

بِسْمِ اللَّهِ الرَّحْمَنِ الرَّحِيمِ



دانشگاه سقز

دانشکده علوم - گروه شیمی

پایان نامه کارشناسی ارشد

گرایش شیمی معدنی

سنتز و شناسایی رنگدانه‌های جدید حساس کننده نور خورشید بر پایه کمپلکس‌های حاوی
لیگاندهای کربوکسیلیک اسید

استاد راهنما:

دکتر هاشم شهروس وند

استاد مشاور:

دکتر محمدحسین رسولی فرد

نگارش:

لیلا نجفی

تقدیرم به پدر بزرگوار و مادر چه بر بازم...

آن دو فرشته‌ای که از خوارتدایشان گذشتند، سنجی‌ها را به جان خریدند و خود را در پربلای
مشکلات و نااملائیات کردند تا من به جایگاه بی‌گناهان در آن ایستاده‌ام بر سه‌م.

سگس و رساس خدا را که بزرگترین امید و یاور در هر لحظه زندگیست.

ارتداد کرامن جناب آقای دکتر شهروس وند

در روزی، تلاش و کوشش حضرتعالی در تعلیم و تربیت و انتقال معلومات و تجربیات ارزشمند در کنار
برقراری رابطصمیمانه و هدفشایان و درک شرایط دانشجو و بیان حقیقتها قابل ستایش است
این جناب بر خود وظیفه میدانم در کوتاهی کردی از زحمات و خدمات ارزشمند شما ارتداد کرامن قدر که از
نیچ گمانی در این عرصه بر من دریغ نیند و در صورت راهنمایی این رساله را بر عهده گرفتاید، تقدیر و
تشکر نمایم.

از خداوند متعال برایمان سلامتی، موفقیت و بهره‌یاد دادن را مسئلت دارم.

چکیده:

پایان نامه حاضر متشکل از ۵ بخش می‌باشد: در بخش اول، سنتز و شناسایی لیگاند 5-Phenyl-1H-tetrazole و همین طور سنتز و شناسایی ۶ کمپلکس از این لیگاند با فلز RuCl_3 و لیگاندهای کمکی 1,10-phenanthroline، 2,2'-bipyridine، bathophenanthroline، KSCN و الکترولومینسانس (PL) و الکترولومینسانس (EL) این کمپلکس‌ها برای استفاده در دیوده‌های نور گسیل آلی (OLED)، مورد مطالعه قرار گرفت. علی‌رغم نشر قرمز کمپلکس‌های روتنیوم در OLED ها، کمپلکس‌های این گروه دارای نشر غیرمعمول سبز و زرد با مقدار بیشینه طول موج EL در ناحیه ۵۰۰ nm و ۵۷۵ nm و همچنین بیشینه شدت لومینسانس 186 cd/m^2 و 208 cd/m^2 می‌باشند. محاسبات DFT در این کمپلکس‌ها نشان دهنده این امر است که، نوع نشر حاصل از این کمپلکس‌ها از مکانیسم فورستر تبعیت می‌کند. در بخش دوم سنتز و شناسایی ۶ کمپلکس از لیگاند 5-Phenyl-1H-tetrazole با فلز YCl_3 شرح داده شده است. تمامی کمپلکس‌های سنتز شده دارای الکترولومینسانس در ناحیه near-IR و همچنین نشر سبز در ناحیه ۷۵۰-۵۵۰ nm می‌باشند. بالاترین شدت لومینسانس 298 cd/m^2 و بازده تبدیل cd/A ۰.۸۲ در ولتاژ اعمالی ۱۸۷ برای کمپلکس‌های این گروه به دست آمد. محاسبات DFT یون فلزی ایتیوم و لیگاند-های تترازول و 1,10-phenanthroline و 2,2'-bipyridine نشان دهنده یک هماهنگی خوب بین حالت سه تایی لیگاند و سطوح نشری ^4D یون فلزی Y(III) است. در بخش سوم این پایان نامه، سنتز و شناسایی لیگاند 5-(2-pyridyl)-tetrazole و همین طور سنتز و شناسایی ۶ کمپلکس از این لیگاند با فلز RuCl_3 و لیگاندهای کمکی 1,10-phenanthroline، 2,2'-bipyridine، bathophenanthroline، KSCN شرح داده شده است. طیف نشری EL در این کمپلکس‌ها، نواری پهن در ناحیه ۹۰۰-۴۵۰ nm نشان می‌دهند. محاسبات CIE، نشان دهنده نشر سبز-آبی و نارنجی در کمپلکس‌های این گروه می‌باشد.

