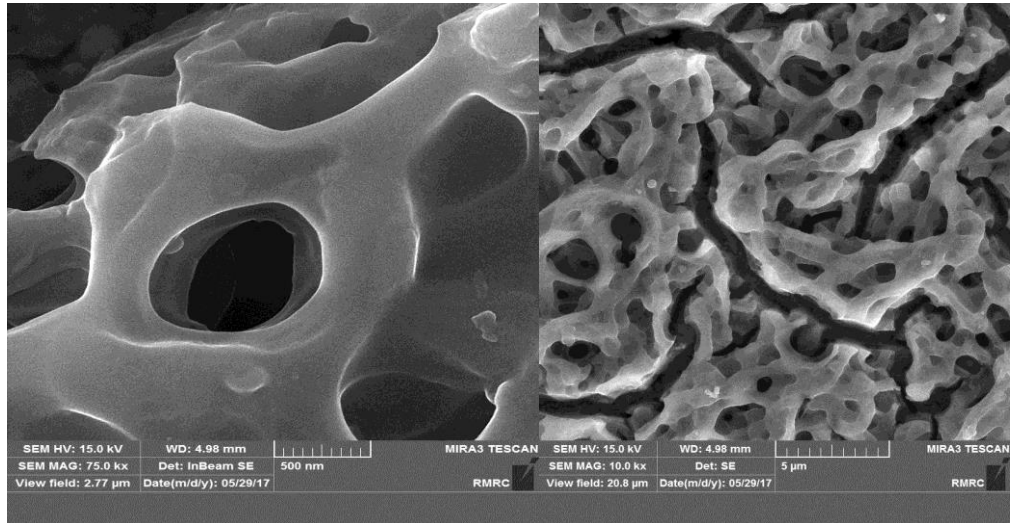
برای مطالعه و بررسی ریخت‌شناسی لایه‌ها از تصاویر میکروسکوپ الکترون روبشی گسیل میدانی (FESEM) استفاده شد. در شکل (۴-۶، ۴-۷، ۴-۸) لایه‌ی تهیه شده با غلظت‌های مختلف ۴M، ۸M، ۱۲M به ترتیب به نام‌های S_1 ، S_2 ، S_3 در مقیاس‌های $5\mu\text{m}$ ، 500nm نشان داده شده است. مورفولوژی فوت‌آند تهیه شده در تمام غلظت‌های مختلف به صورت یک ساختاری اسفنجی با حفره‌هایی در مقیاس میکرون و دیواره‌هایی در مقیاس نانو است. همانطور که در شکل مشخص است با افزایش غلظت محلول اولیه، خلل و فرج کاهش یافته است. تخلخل بیشتر در نمونه S_1 باعث بهبود عملکرد سلول‌های خورشیدی حساس شده به رنگ می‌شود.



شکل ۴-۶ تصویر FESEM برای نمونه S_۱ در مقیاس های ۵ μm، ۵۰۰ nm

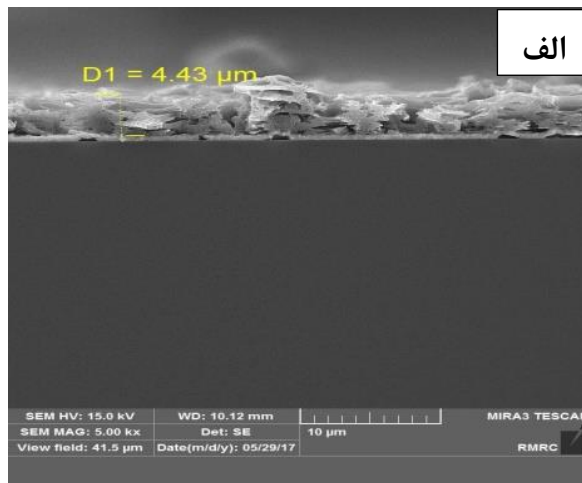


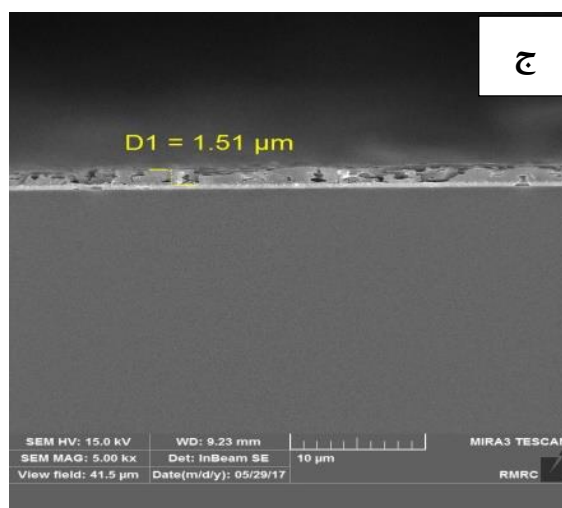
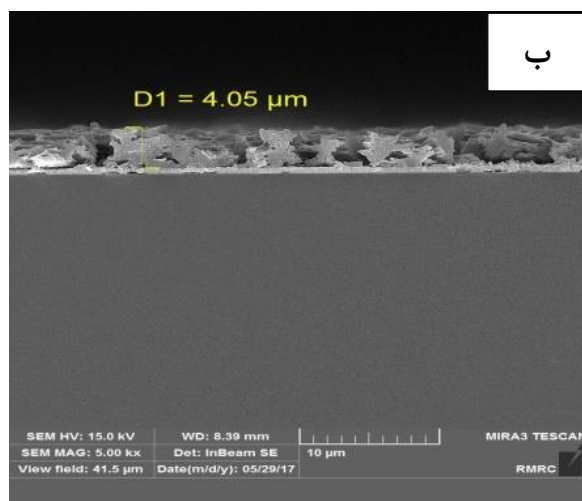
شکل ۴-۷ تصویر FESEM برای نمونه S_۲ در مقیاس های ۵ μm، ۵۰۰ nm



شکل ۴-۸ تصویر FESEM برای نمونه S_3 در مقیاس های $5 \mu m$ ، 500 nm

همانطور که در شکل (۴-۹ الف، ب، ج) نشان داده شده است. ضخامت لایه‌ها با افزایش غلظت محلول اولیه کاهش پیدا کرده است. ضخامت نمونه‌های S_1 ، S_2 ، S_3 در جدول (۴-۳) آمده است.



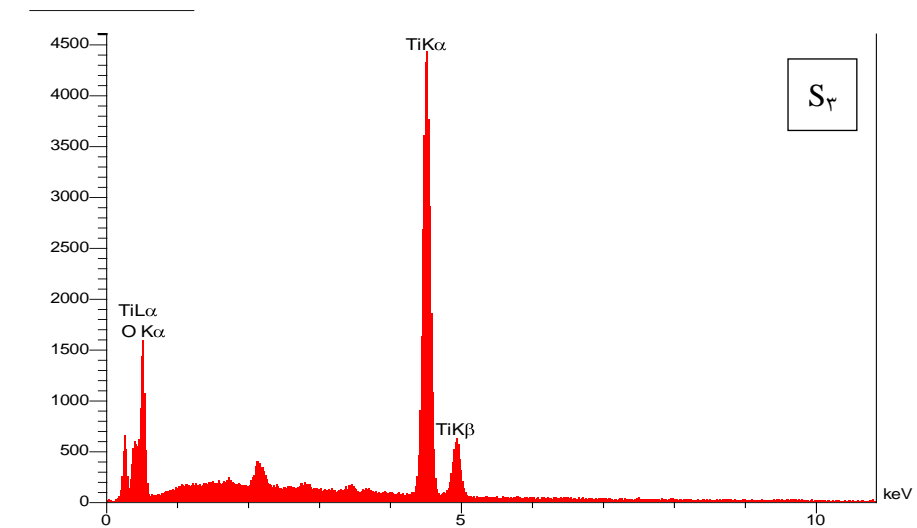
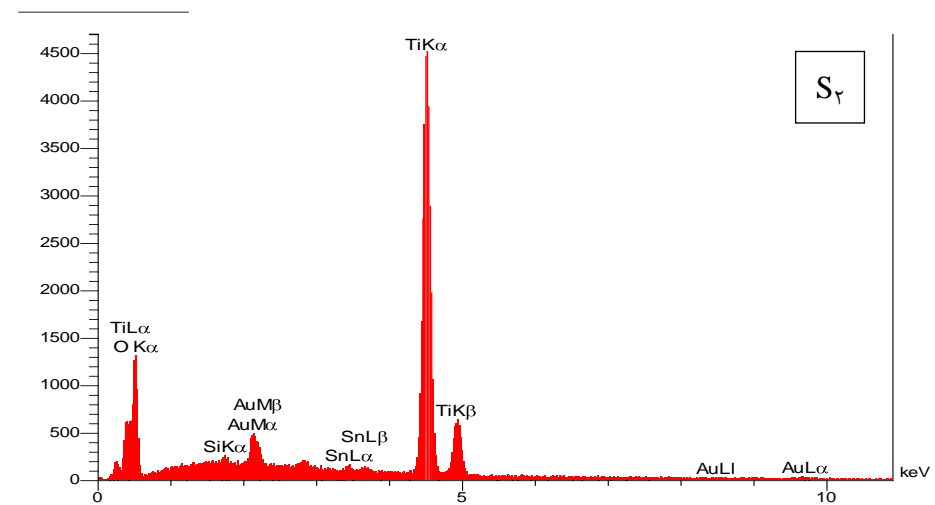
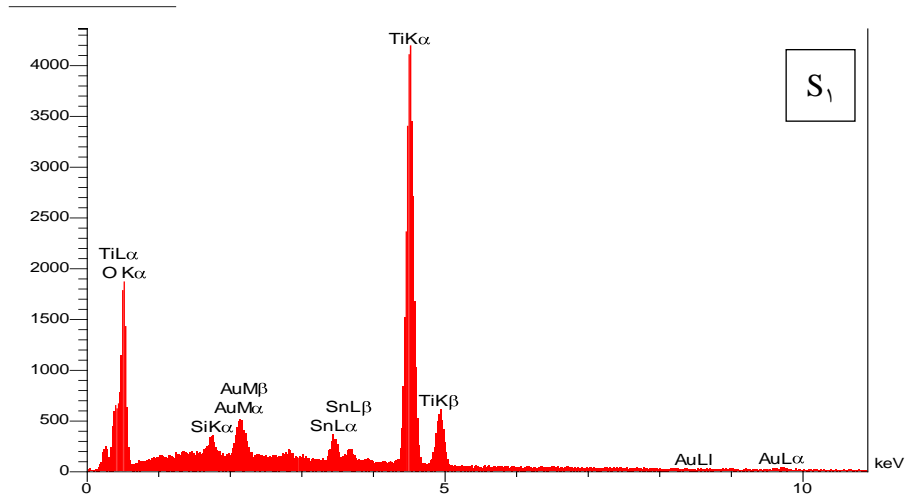


شکل ۴-۹ الف ضخامت برای نمونه S_1 ب ضخامت برای نمونه S_2 ج ضخامت برای نمونه S_3

جدول ۴-۳ ضخامت نمونه‌های سنتز شده

نمونه	S_1	S_2	S_3
ضخامت (μm)	۴/۴۳	۴/۰۵	۱/۵۱

در شکل ۴-۱۰ EDAX مربوط به نمونه های ساخته شده با افزودن ناخالصی و بدون ناخالصی نشان داده شده است. در جدول ۴-۴ درصد مواد تشکیل دهنده آمده است.



