

عنوان مقاله:

بررسی محاسباتی سلول های خورشیدی حساس شده به رنگ با استفاده از رنگدانه کومارین 2883

محل انتشار:

چهارمین همایش پیل سوختی (سال: 1389)

تعداد صفحات اصل مقاله: 7

نویسندگان:

ام البنین مستجابی سرهنگی - دانشجوی کارشناسی ارشد دانشگاه علم و صنعت

سیدمجید هاشمیان زاده - دانشیار دانشگاه علم و صنعت

مرتضی مقیمی واسکسی - دانشجوی کارشناسی ارشد دانشگاه علم و صنعت

خلاصه مقاله:

هنده سه ، ساختار الکترونی رنگ کومارین NKX-2883 با دوگروه CN به عنوان پذیرنده در سل های خورشیدی حساس شده به رنگ توسط روش های محاسباتی مورد مطالعه و بررسی قرار گرفته است. طیف جذبی الکترونی بوسیله روش TD-DFT با مجموعه پایه های مختلف بررسی شده است. نتایج TD-DFT نشان داد که مجموعه پایه های PBE1PBE و MPW1PW91 مناسب تر از B3LYP برای محاسبه طیف جذبی الکترونی می باشند. و تطابق بیشتری با نتایج تجربی حاصل شده است. از آنجایی که حلال روی هندسه ساختار الکترونی و دیگر خصوصیات مولکول اثر میگذارد برای فهم این موضوع اثرات حلال با روش CPCM مورد بررسی قرار گرفته است. برای بررسی ترازهای انرژی هومو و لومو در محیط های گازی و حلال آنالیز NBO بکار گرفته شده است.

کلمات کلیدی:

سلهای خورشیدی حساس شده به رنگ، محاسبات تابع دانسیته چگالی، محاسبات تابع چگال وابسته به زمان، رنگ کومارین

لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلیکا:

<https://civilica.com/doc/116632>