در بخش چهارم این پایان نامه سنتز و شناسایی لیگاند 5-(4-Carboxy-phenyl)tetrazole و ۶ کمپلکس از این لیگاند با فلز روتنیوم شرح داده شده است. در این بخش کمپلکس‌های جدیدی از روتنیوم با نشر سبز-آبی و بیشینه طول موج EL در محدوده ۵۱۰ nm گزارش شده است. نشر PL در این کمپلکس‌ها سه نوار در بیشینه طول موج ۵۰۰ nm و ۶۵۰ nm و ۷۰۰ nm نشان می‌دهند که ناشی از دو انتقال $^1\text{MLCT}$ و $^3\text{MLCT}$ از لیگاندهای کی لیت است. این امر نشان دهنده دو نشر همزمان قرمز و سبز-آبی در این کمپلکس‌ها می‌باشد. همین طور در این بخش

کاربرد این کمپلکس‌ها به عنوان حساس کننده نور خورشید در سلول‌های خورشیدی با رنگینه‌های حساس به نور (DSSC) در الکترولیت یداید - تری یداید و نیمه رسانای TiO_2 به عنوان الکتروود کار و پلاتین به عنوان الکتروود مخالف، تحت تابش استاندارد AM ۱.۵ مورد مطالعه قرار گرفت. بهترین بازده تبدیل $\% 1.08$ با ضریب پیرشوندگی ۴۵ و جریان مدار کوتاه ۳.۲۴ و ولتاژ مدار باز ۰.۶۵ و $\text{IPCE} = 32$ برای کمپلکس $[\text{Ru}(\text{TZBA})(\text{Pytz})_2(\text{NCS})]$ بدست آمد. محاسبات DFT در این بخش، نشان دهنده تاثیر لیگاند 5-(2-pyridyl)-tetrazole در سطح انرژی HOMO رنگدانه و افزایش بازده سل می‌باشد.

در بخش پنجم این پایان نامه، سنتز و شناسایی لیگاند 5-[N-acetato(2-pyridyl)]tetrazole و ۶ کمپلکس این لیگاند با فلز روتنیوم و لیگاندهای کمکی فنانترولین، بی پیریدین و تیوسیانات شرح داده شده است. کاربرد این کمپلکس‌ها به عنوان رنگدانه حساس کننده نور خورشید در DSSC ها، تحت تابش استاندارد AM ۱.۵ مورد مطالعه قرار گرفت. بهترین بازده تبدیل $\% 0.47$ با ضریب پیرشوندگی $\% 37$ و جریان مدار کوتاه ۲.۰۴ و ولتاژ مدار باز ۰.۵۵ برای کمپلکس‌های این گروه بدست آمد. این کمپلکس علاوه بر 2, 2'-bipyridine در ساختار خود دارای لیگاند 5-(2-pyridyl)-tetrazole نیز می‌باشد. طیف الکترو لومینسانس این کمپلکس‌ها دارای نثری در ناحیه ۶۰۰ nm است که نشان دهنده نشر قرمز در این کمپلکس‌ها می‌باشد. ساختار تمامی کمپلکس‌ها و لیگاندهای سنتز شده در این پایان نامه، توسط طیف سنجی‌های ICP-AES, PL, $^1\text{H-NMR}$, UV-vis, FT-IR, و CHN شناسایی گردید.

<u>۲</u>	<u>فصل اول: مقدمه</u>
<u>۲</u>	<u>۱-۱ مقدمه‌ای بر سلول خورشیدی</u>
<u>۳</u>	<u>۱-۱-۱ تاریخچه سلول‌های خورشیدی رنگدانه‌ای</u>
<u>۴</u>	<u>۲-۱-۱ اجزای سازنده DSSC ها</u>
<u>۵</u>	<u>۳-۱-۱ عملکرد DSSC ها</u>
<u>۸</u>	<u>۴-۱-۱ ویژگی حساس کننده‌ها</u>
<u>۱۱</u>	<u>۵-۱-۱ بازده DSSC ها</u>
<u>۱۲</u>	<u>۶-۱-۱ روش آماده سازی سل خورشیدی</u>
<u>۱۲</u>	<u>۱-۶-۱-۱ ساخت کاتد</u>
<u>۱۳</u>	<u>۲-۶-۱-۱ تهیه الکترولیت</u>
<u>۱۳</u>	<u>۳-۶-۱-۱ ساخت فوتو آند</u>
<u>۱۳</u>	<u>۴-۶-۱-۱ ساخت خمیر TiO₂</u>
<u>۱۴</u>	<u>۵-۶-۱-۱ لایه نشانی TiO₂ بر روی FTO به روش تیغه</u>
<u>۱۴</u>	<u>۶-۶-۱-۱ لایه نشانی رنگدانه روی TiO₂</u>
<u>۱۴</u>	<u>۷-۶-۱-۱ اتصال کاتد و آند به هم</u>
<u>۱۵</u>	<u>۷-۱-۱ جایگاه فعلی DSSC ها</u>