شکل ۴-۱۰ EDAX لایه‌های نازک TiO₂ بر روی زیر لایه FTO سنتز شده با غلظت‌های مختلف محلول اولیه ۴، ۸، ۱۲ مولار به

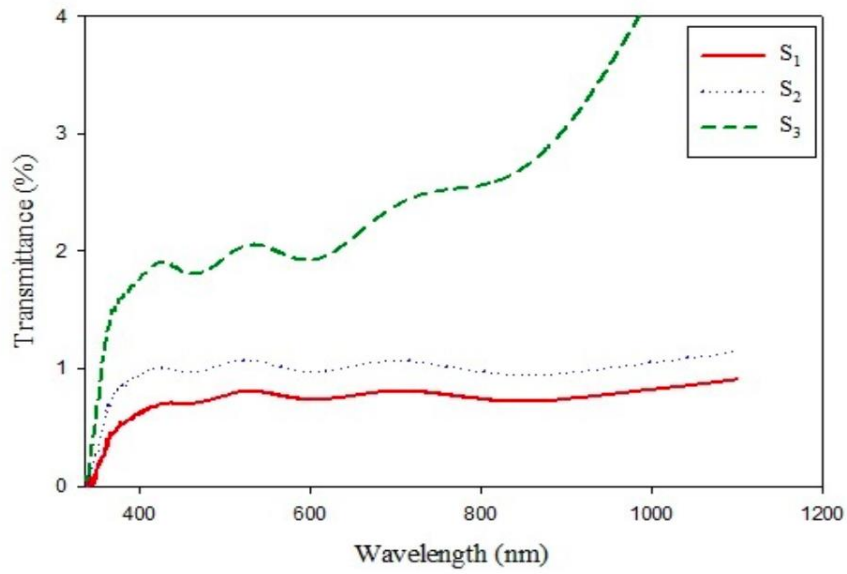
ترتیب مربوط به نمونه‌های S₁, S₂, S₃.

جدول ۴-۴: درصد اتمی عناصر در نمونه‌های S_۱، S_۲ و S_۳

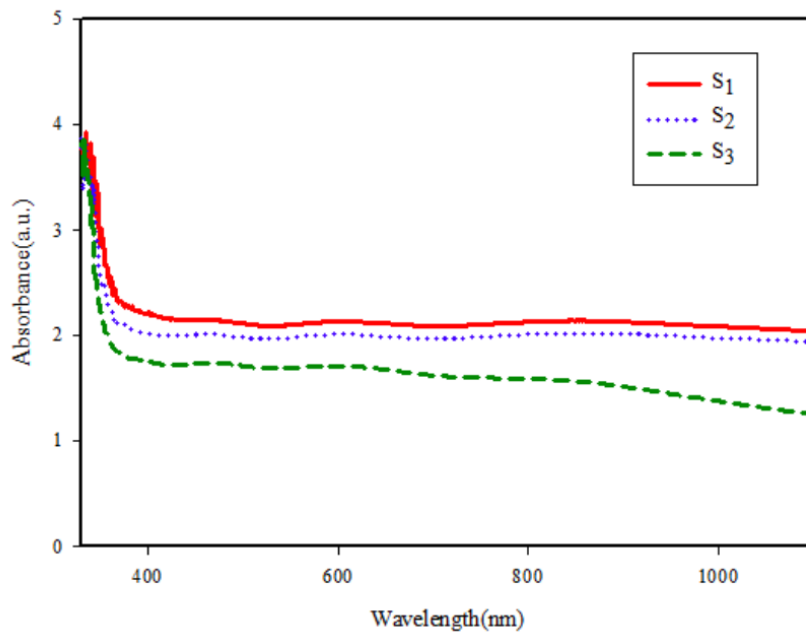
نام نمونه	S _۱	S _۲	S _۳
O	۷۶/۶۰	۷۰/۹۰	۷۷
Ti	۲۰/۴۴	۲۶/۴۹	۲۳
Si	۰/۸۹	۰/۶۸	–
Sn	۱/۰۵	۰/۴۲	–
Au	۱/۰۲	۱/۵۲	–

۴-۳-۲-۳ خواص اپتیکی لایه‌ها

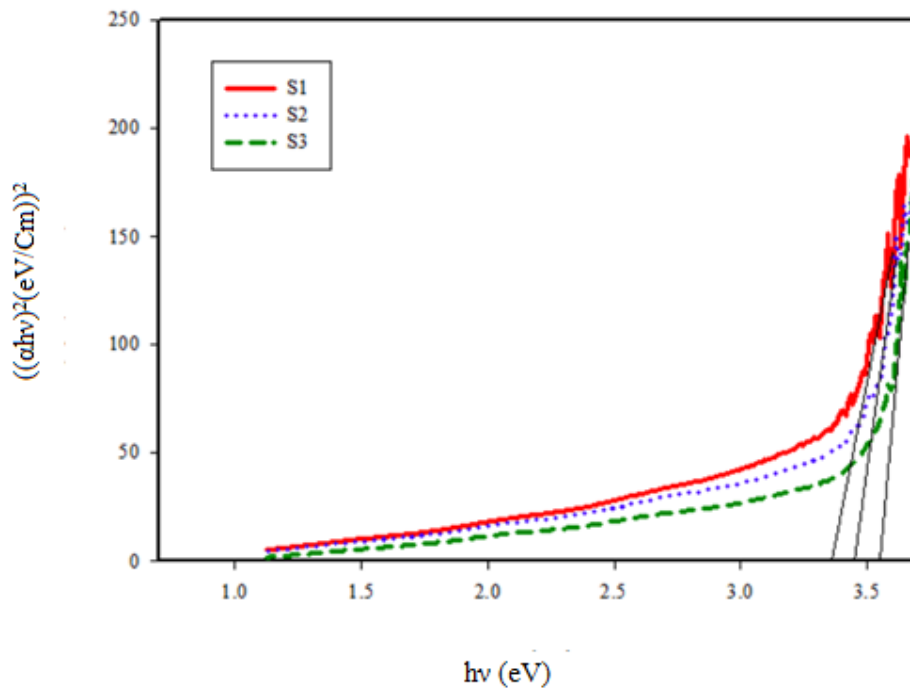
به منظور بررسی خواص اپتیکی نمونه‌ها، طیف عبور نمونه‌ها به کمک طیف سنج نوری در بازه طول موجی $300-1100\text{ nm}$ اندازه‌گیری شدند. همانطور که در شکل ۴-۱۱ مشاهده می‌شود رفتار طیف عبور نمونه‌ها نشان دهنده‌ی این است که میزان عبور نور برای نمونه‌ها افزایش پیدا کرده است. طیف‌های جذب آنها نیز به کمک طیف سنج نوری در بازه طول موجی $300-1100\text{ nm}$ اندازه‌گیری شدند. رفتار جذب نمونه‌ها نشان می‌دهد که با افزایش غلظت شاهد کاهش میزان جذب در نمونه‌ها شدیم که در شکل ۴-۱۲ نشان داده شده است. گاف اپتیکی نمونه‌ها با افزایش میزان غلظت افزایش، تغییرات محسوسی در گاف اپتیکی نمونه‌ها رخ داده است. که در شکل ۴-۱۳ نشان داده شده است که این به دلیل این است که در گاف اپتیکی بالا میزان جذب کمتر است.



شکل ۴-۱ طیف عبور نمونه‌های TiO_2 تهیه شده به روش اسپری پایرولیزیز بر روی زیر لایه FTO در غلظت‌های ۴M، ۸M، ۱۲M (به ترتیب S₁، S₂، S₃)



شکل ۴-۲ طیف جذب نمونه‌های TiO_2 تهیه شده به روش اسپری پایرولیزیز بر روی زیر لایه FTO در غلظت‌های ۴M، ۸M، ۱۲M به ترتیب S₁، S₂، S₃



شکل ۴-۱۳ نمودارهای تغییرات (αhv) بر حسب انرژی فوتون فرودی (hv) برای نمونه‌های TiO_2 تهیه شده به روش اسپری پایرولیز بر روی زیر لایه FTO در غلظت‌های ۴M، ۸M، ۱۲M (به ترتیب S_۱، S_۲، S_۳)

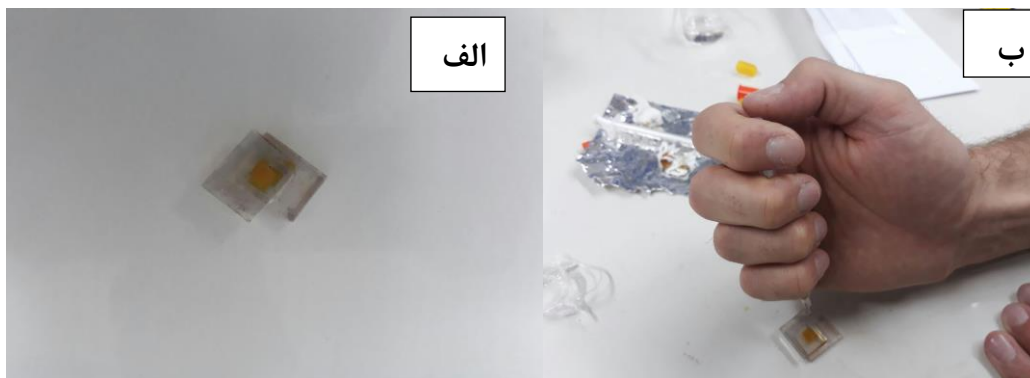
۳-۳-۴ ساخت سلول خورشیدی حساس شده به رنگ با استفاده از TiO_2

سنتز شده به روش اسپری

به دلیل تخلخل بهتر و ضخامت مناسبتری که نمونه S_۱ داشت، از آن برای ساخت قطعه‌ی سلول خورشیدی حساس شده به رنگ استفاده شد. در ابتدا همانطور که در بخش ۳-۴ بیان شد، محلول اولیه آماده شد. سپس زیرلایه‌ی FTO در ابعاد $0.5 \text{ cm} \times 0.5 \text{ cm}$ ماسک گذاری شد. در ادامه لایه نشانی فوتوآند TiO_2 به روش اسپری پایرولیز و با غلظت ۴M با شرایط بیان شده در بخش ۳-۴ صورت گرفت. بعد از لایه نشانی و بازپخت آن در دمای ۴۰۰ درجه به مدت ۳۰ دقیقه، فوتوآند به مدت ۲۰ الی ۲۴ ساعت درون رنگدانه‌ی NV۱۹ گذاشته شد. سپس با اتانول شستشو داده شد و با هوای تمیز خشک گردید. سپس چسب سرلین بین فوتوآند و الکتروود شمارشگر که دارای روزنه‌ی برای

تزریق الکترولیت است قرار گرفت، در دمای ۱۲۰ درجه به مدت ۱۲۰ ثانیه حرارت‌دهی شد تا فوتوآند و الکترود شمارشگر بدون هیچ گونه نشتی بهم بچسبند.

در ادامه با ایجاد خلأ به وسیله‌ی سرنگ یک یا دو قطره از الکترولیت که در اینجا از الکترولیت یدید و تری یدید استفاده گردید به قطعه‌ی ساخته شده تزریق گردید. سپس روزنه با استفاده از چسب سرلین و قطعه‌یی از شیشه بسته شد، تا قطعه‌ی ساخته شده نشتی الکترولیت نداشته باشد. در شکل (۴-۱۴) نمایی از تزریق الکترولیت و همچنین قطعه‌ی ساخته شده نشان داده شده است.

