

สัญญาเลขที่ MRG5480273
โครงการ การศึกษาสมบัติทางโครงสร้างและอิเล็กทรอนิกส์ของสีย้อมไวแสงสำหรับเซลล์
แสงอาทิตย์อนุพันธ์โพลิโกเมอร์พาราฟีนิลีนไวนิลีนคาร์บอกซิลิกแอซิก
ด้วยเทคนิคการคำนวณทางทฤษฎีและการทดลอง
ผู้วิจัย ดร.ทรงวุฒิ สุรมิตร
นักวิจัยที่ปรึกษา ศ.ดร.สุภา หารหนองบัว

บทคัดย่อ

การวิจัยนี้เป็นการศึกษาสมบัติโฟโตฟิสิกส์และโฟโตไอโซเมอร์ไรเซชันของสีย้อมอนุพันธ์โพลิโกเมอร์พาราฟีนิลีนไวนิลีนคาร์บอกซิลิกแอซิกที่เป็นสีย้อมไวแสงสำหรับเซลล์แสงอาทิตย์ ด้วยระเบียบวิธีทางเคมีควอนตัมและการทดลอง สีย้อมไวแสงจะถูกสังเคราะห์และศึกษาสมบัติทางแสงเพื่ออธิบายความสามารถที่ใช้เป็นสีย้อมไวแสงสำหรับเซลล์แสงอาทิตย์ ผลการศึกษาทั้งจากการคำนวณทางเคมีควอนตัมและการทดลองพบว่าหมู่ฟังก์ชัน (side chain, spacer และ anchor group) เป็นส่วนสำคัญต่อการเพิ่มประสิทธิภาพการส่งผ่านอิเล็กตรอนและสมบัติการดูดกลืนแสงอาทิตย์ของสีย้อมอนุพันธ์โพลิโกเมอร์พาราฟีนิลีนไวนิลีนคาร์บอกซิลิกแอซิก

คำสำคัญ สีย้อมไวแสงสำหรับเซลล์ อนุพันธ์โพลิโกเมอร์พาราฟีนิลีนไวนิลีนคาร์บอกซิลิกแอซิก
ระเบียบวิธีคำนวณทางเคมีฟังก์ชันนอลที่ขึ้นกับเวลา

Grant No. MRG5180287

Title Theoretical and experimental investigation on structures and electronic properties of dye-sensitized solar cells oligo(para-phenylenevinylene) carboxylic acid and Its derivatives

Researcher Dr.Songwut Suramitr

Mentor Prof.Dr.Supa Hannongbua

Abstract

Photophysical properties and photoisomerization of of oligo(p-phenylenevinylene) carboxylic acid and its derivatives have been investigated to develop dye-sensitized solar cells (DSSCs) by the density functional theory methods (DFT) and experimental. The compound was prepared, and the optical spectra of molecules as well as transient spectra in photophysical properties and photoisomerization among three isomers were observed. The results shown that the effect of side chain, spacer and anchor group in this study enhance the efficiency of electron transfer and absorption of the sunlight for new synthetic materials.

Keywords: Dye-sensitized solar cells oligo(para-phenylenevinylene) carboxylic acid and Its derivatives, Time-depnedence density functional theory (TDDFT)