- ۲-۱ مقدمه ای بر پدیده الکترو لومینسانس ۱۶
- ۳-۱ دیودهای نور گسیل آلی (OLED) ۱۶
- ۱-۳-۱ ساختار OLED ها ۱۷
- ۱-۱-۳-۱ آند (ITO) ۱۸
- ۲-۱-۳-۱ کاتد ۱۹
- ۳-۱-۳-۱ لایه انتقال دهنده الکترون و حفره ۱۹
- ۲-۳-۱ عملکرد OLED ها ۲۰
- ۳-۳-۱ سطوح انرژی لایه‌های مختلف در OLED ۲۱
- ۴-۳-۱ نمودار جریان - ولتاژ OLED ۲۳
- ۵-۳-۱ پارامترهای مهم در OLED ۲۴
- ۶-۳-۱ روش‌های آماده سازی و لایه نشانی سل‌ها در OLED ۲۵
- ۷-۳-۱ کاربرد OLED ها ۲۶
- ۸-۳-۱ مزایا و معایب OLED ها ۲۷
- ۴-۱ ایتريوم ۲۸
- ۵-۱ روتنيوم ۳۰
- ۶-۱ تترازول ها (tetrazole) ۳۳
- ۱-۶-۱ شیمی کوئوردیناسیون تترازول ها ۳۴
- ۲-۶-۱ تاریخچه سنتز تترازول ها ۳۵
- ۳-۶-۱ برخی از کمپلکس‌های تترازول ۳۶

- ۳۷..... 5-Phenyl-1H-tetrazole های کمپلکس های ۱-۳-۶-۱
- ۳۷.....5-Phenyl-1H-tetrazole و Palladium کمپلکس ۱-۱-۳-۶-۱
- ۳۷.....5-Phenyl-1H-tetrazole و Ytterbium, Erbium کمپلکس ۲-۱-۳-۶-۱
- ۳۸..... 5-Phenyl-1H-tetrazole و Platinum کمپلکس ۳-۱-۳-۶-۱
- ۳۸.....5-Phenyl-1H-tetrazole و Titanium کمپلکس ۴-۱-۳-۶-۱
- ۳۹.....5-(2-pyridyl)-tetrazole های کمپلکس های ۲-۳-۶-۱
- ۳۹..... 5-(2-pyridyl)-tetrazole و Iridium کمپلکس ۱-۲-۳-۶-۱
- ۳۹.....5-(2-pyridyl)-tetrazole و Manganese کمپلکس ۲-۲-۳-۶-۱
- ۴۰..... 5-(2-pyridyl)-tetrazole و Copper کمپلکس ۳-۲-۳-۶-۱
- ۴۰..... 5-(2-pyridyl)-tetrazole و Ytterbium , Yttrium کمپلکس ۴-۲-۳-۶-۱
- ۴۱..... 5-(2-pyridyl)-tetrazole و Cobalt کمپلکس ۵-۲-۳-۶-۱
- ۴۱.....5-(4-Carboxy-phenyl)tetrazole های کمپلکس های ۳-۳-۶-۱
- ۴۱.....5-(4-Carboxy-phenyl)tetrazole و Cadmium کمپلکس ۱-۳-۳-۶-۱
- ۴۲.....5-(3-Carboxy-phenyl)tetrazole و Zinc کمپلکس ۲-۳-۳-۶-۱
- ۴۲..... 5-(4-Carboxy-phenyl)tetrazole و Manganese کمپلکس ۳-۳-۳-۶-۱
- ۴۳..... 5-(3-Carboxy-phenyl)tetrazole و Copper-Holmium کمپلکس ۴-۳-۳-۶-۱
- ۴۴..... 5-[N-acetato(2-pyridyl)]tetrazole های کمپلکس های و مشتقات آن ۴-۳-۶-۱
- ۴۴..... 5-[N-acetato(4-pyridyl)]tetrazole و Barium , Calcium کمپلکس ۱-۴-۳-۶-۱