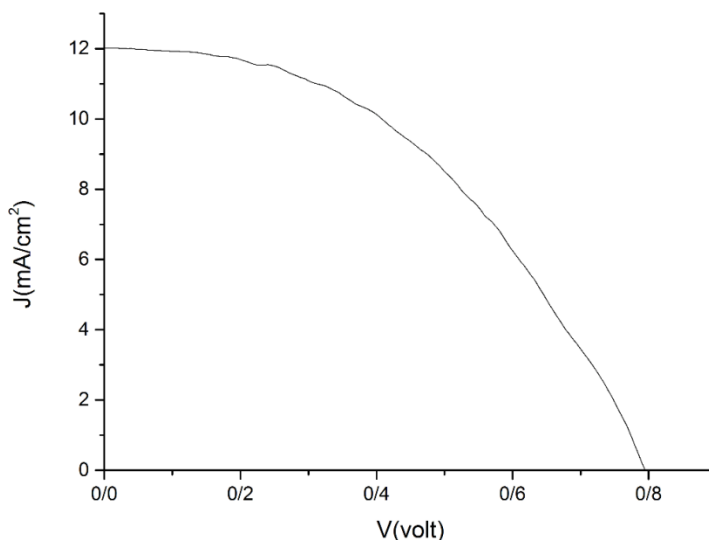


شکل ۴-۱۴ الف نمایی از تزریق الکترولیت برای ساخت سلول خورشیدی ب نمایی از یک سلول ساخته شده

در جدول شماره‌ی (۴-۵) محاسبات مربوط به بازده سلول (%) چگالی جریان بیشینه (J_{max})، بیشترین توان (p_{max})، بیشترین ولتاژ (V_{max})، فاکتور پرشوندگی (ff)، ولتاژ جریان مدار باز (V_{oc}) و جریان اتصال کوتاه (j_{sc}) آمده است. در شکل (۴-۱۵) نمودار چگالی جریان بر حسب ولتاژ رسم شده است. ضریب پرشوندگی، یک اندازه گیری از حداکثر توان خروجی از یک سلول خورشیدی است. برای سلول‌های خورشیدی، مقدار ضریب پرشوندگی عددی بین ۰ و ۱ است و هر اندازه به ۱ نزدیک باشد نشان دهنده‌ی عملکرد بهینه‌ی سلول خورشیدی است. در اینجا ولتاژ مدار باز به حداکثر ولتاژی اطلاق می‌شود که از یک سلول خورشیدی زمانی که به دو سر آن مقاومت بی‌نهایت وصل شود بدست می‌آید [۴۸].

جدول ۴-۵ محاسبات مربوط به سلول خورشیدی ساخته شده

pmax	V-max	J-max	Voc	j _{sc}	(%)	Ff
۱/۰۶	۰/۴۷	۸/۹۶	۰/۷۹	۱۲/۰۱	۴/۲۷	۰/۴۴



شکل ۴-۱۵ منحنی چگالی جریان-ولتاژ برای سلول ساخته شده

۴-۴ سنتز پودر TiO_2 به روش هیدروترمال

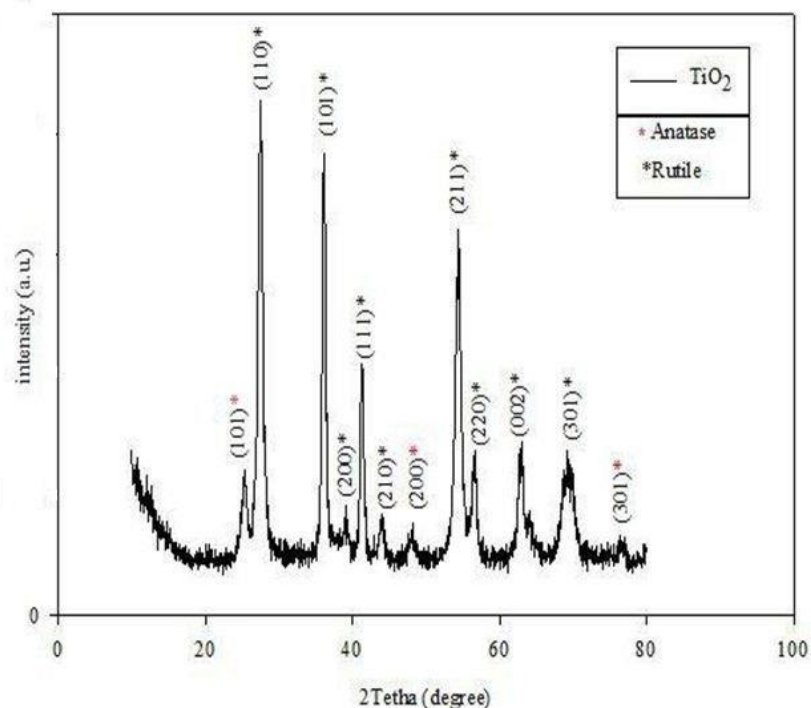
۴-۴-۱ تهیه پودر TiO_2

برای تهیه محلول اولیه، از تیتانیوم ایزوپروپوکساید (TTIP) به عنوان ماده اصلی و اسید هیدروکلریک و آب مقطر دوبار دی یونیزه شده به عنوان حلال استفاده گردید. ابتدا آب مقطر دوبار دی یونیزه شده و اسید هیدروکلریک به نسبت مساوی و هرکدام به مقدار ۱۵ mL به مدت ۱۰ min روی همزن مغناطیسی با دمای 50°C قرار داده شده تا به صورت همگن مخلوط شوند سپس ۱ mL تیتانیوم ایزوپروپوکساید به آن اضافه گردید و دوباره محلول روی همزن مغناطیسی مخلوط گردید و محلولی شفاف به دست آمد. محلول شفاف درون ظرف شیشه‌ای ریخته شد و برای جلوگیری از نشی

محلول درب آن محکم بسته شد. درون کوره در دمای 115°C درجه و به مدت ۲۴ ساعت قرار داده شد.

۴-۴-۲ مطالعه‌ی خواص ساختاری

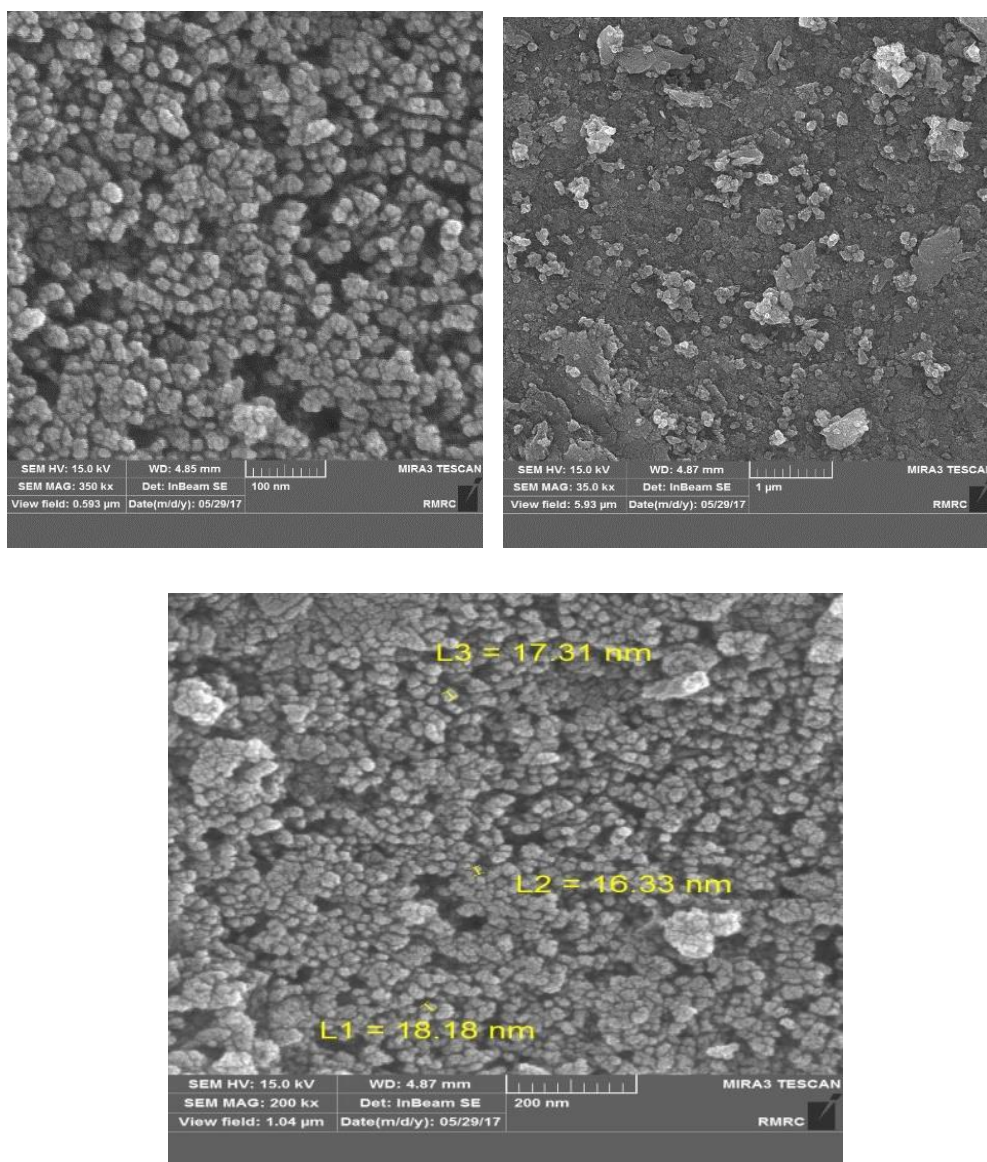
برای مطالعه ساختاری نمونه الگوی پراش اشعه ایکس آنها ثبت گردید. طیف XRD نمونه در شکل ۴-۱۶ نشان داده شده است. نتایج بدست آمده حاکی از آن است که نمونه‌ها دارای ساختار چهارگوشه در فاز روتیل با راستای ترجیحی (110) و با 2θ حدود ۳۸ می‌باشد. همانطور که در شکل زیر نشان داده شده است دارای فاز آناتاز نیز می‌باشد. اما مطابق با کار دیگران فاز روتیل ارجح‌تر می‌باشد. در اینجا قله‌های در راستاهای (101) ، (200) ، (301) مربوط به فاز آناتاز نمونه است. و قله‌های در راستاهای (110) ، (101) ، (200) ، (111) ، (210) ، (200) ، (211) ، (220) ، (002) ، (301) ، (301) مربوط به فاز روتیل می‌باشد.



