

Abstract

Project Code: RSA5780048

Project Title: Molecular Design of Simple D- π -A architecture as Potential Sensitizers for Highly Efficient Dye-Sensitized Solar Cells

(การออกแบบโครงสร้างโมเลกุลอย่างง่ายชนิด D- π -A เพื่อประยุกต์ใช้ในเซลล์แสงอาทิตย์ชนิดสีย้อมไวแสงที่มีประสิทธิภาพสูง)

Investigator: Associate Professor Siriporn Jungsuttiwong, Ubon Ratchathani University
รศ. ดร. ศิริพร จีงสุทธีวณิช มหาวิทยาลัยอุบลราชธานี

E-mail Address: siriporn.j@ubu.ac.th

Project Period: 3 years

The sun is probably the most important source of renewable energy available today. Especially, Thailand is located close to the equator near the equator. Transforming solar energy into electricity instead of using fossil energy sources is very important and interesting to the researchers all over the world. We focus on theoretical and computational study for designing and development of organic materials for use in dye sensitized solar cells (DSCs). Therefore it is of great interest to get insight into the molecular level understanding of the behavior and mechanism of DSCs. Our theoretical model was used as a tool to design and predict the properties of organic materials to make the research process directionally and progressively more accurately and quickly.

This study, we have developed a field prototype of the dye-sensitized solar cells derived from molecular modeling and structural calculations for screening before being synthesized in the laboratory. It can reduce the cost of chemicals, simplify synthesis planning process as well as saving time. It can also provide information that can explain the results of experiments at the electron and molecular level, enabling researchers to understand the key components that affect the performance of DSC cells. These are very useful for developing DSC cells. Our results demonstrate that use of computational design can to help the experimentalist for out looking future developments to identify organic sensitizers for highly efficient solar cells.

Keywords: Dye sensitized solar cells, organic materials, computational chemistry

บทคัดย่อ

แสงอาทิตย์เป็นแหล่งพลังงานหาศาลที่ใช้ได้เรียกว่าไม่มีวันหมด โดยเฉพาะประเทศไทยที่อยู่บริเวณใกล้เส้นศูนย์สูตรโลก การเปลี่ยนพลังงานแสงอาทิตย์เป็นพลังงานไฟฟ้าแทนการใช้แหล่งพลังงานจากฟอสซิลจึงมีความสำคัญและน่าสนใจเป็นอย่างมาก งานวิจัยหลักที่ดำเนินการอยู่เน้นการประยุกต์ใช้แบบจำลองโมเลกุลสามมิติ และการคำนวณด้วยเทคนิคทางเคมีคอมพิวเตอร์ขั้นสูงเพื่อการออกแบบและพัฒนาวัสดุโครงสร้างระดับนาโนสำหรับการใช้ในเซลล์แสงอาทิตย์ชนิดสีย้อมไวแสง ข้อมูลพื้นฐานสำคัญในการเข้าใจเชิงลึกเกี่ยวกับพฤติกรรมและกลไกการเกิดปฏิกิริยาเคมี โดยเฉพาะเมื่อวัสดุมีขนาดเล็กในระดับนาโนเมตร ซึ่งข้อมูลเหล่านี้วัดได้ยากหรือบางกรณีไม่สามารถวัดได้โดยเครื่องมือในห้องปฏิบัติการทดลอง ดังนั้นการจำลองโมเลกุลสามมิติ และการคำนวณด้วยเทคนิคทางเคมีคอมพิวเตอร์ขั้นสูงนี้จึงถูกนำมาใช้เป็นเครื่องมือในการออกแบบและทำนายสมบัติของวัสดุสารอินทรีย์เพื่อทำให้กระบวนการวิจัยมีทิศทางและมีความก้าวหน้าได้อย่างถูกต้องและรวดเร็วมากขึ้น

โครงการวิจัยนี้ นักวิจัยได้พัฒนาต้นแบบภาคสนามของเซลล์แสงอาทิตย์ชนิดสีย้อมไวแสงที่ได้จากการออกแบบจำลองโมเลกุลและการคำนวณโครงสร้างเพื่อคัดกรองและคัดเลือกโครงสร้างสีย้อมไวแสงที่มีศักยภาพสูงก่อนนำไปสังเคราะห์จริงในห้องปฏิบัติการ โดยจะสามารถลดค่าใช้จ่ายด้านสารเคมี ลดความยุ่งยากในกระบวนการวางแผนการสังเคราะห์ และประหยัดเวลาลงถูกลงผิด นอกจากนั้นการคำนวณเคมี ยังสามารถให้ข้อมูลที่สามารถอธิบายผลที่ได้จากการทดลองในระดับอิเล็กทรอนิกส์ และโมเลกุล ทำให้นักวิจัยสามารถเข้าใจองค์ประกอบสำคัญที่มีผลต่อประสิทธิภาพของเซลล์ DSC ซึ่งสิ่งเหล่านี้เป็นประโยชน์อย่างมากในการพัฒนาเซลล์ DSC ที่มีประสิทธิภาพยิ่งขึ้นในอนาคต

คำหลัก : เซลล์แสงอาทิตย์ชนิดสีย้อมไวแสง, วัสดุสารอินทรีย์, เคมีคำนวณ