- ۴۴.....5-[N-acetato(4-pyridyl)]tetrazole و Zinc کمپلکس ۲-۴-۳-۶-۱
- ۴۵.....5-[(2-pyridyl)]tetrazole-2-acetic acid و Cadmium کمپلکس ۳-۴-۳-۶-۱
- ۴۶..... 5-[(2-pyridyl)]tetrazole-2-acetic acid و Manganese کمپلکس ۴-۴-۳-۶-۱
- ۴۶.....5-[N-acetato(4-pyridyl)]tetrazole و Palladium کمپلکس ۵-۴-۳-۶-۱
- ۴۷..... ۷-۱ جمع بندی
- ۴۸..... ۸-۱ منابع و مراجع فصل اول
- ۵۲.....Ru(II) و 5-Phenyl-1H-tetrazole های کمپلکس غیر معمول الکترو لومینسانس فصل دوم: الکترو لومینسانس غیر معمول کمپلکس های 5-Phenyl-1H-tetrazole و Ru(II)
- ۵۳..... پیشگفتار
- ۵۴..... 5-Phenyl-1H-tetrazole(Tz) سنتز لیگاند ۱-۲
- ۵۵..... 5-Phenyl-1H-tetrazole و Ru(II) های کمپلکس سنتز ۲-۲
- ۵۶.....[Ru (Tz)₂ (bpy)(SCN)₂] سنتز کمپلکس ۱-۲-۲
- ۵۷.....[Ru(Tz)₂ (Phen)(SCN)₂] سنتز کمپلکس ۲-۲-۲
- ۵۸.....[Ru(Tz)₂ (BPhen)(SCN)₂] سنتز کمپلکس ۳-۲-۲
- ۵۹.....[Ru(Tz)(bpy)(Phen)(SCN)] سنتز کمپلکس ۴-۲-۲
- ۶۰.....[Ru(Tz)(bpy)₂ (SCN)] سنتز کمپلکس ۵-۲-۲
- ۶۱.....5-Phenyl-1H-tetrazole لیگاند IR طیف ۳-۲ بررسی
- ۶۲..... IR کمپلکس های ۱ تا ۵ ۴-۲ بررسی طیف
- ۶۲.....[Ru(Tz)₂ (bpy)(SCN)₂] کمپلکس ۱-۴-۲

<u>۶۳</u>	[Ru(Tz) ₂ (Phen)(SCN) ₂] کمپلکس	<u>۲-۴-۲</u>
<u>۶۴</u>	[Ru(Tz) ₂ (BPhen)(SCN) ₂] کمپلکس	<u>۳-۴-۲</u>
<u>۶۵</u>	[Ru(Tz)(bpy)(Phen)(SCN)] کمپلکس	<u>۴-۴-۲</u>
<u>۶۷</u>	[Ru(Tz)(bpy) ₂ (SCN)] کمپلکس	<u>۵-۴-۲</u>
<u>۶۹</u>	بررسی طیف UV-vis لیگاند 5-Phenyl-1H-tetrazole و کمپلکس های ۱ تا ۵	<u>۵-۲</u>
<u>۷۱</u>	بررسی طیف ¹ H-NMR لیگاند 5-Phenyl-1H-tetrazole و کمپلکس های ۱ تا ۵	<u>۶-۲</u>
<u>۷۶</u>	بررسی نتایج CHN و ICP کمپلکس های ۴-۱	<u>۷-۲</u>
<u>۷۷</u>	بررسی نتایج Photoluminescence (PL) و Electroluminescence (EL)	<u>۸-۲</u>
<u>۸۳</u>	محاسبات DFT	<u>۹-۲</u>
<u>۸۶</u>	جمع بندی	<u>۱۰-۲</u>
<u>۸۷</u>	منابع و مراجع فصل دوم	<u>۱۱-۲</u>
<u>۸۸</u>	فصل سوم: الکترو لومینسانس سبز و near-IR در کمپلکس های 5-Phenyl-1H-tetrazole و Y(III)	<u>۱۱-۲</u>
<u>۸۹</u>	پیشگفتار	<u>۱۱-۲</u>
<u>۹۰</u>	۱-۳ سنتز لیگاند 5-Phenyl-1H-tetrazole(Tz)	<u>۱۱-۲</u>
<u>۹۰</u>	۲-۳ سنتز کمپلکس های Y(III) و 5-Phenyl-1H-tetrazole	<u>۱۱-۲</u>
<u>۹۱</u>	۱-۲-۳ سنتز کمپلکس [Y(Tz) ₃ (phen) ₂ (H ₂ O)]	<u>۱۱-۲</u>
<u>۹۲</u>	۲-۲-۳ سنتز کمپلکس [Y(Tz) ₃ (bpy) ₂ (H ₂ O)]	<u>۱۱-۲</u>
<u>۹۳</u>	۳-۲-۳ سنتز کمپلکس [Y(Tz) ₂ (phen) ₂ (SCN)(H ₂ O)]	<u>۱۱-۲</u>