شکل ۴-۱۶: الگوی XRD لایه نازک TiO_2 سنتز شده به روش هیدروترمال

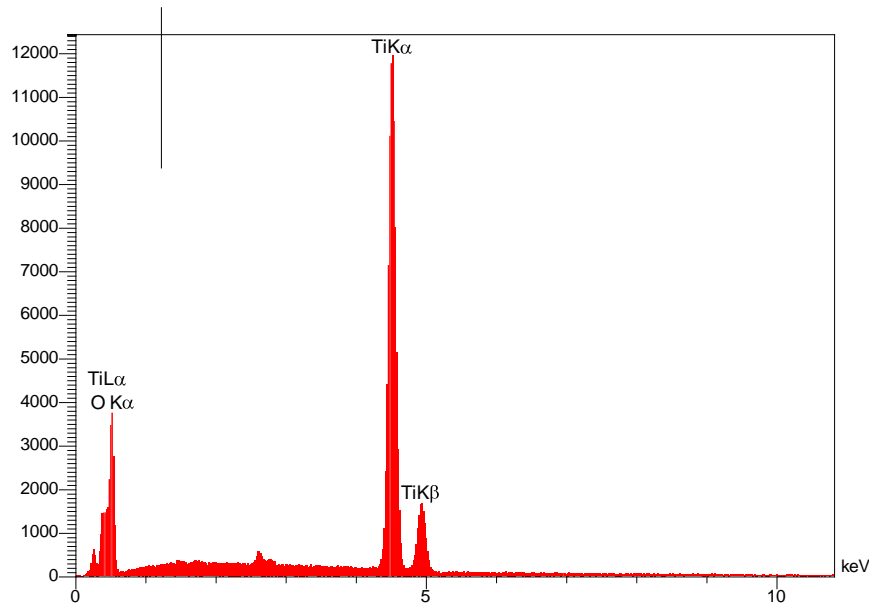
۳-۴-۴ مطالعه ریخت شناسی سطح لایه

در شکل ۱۷-۴ تصاویر FESEM ثبت شده برای لایه‌های نازک TiO_2 نشان داده شده است. تصاویر FESEM نمونه نشان می‌دهد که سطح نمونه‌ها از نانو ذراتی با میانگین ابعاد ۱۵ nm و به صورت کاملاً متراکم تشکیل شده است. این نتیجه در کارهای دیگران نیز گزارش شده است.



شکل ۱۷-۴ تصویر FESEM در مقیاس ۱۰۰ nm، ۱ μm و به همراه اندازه‌ی دانه‌ها

در شکل ۴-۱۸ EDAX مربوط به نمونه‌ی ساخته شده نشان داده شده است. در جدول ۴-۶ درصد مواد تشکیل دهنده آمده است.



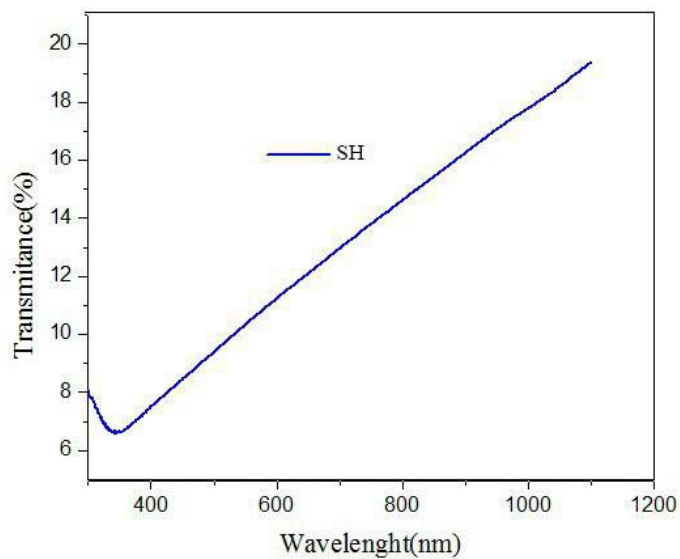
شکل ۴-۱۸ : نمودار EDAX مربوط به نمونه‌ی SH

جدول ۴-۶ درصد اتمی عناصر در نمونه‌ی SH

نام نمونه	SH
Ti	۲۴/۷۰
O	۷۵/۳۰

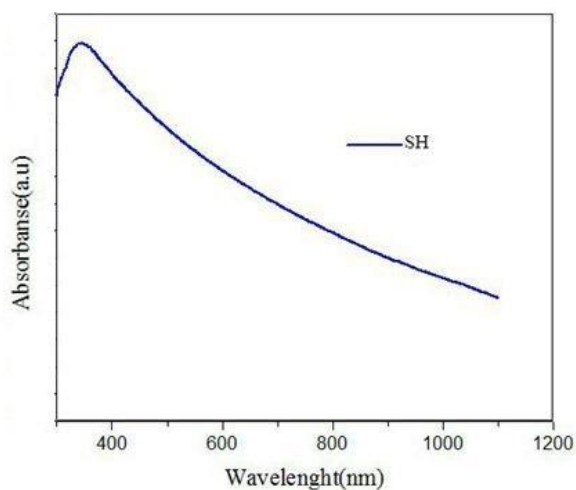
۴-۴-۴ مطالعه‌ی خواص نوری

در شکل ۴-۱۹ نمودار طیف عبور برای پودر ساخته شده به روش هیدروترمال نشان داده شده است. همانطور که در شکل مشاهده می‌شود. آستانه‌ی عبور این نمونه در محدوده‌ی UV قرار دارد همان طور که در شکل زیر مشاهده می‌شود.



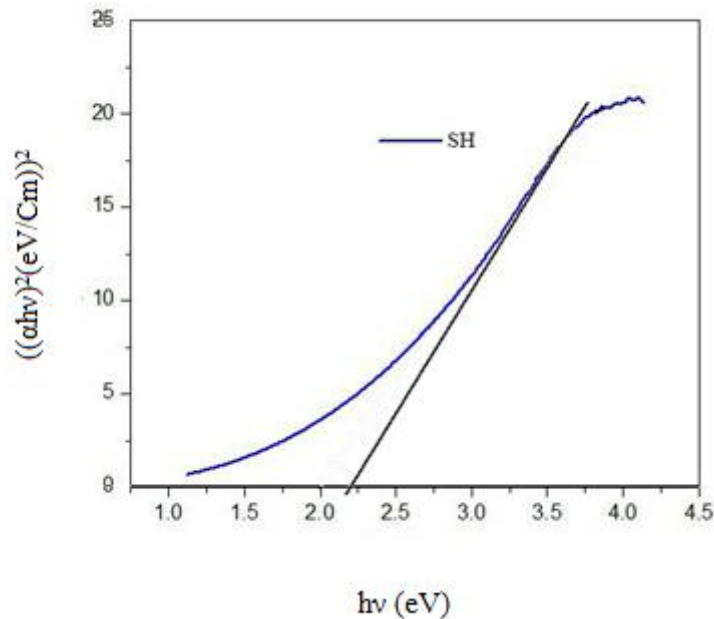
شکل ۴-۱۹ نمودار طیف عبور برای پودر ساخته شده به روش هیدروترمال

به منظور بررسی خواص اپتیکی پودر، طیف جذب آن به کمک یک طیف سنج نوری در بازه طول موجی $300-1100\text{ nm}$ اندازه‌گیری شد. در شکل ۴-۲۰ نمودار جذب نمونه نشان داده شده است. همان طور که در شکل زیر مشاهده می‌شود آستانه‌ی جذب این نمونه در محدوده‌ی UV قرار دارد.



شکل ۴-۲۰ نمودار جذب برای پودر ساخته شده به روش هیدروترمال

در شکل ۴-۲۱ نمودار مربوط به گاف اپتیکی پودر ساخته شده با روش هیدروترمال نشان داده شده است.



شکل ۴-۲۱ نمودار مربوط به گاف اپتیکی پودر ساخته شده با روش هیدروترمال

۴-۴-۵ ساخت سلول خورشیدی حساس شده با رنگ با استفاده از TiO_2 سنتز شده با روش هیدروترمال

۴-۴-۵-۱ تهیهی خمیر از نانو ذرات TiO_2

برای تهیهی خمیر از ۱ gr پودر دی‌اکسید تیتانیوم که از روش آبی-گرمایی با اندازه دانه‌های میانگین ۱۵ nm بدست آمد استفاده گردید. با افزودن ۰/۲۵ mL پلی اتیلن گلیکول (PEG۴۰۰) به عنوان عامل چسبندگی خمیر، ابتدا پودر درون هاون خیسانده شده، و بعد از افزودن ۱/۲۵ mL اتانول برای ایجاد یکنواختی خمیر، به مدت ۲ روز روی همزن مغناطیسی به شدت مخلوط گردید.

۴-۵-۲ مراحل ساخت قطعه سلول خورشیدی با روش دکتر بلید

مراحل ساخت سلول خورشیدی حساس شده به رنگ به شرح ذیل است:

ابتدا FTO در مقیاس ۲ cm در ۱/۵ cm برش داده شد. سپس سمت رسانای آن مشخص گردید و طبق روش شستشو که در بخش (۴-۲-۴) بیان شد شستشو گردید. در ادامه از $TiCl_4$ خالص، محلول ۲ مولار در آب مقطر تهیه شد. محلول ۴۰ میلی مولار $TiCl_4$ از محلول ۲ مولار تهیه شد. لایه در محلول ۴۰ میلی مولار $TiCl_4$ در دمای $70^\circ C$ ، به مدت ۳۰ min قرار داده شد. در ادامه لایه بر روی یک پلیت قرار داده شد، سپس اطراف آن چسب اسکاچ/کالک زده شد. خمیر از یک سمت FTO روی آن قرار داده شد و با استفاده از یک میله بر روی سطح آن پخش گردید. لایه به همراه چسب اطراف آن در دمای $120^\circ C$ درجه به مدت ۸ دقیقه، درون کوره ی آون خشک گردید. در ادامه در دمای $500^\circ C$ بازپخت گردید. پس از اتمام حرارت دهی لایه ها در ابعاد 0.25 cm^2 تراشیده شدند. در ادامه لایه بدست آمده از تراشیدن، درون محلول ۴۰ میلی مولار گذاشته شد. سپس بعد از شستشو با اتانول و آب مقطر، به مدت ۳۰ min در دمای $500^\circ C$ حرارت دهی شد. هنگامی که دمای کوره به $80^\circ C$ رسید لایه درون محلول رنگ گذاشته شد.

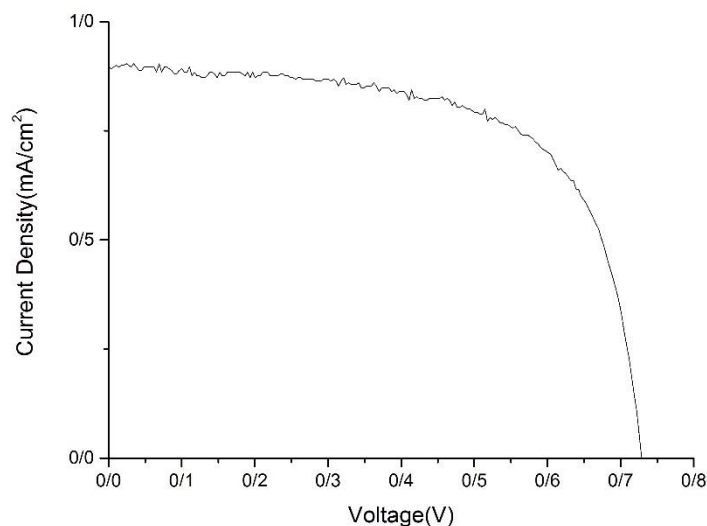
ادامه ی روند ساخت قطعه همانند روش بیان شده در بخش (۴-۳-۳) است.