<u>۹۴</u>[Y(Tz) ₂ (bpy) ₂ (SCN)(H ₂ O)] سنتز کمپلکس	<u>۴-۲-۳</u>
<u>۹۵</u>[Y(Tz) ₄ (phen) (SCN)(H ₂ O)] سنتز کمپلکس	<u>۵-۲-۳</u>
<u>۹۶</u>[Y(Tz) ₄ (bpy) (SCN)(H ₂ O)] سنتز کمپلکس	<u>۶-۲-۳</u>
<u>۹۷</u> ۶ تا ۱ IR کمپلکس های	<u>۳-۳</u>
<u>۹۸</u>[Y(Tz) ₃ (phen) ₂ (H ₂ O)] کمپلکس	<u>۱-۳-۳</u>
<u>۹۹</u>[Y(Tz) ₃ (bpy) ₂ (H ₂ O)] کمپلکس	<u>۲-۳-۳</u>
<u>۱۰۰</u>[Y(Tz) ₂ (phen) ₂ (SCN)(H ₂ O)] کمپلکس	<u>۳-۳-۳</u>
<u>۱۰۱</u>[Y(Tz) ₂ (bpy) ₂ (SCN)(H ₂ O)] کمپلکس	<u>۴-۳-۳</u>
<u>۱۰۲</u>[Y(Tz) ₄ (phen) (SCN)(H ₂ O)] کمپلکس	<u>۵-۳-۳</u>
<u>۱۰۳</u>[Y(Tz) ₄ (bpy) (SCN)(H ₂ O)] کمپلکس	<u>۶-۳-۳</u>
<u>۱۰۴</u> UV-vis لیگاند کمپلکس های ۱ تا ۶	<u>۴-۳</u>
<u>۱۰۷</u> ¹ H-NMR کمپلکس های ۱ تا ۶	<u>۵-۳</u>
<u>۱۱۱</u> ICP و CHN نتایج کمپلکس های ۴ - ۱	<u>۶-۳</u>
<u>۱۱۲</u> (EL) Electroluminescence و (PL) Photoluminescence نتایج	<u>۷-۳</u>
<u>۱۲۳</u> جمع بندی	<u>۸-۳</u>
<u>۱۲۴</u> منابع و مراجع فصل سوم	<u>۹-۳</u>
<u>۱۲۶</u> Ru(II) و 5-(2-pyridyl)-tetrazole های در کمپلکس	<u>فصل چهارم: نشر سبز-آبی</u>
<u>۱۲۷</u>	<u>پیشگفتار</u>

- ۱۲۸ ۱-۴ سنتز لیگاند 5-(2-pyridyl)-tetrazole (Pytz)
- ۱۲۹ ۲-۴ سنتز کمپلکس‌های Ru(II) و 5-(2-pyridyl)-tetrazole (Pytz)
- ۱۳۰ ۱-۲-۴ سنتز کمپلکس $[\text{Ru}(\text{Pytz})(\text{Phen})(\text{SCN})_2]$
- ۱۳۱ ۲-۲-۴ سنتز کمپلکس $[\text{Ru}(\text{Pytz})_3]$
- ۱۳۲ ۳-۲-۴ سنتز کمپلکس $[\text{Ru}(\text{Pytz})_2(\text{bpy})]$
- ۱۳۳ ۴-۲-۴ سنتز کمپلکس $[\text{Ru}(\text{Pytz})(\text{Bphen})(\text{SCN})_2]$
- ۱۳۴ ۵-۲-۴ سنتز کمپلکس $[\text{Ru}(\text{Pytz})(\text{bpy})(\text{SCN})_2]$
- ۱۳۵ ۶-۲-۴ سنتز کمپلکس $[\text{Ru}(\text{Pytz})_2(\text{Bphen})]$
- ۱۳۶ ۳-۴ بررسی طیف IR لیگاند 2-cyanopyrazine (CN-py)
- ۱۳۶ ۴-۴ بررسی طیف IR لیگاند 5-(2-pyridyl)-tetrazole (Pytz)
- ۱۳۸ ۵-۴ بررسی طیف IR کمپلکس‌های ۱ تا ۶
- ۱۳۸ ۱-۵-۴ کمپلکس $[\text{Ru}(\text{Pytz})(\text{Phen})(\text{SCN})_2]$
- ۱۳۹ ۲-۵-۴ کمپلکس $[\text{Ru}(\text{Pytz})_3]$
- ۱۴۰ ۳-۵-۴ کمپلکس $[\text{Ru}(\text{Pytz})_2(\text{bpy})]$
- ۱۴۱ ۴-۵-۴ کمپلکس $[\text{Ru}(\text{Pytz})(\text{Bphen})(\text{SCN})_2]$
- ۱۴۲ ۵-۵-۴ کمپلکس $[\text{Ru}(\text{Pytz})(\text{bpy})(\text{SCN})_2]$
- ۱۴۳ ۶-۵-۴ کمپلکس $[\text{Ru}(\text{Pytz})_2(\text{Bphen})]$
- ۱۴۵ ۶-۴ بررسی طیف UV-vis لیگاند 5-(2-pyridyl)-tetrazole (Pytz) و کمپلکس‌های ۱ تا ۶
- ۱۴۹ ۷-۴ بررسی طیف $^1\text{H-NMR}$ لیگاند 5-(2-pyridyl)-tetrazole و کمپلکس شماره ۲

<u>۱۵۱</u>	۸-۴ بررسی نتایج CHN و ICP کمپلکس‌های ۱-۵
<u>۱۵۲</u>	۹-۴ بررسی نتایج (EL) Electroluminescence و (PL) Photoluminescence
<u>۱۵۷</u>	۱۰-۴ محاسبات DFT
<u>۱۶۲</u>	۱۱-۴ جمع بندی
<u>۱۶۳</u>	۱۲-۴ منابع و مراجع فصل چهارم
5-	فصل پنجم: رنگدانه‌های حساس کننده نور خورشید بر پایه کمپلکس‌های Ru(II) و
<u>۱۶۵</u>	(4-Carboxy-phenyl)tetrazole
<u>۱۶۶</u>	پیشگفتار
<u>۱۶۷</u>	۱-۵ سنتز لیگاند 5-(4-Carboxy-phenyl)tetrazole (TZBA)
<u>۱۶۹</u>	۲-۵ استری شدن لیگاند 5-(4-Carboxy-phenyl)tetrazole (TZBA)
<u>۱۷۰</u>	۳-۵ سنتز کمپلکس‌های Ru(II) و 5-(4-Carboxy-phenyl)tetrazole (TZBA)
<u>۱۷۲</u>	۱-۳-۵ سنتز کمپلکس $[Ru(TZBA)_2(Phen)_2]$
<u>۱۷۳</u>	۲-۳-۵ سنتز کمپلکس $[Ru(TZBA)(Phen)_2(SCN)]$
<u>۱۷۴</u>	۳-۳-۵ سنتز کمپلکس $[Ru(TZBA)_2(bpy)_2]$
<u>۱۷۵</u>	۴-۳-۵ سنتز کمپلکس $[Ru(TZBA)(Phen)(Pytz)(SCN)]$
<u>۱۷۶</u>	۵-۳-۵ سنتز کمپلکس $[Ru(TZBA)(bpy)(Pytz)(SCN)]$
<u>۱۷۷</u>	۶-۳-۵ سنتز کمپلکس $[Ru(TZBA)(Pytz)_2(SCN)]$
<u>۱۷۸</u>	۴-۵ بررسی طیف IR لیگاند 4-cyano-benzoic acid (CN-BA)

۱۷۹	۵-۵ بررسی طیف IR لیگاند 5-(4-Carboxy-phenyl)tetrazole (TZBA)
۱۸۱	۶-۵ بررسی طیف IR کمپلکس‌های ۱ تا ۶
۱۸۱	۱-۶-۵ کمپلکس $[\text{Ru}(\text{TZBA})_2(\text{Phen})_2]$
۱۸۲	۲-۶-۵ کمپلکس $[\text{Ru}(\text{TZBA})(\text{Phen})_2(\text{NCS})]$
۱۸۳	۳-۶-۵ کمپلکس $[\text{Ru}(\text{TZBA})_2(\text{bpy})_2]$
۱۸۴	۴-۶-۵ کمپلکس $[\text{Ru}(\text{TZBA})(\text{Phen})(\text{Pytz})(\text{NCS})]$
۱۸۵	۵-۶-۵ کمپلکس $[\text{Ru}(\text{TZBA})(\text{bpy})(\text{Pytz})(\text{NCS})]$
۱۸۵	۶-۶-۵ کمپلکس $[\text{Ru}(\text{TZBA})(\text{Pytz})_2(\text{NCS})]$
۱۸۷	۷-۵ بررسی طیف UV-vis لیگاند 5-(4-Carboxy-phenyl)tetrazole و کمپلکس‌های ۱ تا ۶
۱۸۹	۸-۵ بررسی طیف $^1\text{H-NMR}$ کمپلکس ۳ و ۴
۱۹۲	۹-۵ بررسی نتایج CHN و ICP کمپلکس‌های ۱-۶
۱۹۳	۱۰-۵ محاسبات فتولتائیک
۲۰۶	۱۱-۵ بررسی نتایج (EL) Electroluminescence و (PL) Photoluminescence
۲۱۵	۱۲-۵ جمع بندی
۲۱۶	۱۳-۵ منابع و مراجع فصل پنجم