در شکل ۴-۲۲ نمودار چگالی جریان-ولتاژ سلول ساخته شده نشان داده شده است. در جدول شماره ۴-۷ محاسبات مربوط به بازده سلول (%)، چگالی جریان بیشینه (J_{max})، بیشترین توان (p_{max})، بیشترین ولتاژ (V_{max})، فاکتور پرشوندگی (ff)، ولتاژ جریان مدار باز (V_{oc}) و جریان اتصال کوتاه (j_{sc}) آمده است. ضریب پرشوندگی، یک اندازه گیری از حداکثر توان خروجی از یک سلول خورشیدی است. برای سلول های خورشیدی، مقدار ضریب پرشوندگی عددی بین ۰ و ۱ است و هر اندازه به ۱ نزدیک باشد نشان دهنده ی عملکرد بهینه ی سلول خورشیدی است. در اینجا ولتاژ مدار باز

به حداکثر ولتاژی اطلاق می‌شود که از یک سلول خورشیدی زمانی که به دو سر آن مقاومت بی‌نهایت وصل شود بدست می‌آید.

جدول ۴-۷ محاسبات مربوط به سلول خورشیدی ساخته شده

pmax	V-max	J-max	Voc	j _{sc}	(%)	Ff
۰/۱۰۶	۰/۵۸	۰/۷۳۲	۰/۷۲۸	۰/۸۹۶	۰/۴۲۴	۰/۶۵



شکل ۴-۲۲ منحنی چگالی جریان-ولتاژ برای سلول ساخته شده به روش دکتر بلید

۴-۵ اثر آرایش آلومینیوم در ویژگی‌های فیزیکی TiO_2 به روش هیدروترمال

۴-۵-۱ تهیه ی پودر با روش هیدروترمال با افزودن ناخالصی آلومینیوم نیترات

در ابتدا درون ظرف حاوی ۴۰ mL محلول ایزوپروپانول، ۱۰ mL تیتانیوم بوتوکساید ($C_{16}H_{36}O_4Ti$) اضافه گردید و اجازه داده شد به مدت یک ساعت مخلوط گردد. در ادامه ۴۰ mL محلول ایزوپروپانول بدان اضافه گردید و در دمای $70^\circ C$ به مدت ۳ ساعت مخلوط گردید. هنگامی که

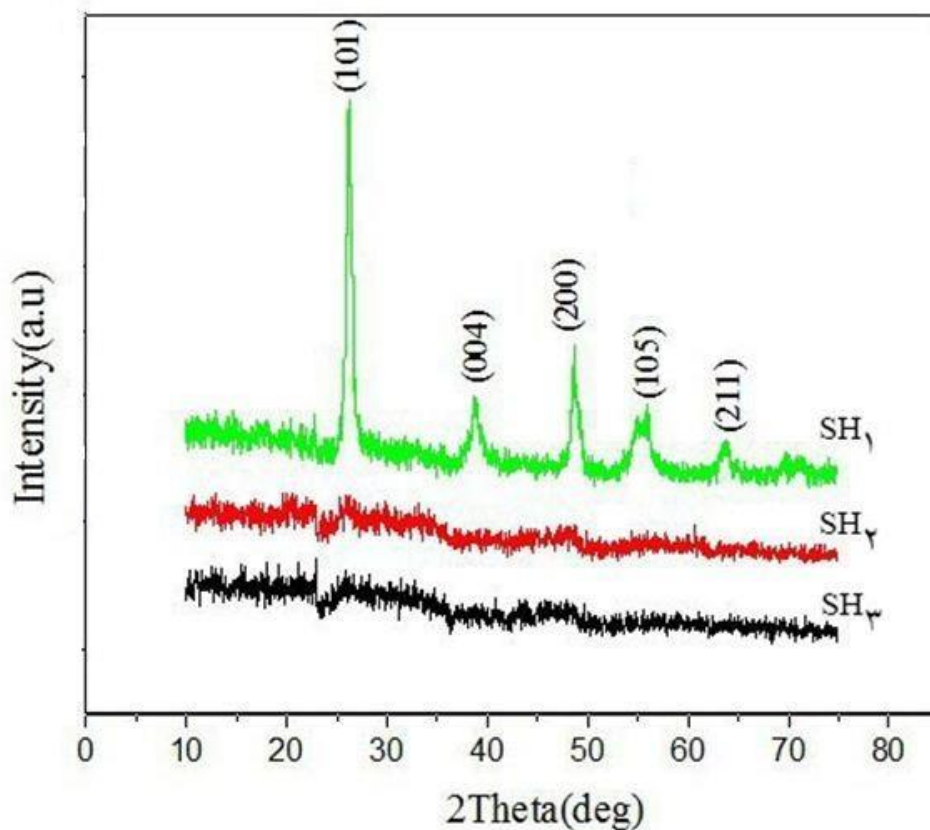
محلول شفاف شد اجازه داده شد سرد شود، بعد از سرد شدن ۵ mL استیک اسید به آن اضافه شد. سپس آلومینیوم نیترات به عنوان ناخالصی بدان اضافه گردید و در همان دمای C ۷۰° به مدت ۴ ساعت مخلوط گردید. بعد از سرد شدن، ۱۵ mL آب مقطر به محلول اضافه گردید و به مدت ۲۴ ساعت در دمای اتاق اجازه داده شد تا ته نشین شود. برای نمونه بدون ناخالصی نیز از این مراحل پیروی شد فقط ناخالصی آلومینیوم نیترات اضافه نشد. در جدول ۴-۸ اسامی نمونه ها و میزان ناخالصی آمده است.

جدول ۴-۸ نام نمونه‌ها به همراه میزان افزودن ناخالصی آلومینیوم

میزان ناخالصی	نام نمونه
بدون ناخالصی	SH _۱
۱٪ غلظت محلول	SH _۲
۱/۵٪ غلظت محلول	SH _۳

۴-۵-۲ مطالعه‌ی خواص ساختاری نمونه با استفاده از پراش پرتو ایکس

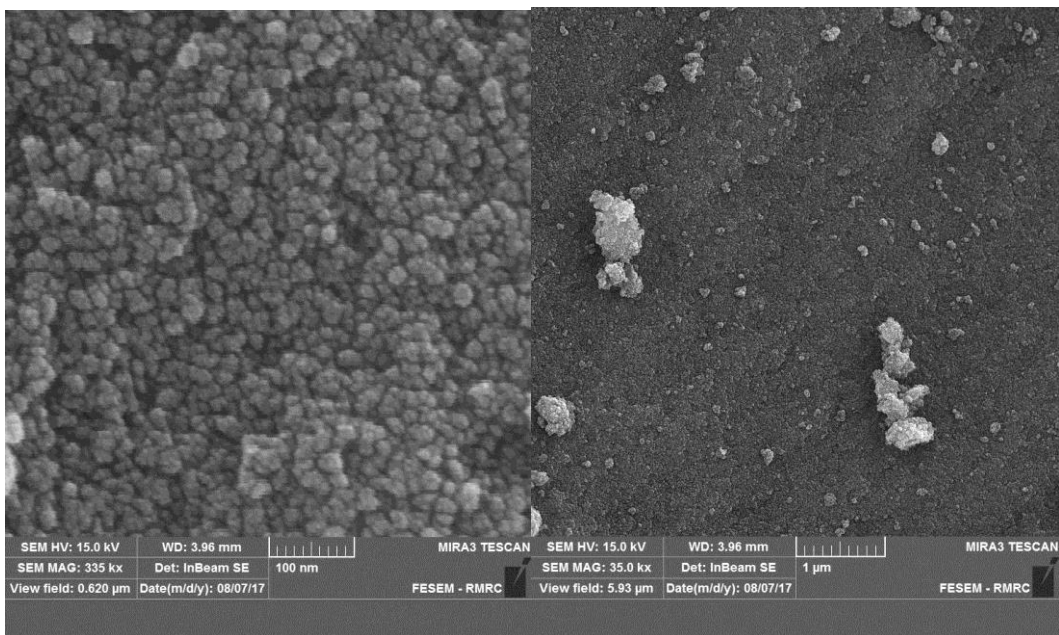
برای مطالعه ساختاری نمونه‌ها طیف پراش اشعه ایکس آنها ثبت گردید. طیف *XRD* نمونه در شکل ۴-۲۳ نشان داده شده است. نتایج بدست آمده حاکی از آن است که نمونه‌ی SH_۱ دارای ساختار تتراگونال در فاز آناز با راستاهای (۱۰۱)، (۰۰۴)، (۲۰۰)، (۱۰۵)، (۲۱۱) می‌باشد. اما در نمونه‌های مربوط به افزودن ناخالصی آلومینیوم همانطور که در شکل مشاهده می‌شود آمورف است.



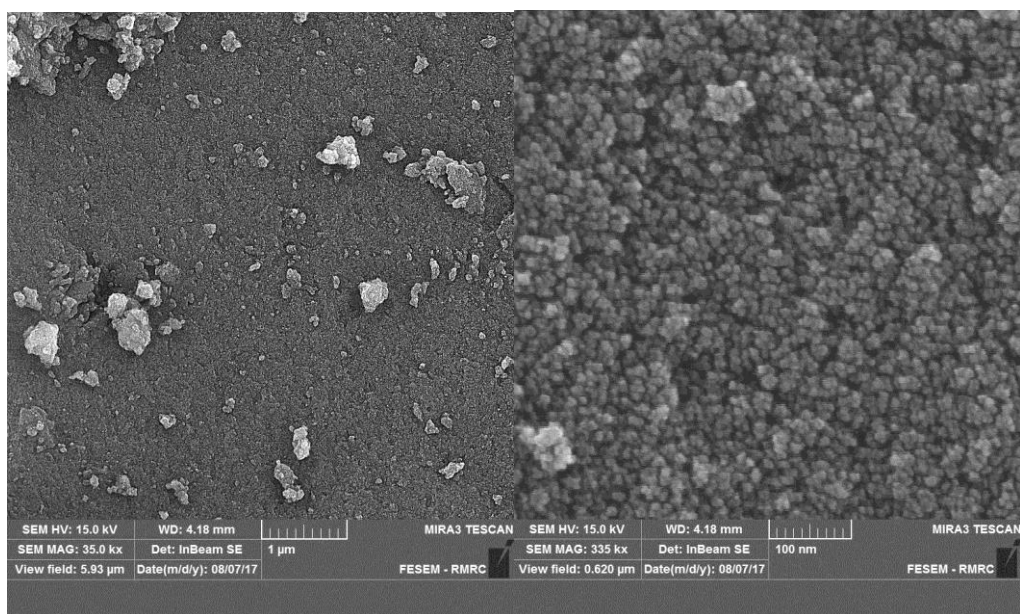
شکل ۴-۲۳ طیف پراش پرتو ایکس مربوط به نمونه های SH_۱، SH_۲ و SH_۳

۴-۵-۳ مطالعه ریخت شناسی پودر TiO_۲

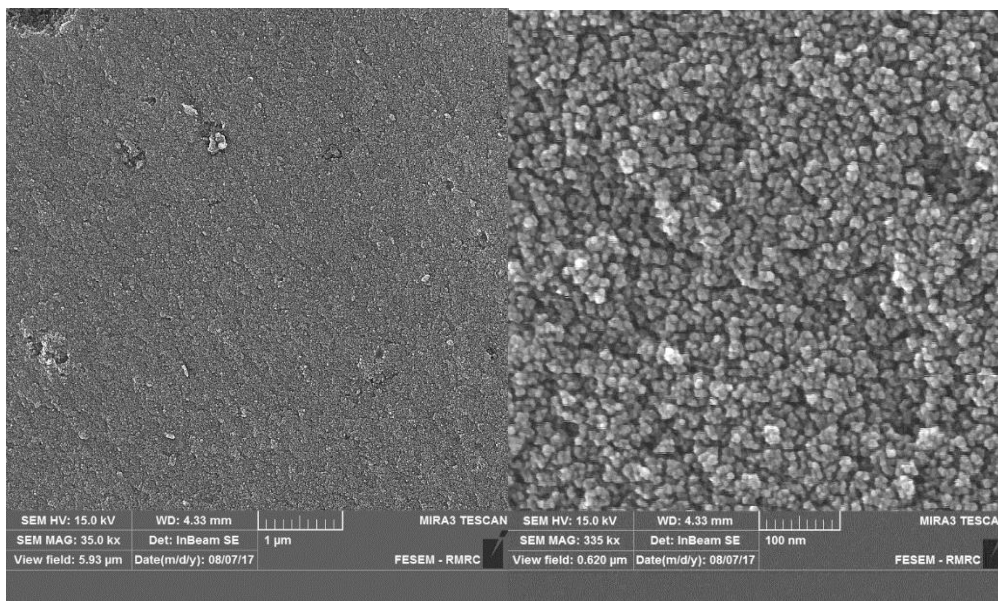
برای مطالعه و بررسی ریخت شناسی لایه ها از تصاویر میکروسکوپ الکترون روبشی گسیل میدانی (FESEM) پژوهشکده‌ی مواد و انرژی کرج استفاده شد. در شکل ۴-۲۴ تا ۴-۲۶ پودرهای تهیه شده با روش هیدروترمال با افزودن ناخالصی و بدون ناخالصی در مقیاس‌های ۱ μm، ۱۰۰ nm نشان داده شده است.