۵- فصل ششم: رنگدانه‌های حساس کننده نور خورشید بر پایه کمپلکس‌های Ru(II) و

۲۱۹	$[\text{N-acetato}(2\text{-pyridyl})]\text{tetrazole}$
---------------------	--

۲۲۰	پیشگفتار
---------------------	----------

- [۲۲۱](#) 5-[N-acetato(2-pyridyl)]tetrazole (PTA) سنتز لیگاند [۱-۶](#)
- [۲۲۲](#) 5-[N-acetato(2-pyridyl)]tetrazole (PTA) استری شدن لیگاند [۲-۶](#)
- [۲۲۳](#) 5-[N-acetato(2-pyridyl)]tetrazole (PTA) و Ru(II) سنتز کمپلکس‌های [۳-۶](#)
- [۲۲۳](#) [Ru(PTA) (Phen) (SCN)₂] سنتز کمپلکس [۱-۳-۶](#)
- [۲۲۴](#) [Ru(PTA) (Phen)₂] سنتز کمپلکس [۲-۳-۶](#)
- [۲۲۵](#) [Ru(PTA) (bpy)(SCN)₂] سنتز کمپلکس [۳-۳-۶](#)
- [۲۲۶](#) [Ru(PTA)₂ (phen)]⁺² 2BF₄⁻ سنتز کمپلکس [۴-۳-۶](#)
- [۲۲۷](#) [Ru(PTA)₂ (bpy)]⁺² 2BF₄⁻ سنتز کمپلکس [۵-۳-۶](#)
- [۲۲۸](#) [Ru(PTA) (bpy)(Pytz)] سنتز کمپلکس [۶-۳-۶](#)
- [۲۲۹](#) 5-[N-acetato(2-pyridyl)]tetrazole (PTA) لیگاند IR طیف بررسی [۴-۶](#)
- [۲۳۰](#) IR کمپلکس‌های ۱ تا ۶ بررسی طیف [۵-۶](#)
- [۲۳۰](#) [Ru(PTA) (Phen) (SCN)₂] کمپلکس [۱-۵-۶](#)
- [۲۳۱](#) [Ru(PTA) (Phen)₂] کمپلکس [۲-۵-۶](#)
- [۲۳۲](#) [Ru(PTA) (bpy)(SCN)₂] کمپلکس [۳-۵-۶](#)
- [۲۳۳](#) [Ru(PTA)₂ (phen)]⁺² 2BF₄⁻ کمپلکس [۴-۵-۶](#)
- [۲۳۳](#) [Ru(PTA)₂ (bpy)]⁺² 2BF₄⁻ کمپلکس [۵-۵-۶](#)
- [۲۳۴](#) [Ru(PTA) (bpy)(Pytz)] کمپلکس [۶-۵-۶](#)
- [۲۳۶](#) 5-[N-acetato(2-pyridyl)]tetrazole و کمپلکس‌های ۱-۶ UV-vis طیف لیگاند بررسی [۶-۶](#)
- [۲۳۸](#) 5-[N-acetato(2-pyridyl)]tetrazole لیگاند ¹H-NMR طیف بررسی [۷-۶](#)

- ۲۴۰ ۸-۶ بررسی نتایج CHN و ICP کمپلکس‌های ۱-۶
- ۲۴۱ ۹-۶ محاسبات فتوولتائیک
- ۲۴۸ ۱۰-۶ محاسبه pK_a
- ۲۵۱ ۱۱-۶ بررسی نتایج Electroluminescence(EL)
- ۲۵۳ ۱۲-۶ جمع بندی
- ۲۵۴ ۱۳-۶ منابع و مراجع فصل ششم

DSSC : dye sensitized solar cells.

HOMO: highest occupied molecular orbital.

LUMO: lowest occupied molecular orbital.

OLED : Organic light emitting device.

PLED : Polymer light emitting device.

HTL : hole transporting layer.

ETL : electron transporting layer.

EML: emitting layer.

ITO : tin-doped indium oxide (typically 90% In_2O_3 , 10% SnO_2).

FTO: Fluorine-doped tin oxide ($\text{SnO}_2\text{:F}$).