شکل ۴-۲۴ تصاویر FESEM برای نمونه SH_1 بدون ناخالصی در مقیاس های 100 nm ، $1\text{ }\mu\text{m}$

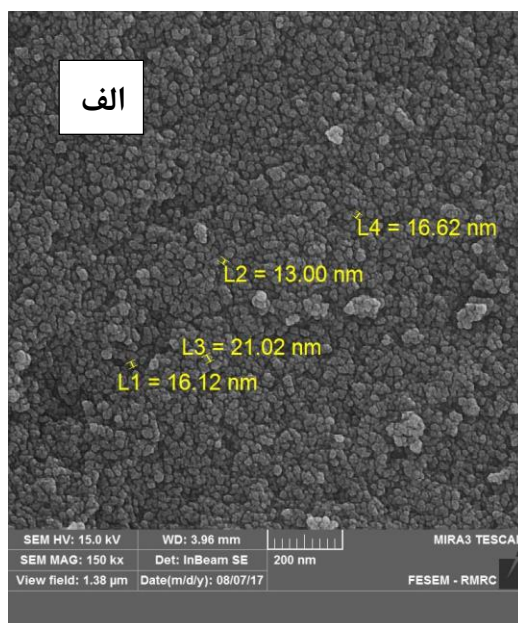


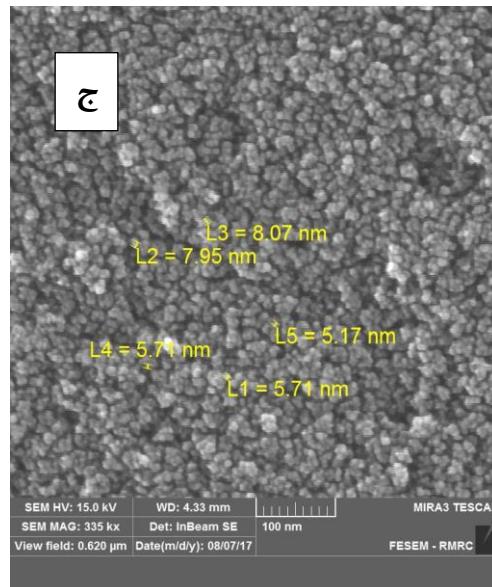
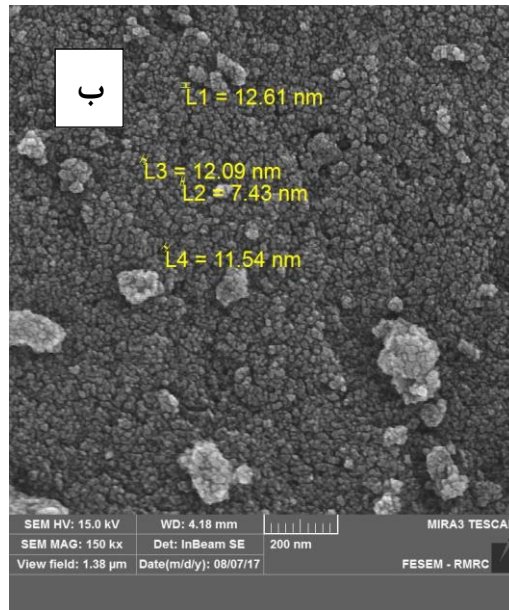
شکل ۴-۲۵ تصاویر FESEM برای نمونه SH_2 بدون ناخالصی در مقیاس های 100 nm ، $1\text{ }\mu\text{m}$



شکل ۴-۲۶ تصاویر FESEM برای نمونه SH_3 با افزودن ناخالصی های 100 nm ، $1\text{ }\mu\text{m}$

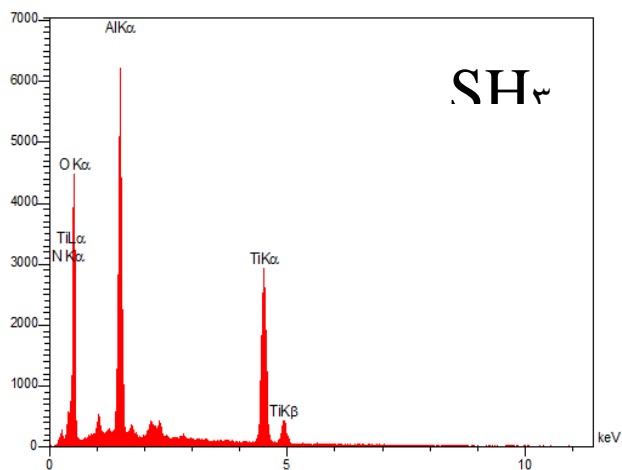
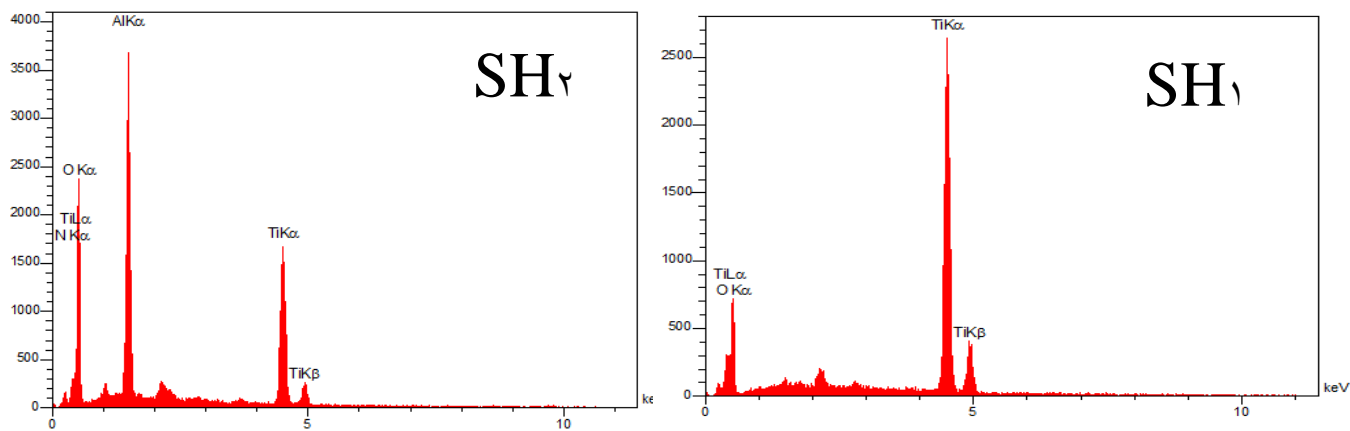
همانطور که در شکل ۴-۲۷ الف تا ج اندازه دانه ها به ترتیب برای نمونه های SH_1 ، SH_2 ، SH_3 نشان داده شده است. با افزودن ناخالصی و افزایش میزان ناخالصی اندازه ی ذرات کوچکتر شده است.





شکل ۴-۲۷ اندازه‌ی ذرات برای نمونه‌های SH_1 ، SH_2 ، SH_3

در شکل ۴-۲۸ EDAX مربوط به نمونه‌های ساخته شده با افزودن ناخالصی و بدون ناخالصی نشان داده شده است. در جدول ۴-۹ درصد مواد تشکیل دهنده آمده است. همانطور که در جدول نشان داده شده است در نمونه‌هایی که ناخالصی آلومینیوم به کار رفته است درصد اتمی آلومینیوم آمده است.



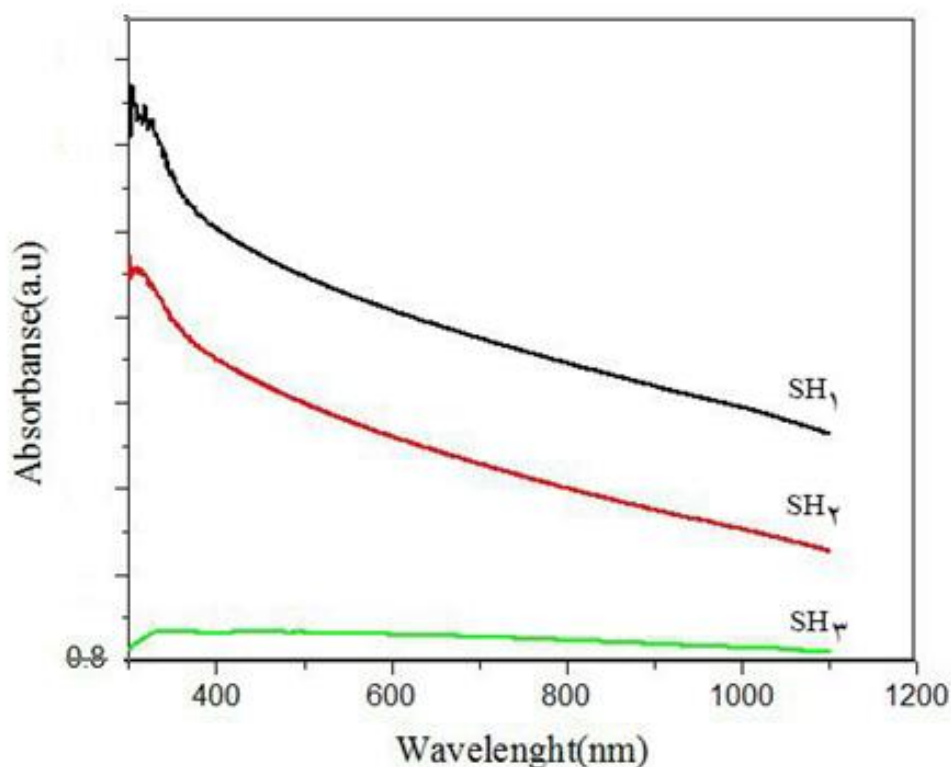
شکل ۴-۲۸: نمودار EDX مربوط به نمونه‌های SH_۱, SH_۲ و SH_۳.