PEDOT:PSS : poly(3,4-ethylenedi-oxythiophene):poly(styrenesulfonate).

PVK: (polyvinyl carbazole).

PBD : 2-(4-biphenyl)-5-(4-t-butyl-phenyl)-1,3,4-oxadiazole).

Alq_3 : (tris-8-hydroxy quinoline aluminum).

LCD: liquid crystal display.

Y: Yttrium.

Ru: Ruthenium.

PL : Photoluminescence.

EL : Electroluminescence.

m-bpy : 4-methyl-2,2'-bipyridine.

dtb-bpy : 4,4'-di-tert-butyl-2,2'-bipyridine.

dpen-bpy : 4,4'-di-n-pentyl-2,2'-bipyridine.

DIM : 4,7-dimethyl-1,10-phenanthroline.

PBIm-H : 2-(2-pyridyl)-1H-benzoimidazole.

Tpy: 2,2',6',2''-terpyridine.

tpy-COOEt : 2,2',6',2'', terpyridine-4'-carboxylic acid ethyl ester.

DM-bpy : 4,4'-dimethyl-2,2'- bipyridine.

dbeb : 4,4'-dibutyl ester-2,2'-bipyridine.

Pbq: 2,3-bis(2-pyridyl)benzoquinoxaline.

Acac : acetylacetone.

trz : 2-phenyl-4,6-dipyridin-2-yl-1,3,5-triazine.

RuTRu : bis-2,2'-bipyridyl-ruthenium-bis-[2-((E)-4'-methyl-2,2'-bipyridinyl-4)-ethenyl]-thienyl-bis-2,2'-bipyridyl-ruthenium tetra hexafluorophosphate.

Mt-bpy : 4-methyl-4'-(2-thienylethenyl)-2,2'-bipyridine.

aa-bpy: Acrylic acid 4'-acryloyloxymethyl-2,2'-bipyridinyl-4-ylmethyl ester.

im-phen : 1,2-bis(4-(1H-imidazo[4,5-f][1,10]phenanthroline-2-yl)phenoxy)ethane.

Eh-bpy : 4,4'-bis(3-ethylheptyl)-2,2'-bipyridine.

Hmh-bpy : 4-dihexylmethyl-4'-heptyl-2,2'-bipyridine.

H2MPy3,4DMPP : meso-tris-3,4-dimethoxyphenyl-mono-(4-pyridyl)porphyrin.

4-TBN : 4-(1H-tetrazol-5-yl)benzotrile.

BTB : bis(1H-tetrazol-5-yl)benzene.

bpy : 2,2'-bipyridine.

C₂ O₄²⁻ : oxalate ion.

S₂O₈²⁻ : persulfate or peroxydisulfate.

TPrA : tri-n-propylamine.

dmbp : 4,4'-Me₂bpy and DM-bpy = 4,4'-dimethyl-2,2'-bipyridine.

phen : 1,10-phenanthroline.

terpy : 2,2',2''-terpyridine.

TPTZ : 2,4,6-tripyridyl-2-triazine.

bpz : 2,2'-bipyrazine.

dp-bpy : 4,4'-biphenyl-2,2'-bipyridyl.

dp-phen : 4,7-diphenyl-1,10-phenanthroline.

Dmphen : 4,7-dimethyl-1,10-phenanthroline.

bphb : 1,4-bis(4'-methyl-2,2'-bipyridin-4-yl)benzene.

AZA-bpy : 4-(N-aza-18-crown-6-methyl-2,2'-bipyridine).

CE-bpy: bipyridine ligand where a crown ether (15-crown 5) is bound to the bpy ligand in the 3- and 3'-positions.

v-bpy : 4-vinyl-4'-methyl-2,2'-bipyridine.

DC-bpy : 4,4'-dicarboxy-2,2'-bipyridine.

PF₆⁻: hexafluorophosphate.

bmpa-bpy : bis(4'-methyl-2,2'-bipyridinyl-4-carbonyl)-(1,4-phenylenediamine).

bmdpa-bpy : bis(4'-methyl-2,2'-bipyridinyl-4-carbonyl)-(1,4-diphenylenediamine).

bmna-bpy: bis(4'-methyl-2,2'-bipyridinyl-4-carbonyl)-(1,4-naphthalenediamine).

Brc-bpy : 5-bromo-5'-carbazolyl-2,2'-bipyridine.

DMF: Dimethyl formamide.

Tz : 5-Phenyl-1H-tetrazole.

Pytz : 5-(2-pyridyl)-tetrazole.

TZBA : 5-(4-Carboxy-phenyl)tetrazole.

PTA: 5-[N-acetato(2-pyridyl)]tetrazole.