جدول ۴-۹: درصد اتمی عناصر در نمونه‌های SH_۱, SH_۲ و SH_۳

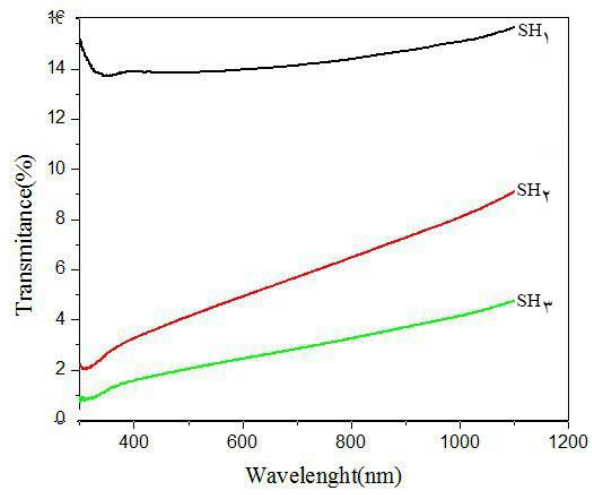
نام نمونه	SH _۱	SH _۲	SH _۳
N	۰	۹/۸۳	۱۰/۲۵
AL	۰	۱۱/۱۴	۱۰/۹۴
O	۷۴/۰۸	۷۰/۵۲	۷۰/۷۵
Ti	۲۵/۹۲	۸/۵۰	۸/۰۶

۴-۵-۴ مطالعه‌ی خواص اپتیکی پودرهای ساخته شده به روش هیدروترمال

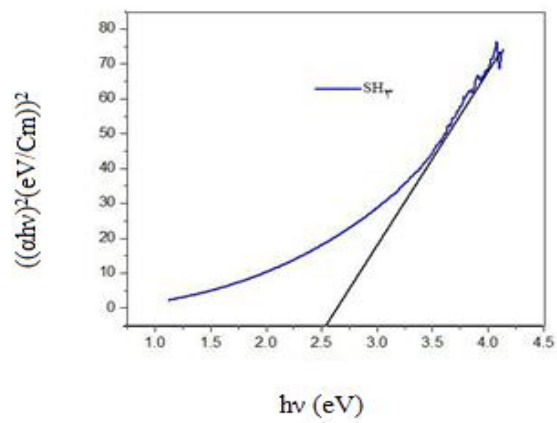
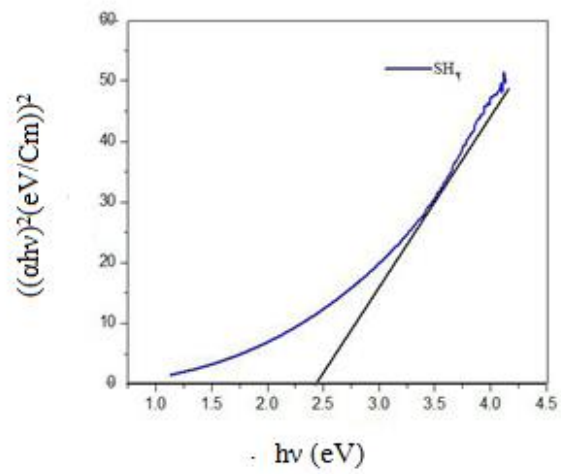
به منظور بررسی خواص اپتیکی نمونه‌ها، طیف‌های عبور آنها به کمک یک طیف سنج نوری در بازه طول موجی $300-1100\text{ nm}$ اندازه‌گیری شدند. رفتار عبور نمونه‌ها نشان می‌دهد که با افزایش ناخالصی شاهدافزایش میزان عبور در نمونه‌ها شدیم شکل ۴-۲۹. طیف جذب نمونه‌ها نشان دهنده‌ی این است که میزان عبور نور برای نمونه‌ها با افزودن ناخالصی کاهش پیدا کرده است شکل ۴-۳۰. گاف اپتیکی نمونه‌ها با افزایش میزان غلظت افزایش پیدا کرده است شکل ۴-۳۱. آستانه‌ی جذب رابطه‌ی معکوسی با گاف نوری ماده دارد بنابراین انتظار می‌رود با کاهش جذب با افزایش گاف نوری باشیم که در اینجا این گونه است. همچنین مشاهده می‌شود که آستانه‌ی جذب و عبور برای نمونه‌ها در محدوده‌ی UV قرار دارد.

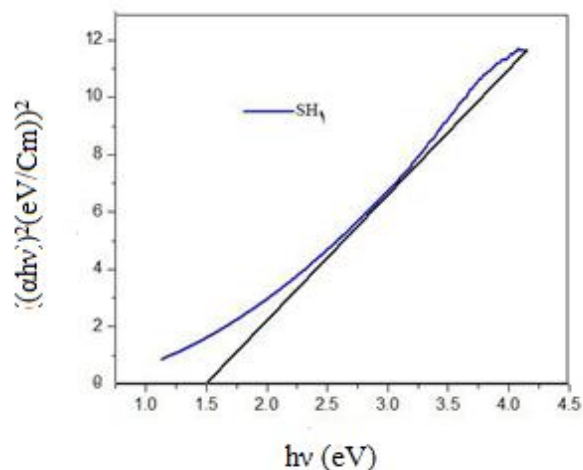


شکل ۴-۲۹ نمودار طیف جذب نمونه‌های SH_۱, SH_۲ و SH_۳



شکل ۴-۳ نمودار طیف عبور نمونه‌های SH_۱, SH_۲ و SH_۳





شکل ۴-۳ نمودار گراف اپتیکی نمونه‌های SH_۱, SH_۲ و SH_۳

۴-۶ جمع بندی

در این فصل به کارهای انجام شده در این پایان نامه و تحلیل و مشخصه یابی نمونه‌های سنتز شده و همچنین ساخت سلول خورشیدی رنگدانه ای پرداخته شد. لایه نشانی‌ها به دو روش اسپری پایرولیزیز و هیدروترمال با آلیش و بدون آلیش صورت گرفت. نمونه‌های تهیه شده مشخصه یابی شدند. با لایه‌های تهیه شده از نمونه‌های بدون آلیش سلول خورشیدی رنگدانه‌ای ساخته شد و منحنی چگالی جریان-ولتاژ، بازدهی آن و دیگر مشخصه‌های آن بررسی شد.

فصل پنجم

جمع بندی و پیشنهادات برای پروژه های آتی

۵-۱ نتیجه گیری

در این پایان نامه فوتو آند با روش‌های اسپری پایرولیز و هیدروترمال تهیه شدند. ویژگی‌های ساختاری، اپتیکی و ریخت شناسی آن‌ها مشخصه یابی شدند. از آنجاییکه تخلخل فوتو آند تأثیر زیادی در کارکرد سلول‌های خورشیدی حساس شده به رنگ دارد، به بررسی خصوصیات لایه نازک نشانده شده با روش اسپری پایرولیز پرداخته شد. لایه نشانده شده با روش اسپری پایرولیز دارای فاز آنتاز بود. برای نمونه تهیه شده با روش هیدروترمال به جای لایه نازک پودر داشتیم که هم دارای فاز آنتاز و هم روتایل بود ولی فاز روتایل غالب تر بود. پس از تهیه خمیر از پودر، با روش دکتر بلید سلول ساخته شد. سلول ساخته شده با روش اسپری پایرولیز نسبت به روش هیدروترمال بازده بیشتری داشت.

در ادامه با روش هیدروترمال آلایش آلومینیوم صورت گرفت. ویژگی‌های ساختاری، اپتیکی و ریخت شناسی مورد بررسی قرار گرفتند. مشاهده‌ی ریخت شناسی نشان می‌دهد که با افزودن ناخالصی آلومینیوم اندازه‌ی دانه‌ها کوچکتر شدند.

۵-۲ پیشنهادات

- مهم ترین هدف این پایان نامه تهیه فوتو آند برای کاربرد در سلول خورشیدی حساس شده به رنگ و بهبود بازده آن خواهد بود.
- در اینجا فوتو آند با روش اسپری پایرولیز و هیدروترمال تهیه شدند. می‌توان فوتو آند را با روش‌های دیگر از قبیل سل-ژل، CVD، PVD و... تهیه نمود.
- تخلخل لایه در ساخت سلول خورشیدی حساس شده به رنگ بسیار مهم است به طوری که نفوذ الکترولیت درون آن به راحتی صورت می‌گیرد. بنابراین بهینه کردن تخلخل لایه‌ی دی اکسید تیتانیوم برای پژوهش‌های بعدی پیشنهاد می‌شود.

- در اینجا ناخالصی آلومینیوم برای بهبود کارایی سلول خورشیدی حساس شده به رنگ استفاده شد. استفاده از عناصر دیگر برای بهبود کارایی سلول را می‌توان به پژوهشگران پیشنهاد نمود.

- [١] G. Boyle, *Renewable Energy: Power for a Sustainable*● vol. ١٩٩٦: Oxford University Press, USA, ١٩٩٦.
- [٢] N. S. Lewis and G. Crabtree, "Basic research needs for solar energy utilization: report of the basic energy sciences workshop on solar energy utilization, April ١٨-٢١, ٢٠٠٥," ed: US Department of Energy, Office of Basic Energy Science, ٢٠٠٥.
- [٣] B. O'regan and M. Grätzel, "A low-cost, high-efficiency solar cell based on dye-sensitized colloidal TiO₂ films," *nature*, vol. ٣٥٣, pp. ٧٣٧-٧٤٠, ١٩٩١.
- [٤] D. M. Chapin, C. Fuller, and G. Pearson, "A new silicon p-n junction photocell for converting solar radiation into electrical power," *Journal of Applied Physics*, vol. ٢٥, pp. ٦٧٦-٦٧٧, ١٩٥٤.
- [٥] A. Luque, "Will we exceed ٥٠% efficiency in photovoltaics?," *Journal of Applied Physics*, vol. ١١٠, p. ١١, ٢٠١١.
- [٦] K. Branker, M. Pathak, and J. M. Pearce, "A review of solar photovoltaic leveled cost of electricity," *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, vol. ١٥, pp. ٤٤٧٠-٤٤٨٢, ٢٠١١.
- [٧] T. Manna and S. Mahajan, "Nanotechnology in the development of photovoltaic cells," in *Clean Electrical Power, ٢٠٠٧. ICCEP'٠٧. International Conference on*, ٢٠٠٧, pp. ٣٧٩-٣٨٦.
- [٨] P. Choubey, A. Oudhia, and R. Dewangan, "A review: Solar cell current scenario and future trends," *Recent Research in Science and Technology*, vol. ٤, ٢٠١٢.
- [٩] B. von Roedern and H. S. Ullal, "The role of polycrystalline thin-film PV technologies in competitive PV module markets," in *Photovoltaic Specialists Conference, ٢٠٠٨. PVSC'٠٨. ٣٣rd IEEE*, ٢٠٠٨, pp. ١-٤.
- [١٠] A. Kojima, K. Teshima, Y. Shirai, and T. Miyasaka, "Organometal halide perovskites as visible-light sensitizers for photovoltaic cells," *Journal of the American Chemical Society*, vol. ١٣١, pp. ٦٠٥٠-٦٠٥١, ٢٠٠٩.
- [١١] W. S. Yang, J. H. Noh, N. J. Jeon, Y. C. Kim, S. Ryu, J. Seo, *et al.*, "High-performance photovoltaic perovskite layers fabricated through intramolecular exchange," *Science*, vol. ٣٤٨, pp. ١٢٣٤-١٢٣٧, ٢٠١٥.
- [١٢] M. D. Archer, *Nanostructured and photoelectrochemical systems for solar photon conversion* vol. ٣: Imperial College Press, ٢٠٠٨.
- [١٣] K. G. Reddy, T. Deepak, G. Anjusree, S. Thomas, S. Vadukumpully, K. Subramanian, *et al.*, "On global energy scenario, dye-sensitized solar cells and the promise of nanotechnology," *Physical Chemistry Chemical Physics*, vol. ١٦, pp. ٦٨٣٨-٦٨٥٨, ٢٠١٤.
- [١٤] N. A. Anderson and T. Lian, "Ultrafast electron transfer at the molecule-semiconductor nanoparticle interface," *Annu. Rev. Phys. Chem.*, vol. ٥٦, pp. ٤٩١-٥١٩, ٢٠٠٥.
- [١٥] L. Andrade, H. A. Ribeiro, and A. Mendes, "Dye-Sensitized Solar Cells: An Overview," *Encyclopedia of Inorganic and Bioinorganic Chemistry*, ٢٠١١.

- [16] J.-H. Yum, E. Baranoff, S. Wenger, M. K. Nazeeruddin, and M. Grätzel, "Panchromatic engineering for dye-sensitized solar cells," *Energy & Environmental Science*, vol. 4, pp. 852-857, 2011.
- [17] M. R. Hoffmann, S. T. Martin, W. Choi, and D. W. Bahnemann, "Environmental applications of semiconductor photocatalysis," *Chemical reviews*, vol. 90, pp. 79-96, 1990.
- [18] M. Grätzel, "Recent advances in sensitized mesoscopic solar cells," *Accounts of chemical research*, vol. 42, pp. 1788-1798, 2009.
- [19] K. Keis, E. Magnusson, H. Lindström, S.-E. Lindquist, and A. Hagfeldt, "A 0% efficient photoelectrochemical solar cell based on nanostructured ZnO electrodes," *Solar energy materials and solar cells*, vol. 73, pp. 51-58, 2002.
- [20] S. Ngamsinlapasathian, T. Sreethawong, Y. Suzuki, and S. Yoshikawa, "Doubled layered ITO/SnO₂ conducting glass for substrate of dye-sensitized solar cells," *Solar Energy Materials and Solar Cells*, vol. 90, pp. 2129-2134, 2006.
- [21] F. Yang, *Thin film solar cells grown by organic vapor phase deposition*: Princeton University, 2008.
- [22] L. Giribabu, V. K. Singh, T. Jella, Y. Soujanya, A. Amat, F. De Angelis, *et al.*, "Sterically demanded unsymmetrical zinc phthalocyanines for dye-sensitized solar cells," *Dyes and pigments*, vol. 98, pp. 518-529, 2013.
- [23] K. Kalyanasundaram and M. Grätzel, "Efficient dye-sensitized solar cells for direct conversion of sunlight to electricity," *Material Matters*, vol. 4, pp. 88-90, 2009.
- [24] S. Huang, G. Schlichthörl, A. Nozik, M. Grätzel, and A. Frank, "Charge recombination in dye-sensitized nanocrystalline TiO₂ solar cells," *The Journal of Physical Chemistry B*, vol. 101, pp. 2076-2082, 1997.
- [25] K. Tennakone, G. Kumara, A. Kumarasinghe, K. Wijayantha, and P. Sirimanne, "A dye-sensitized nano-porous solid-state photovoltaic cell," *Semiconductor Science and Technology*, vol. 10, p. 1689, 1995.
- [26] M. Kalbacova, J. Macak, F. Schmidt-Stein, C. Mierke, and P. Schmuki, "TiO₂ nanotubes: photocatalyst for cancer cell killing," *physica status solidi (RRL)-Rapid Research Letters*, vol. 2, pp. 194-196, 2008.
- [27] X. Han and G. Shao, "Electronic properties of rutile TiO₂ with nonmetal dopants from first principles," *The Journal of Physical Chemistry C*, vol. 110, pp. 8274-8282, 2006.
- [28] D. A. Hanaor and C. C. Sorrell, "Review of the anatase to rutile phase transformation," *Journal of Materials science*, vol. 46, pp. 800-814, 2011.
- [29] D. Shriver and P. Atkins, "Bioinorganic chemistry," *Inorganic Chemistry*. 3rd Edition. USA: Oxford University Press, 1999.
- [30] M. Gopal, W. M. Chan, and L. De Jonghe, "Room temperature synthesis of crystalline metal oxides," *Journal of Materials Science*, vol. 32, pp. 6001-6008, 1997.
- [31] X. Chen and S. S. Mao, "Titanium dioxide nanomaterials: synthesis, properties, modifications, and applications," *Chem. Rev*, vol. 107, pp. 2891-2909, 2007.
- [32] A. Hagfeldt and M. Graetzel, "Light-induced redox reactions in nanocrystalline systems," *Chemical Reviews*, vol. 90, pp. 85-100, 1990.
- [33] S. Funk, B. Hokkanen, U. Burghaus, A. Ghicov, and P. Schmuki, "Unexpected adsorption of oxygen on TiO₂ nanotube arrays: influence of crystal structure," *Nano letters*, vol. 7, pp. 1091-1094, 2007.

- [34] T. Paunesku, T. Rajh, G. Wiederrecht, J. Maser, S. Vogt, N. Stojićević, *et al.*, "Biology of TiO₂-oligonucleotide nanocomposites," *Nature materials*, vol. 2, pp. 343-346, 2003.
- [35] C. Ayieko, R. Musembi, S. Waita, B. O. Aduda, and P. Jain, "Structural and optical characterization of nitrogen-doped TiO₂ thin films deposited by spray pyrolysis on fluorine doped tin oxide (FTO) coated glass slides," *International Journal of Energy Engineering*, vol. 2, pp. 77-79, 2012.
- [36] P. Kartikay, S. S. Nemala, and S. Mallick, "One-dimensional TiO₂ nanostructured photoanode for dye-sensitized solar cells by hydrothermal synthesis," *Journal of Materials Science: Materials in Electronics*, pp. 1-6, 2017.
- [37] C. Z. Wen, H. B. Jiang, S. Z. Qiao, H. G. Yang, and G. Q. M. Lu, "Synthesis of high-reactive facets dominated anatase TiO₂," *Journal of Materials Chemistry*, vol. 21, pp. 7052-7061, 2011.
- [38] J. K. Tsai, W. D. Hsu, T. C. Wu, T. H. Meen, and W. J. Chong, "Effect of compressed TiO₂ nanoparticle thin film thickness on the performance of dye-sensitized solar cells," *Nanoscale research letters*, vol. 8, p. 409, 2013.
- [39] N. Santhosh, R. Govindaraj, M. S. Pandian, P. Ramasamy, and S. Mukhopadhyay, "Mesoporous TiO₂ microspheres synthesized via a facile hydrothermal method for dye sensitized solar cell applications," *Journal of Porous Materials*, vol. 23, pp. 1483-1487, 2016.
- [40] I. C. Maurya, A. K. Gupta, P. Srivastava, and L. Bahadur, "Extensive enhancement in power conversion efficiency of dye-sensitized solar cell by using Al-doped TiO₂ photoanode," *Journal of Solid State Electrochemistry*, vol. 21, pp. 1229-1241, 2017.
- [41] K. Prabu, P. Anbarasan, and S. Janarthanan, "PREPARATION AND CHARACTERIZATION OF CdO/PVP NANOPARTICLES BY PRECIPITATION METHOD," *Asian Journal of Engineering and Applied Technology (AJEAT)*, vol. 2, pp. 66-70, 2014.
- [42] E. N. Kaufmann, "Characterization of Materials, 2 Volume Set," *Characterization of Materials, 2 Volume Set, by Elton N. Kaufmann (Editor)*, pp. 1392. ISBN 0-471-26882-8. Wiley-VCH, January 2003., p. 1392, 2003.
- [43] B. Fultz and J. M. Howe, *Transmission electron microscopy and diffractometry of materials*: Springer Science & Business Media, 2012.
- [44] A. LISENKOV, V. IVANOU, D. IVANOU, and E. STRELTSOV, "OF SeCu, se, HETEROSTRUCTURES," *Physics, Chemistry and Application of Nanostructures*, p. 442, 2000.
- [45] P. Patil and P. Patil, "Preparation of mixed oxide MoO₃-WO₃ thin films by spray pyrolysis technique and their characterisation," *Thin Solid Films*, vol. 382, pp. 13-22, 2001.
- [46] A. Sawaby, M. Selim, S. Marzouk, M. Mostafa, and A. Hosny, "Structure, optical and electrochromic properties of NiO thin films," *Physica B: Condensed Matter*, vol. 400, pp. 3412-3420, 2010.
- [47] K. Harish, H. B. Naik, P. P. Kumar, R. Vishwanath, and G. Y. Kumar, "Optical and photocatalytic properties of CdFe₂O₄ nanocatalysts: potential application in water treatment under solar light irradiation," *Arch. Appl. Sci. Res*, vol. 0, pp. 42-01, 2013.
- [48] M. Grätzel, "Dye-sensitized solar cells," *Journal of Photochemistry and Photobiology C: Photochemistry Reviews*, vol. 4, pp. 140-153, 2003.

Abstract

In recent years, dye sensitized solar cells (DSSC) are considered as a promising candidate for the development of next generation solar cells because they can be fabricated by simple and low cost techniques. TiO_2 in forms of nanostructured thin film or powder is the most successful photoanode in DSSC's. In this experimental thesis, TiO_2 photoanode was synthesized using spray pyrolysis and hydrothermal methods, and its structural, optical and morphological properties have been studied. Synthesized samples were characterized using field emission scanning electron microscopy (FESEM), X-ray diffraction (XRD), UV-Vis spectroscopy, solar simulator and PV-IV measurement system. For utilizing spray pyrolysis technique, three solutions with different concentrations of 4, 8 and 12 M were prepared. FESEM images of synthesized thin films revealed their sponge-like surface. The thickness of these samples were estimated, by FESEM system, to be 4.43, 4.05 and 1.51 nm for samples prepared using 4, 8 and 12 M of precursor solution concentrations, respectively. XRD pattern analysis showed that these samples have been grown in tetragonal crystal structure in anatase phase. Band gap of the samples was increased from 3.4 to 3.58 eV by increasing in the precursor solution concentration amount. Sample 4 M, which had better porosity, was used for the fabrication of solar cell device. The efficiency and filling factor of this device were measured to be about 4.27 and 0.44, respectively. Also, TiO_2 nanopowder was synthesized using hydrothermal method. FESEM images showed the formation of nanoparticles with the mean grain size of about 15 nm. XRD pattern revealed growth in both anatase and rutile phases, with rutile as a major phase. Band gap of the sample was calculated to be about 3.5 eV. Then, this photoanode was utilized for the fabrication of solar cell device and the efficiency and filling factor of this device were measured to be about 0.424 and 0.65, respectively. Finally, with the aim of increasing in the performance of TiO_2 as a photoanode, aluminum nitrate (1 and 1.5 mol%) was added to the precursor solution as dopant. Grain size was decreased to about

5 nm by increasing in the dopant amount. Also, band gap of sample was increased from 1.5 to 2.52 eV by increasing in the amount of impurity.

Keywords: Dye sensitized solar cell; Titanium dioxide; Spray pyrolysis; Hydrothermal



Shahrood University of Technology

Faculty of Physics and Nuclear Engineering

M.Sc. Thesis in Nano Physics

**Synthesis and Characterization of Undoped and Doped TiO₂
Nanostructures for Solar Cell Application**

By: Sadegh Bayat

Supervisor:

Dr. Mohammad Bagher Rahmani

August ۲۰۱۷