

بِسْمِ اللَّهِ الرَّحْمَنِ الرَّحِيمِ



دانشگاه کاشان

پژوهشکده‌ی علوم و فناوری نانو

پایان نامه

جهت اخذ درجه دکتری

در رشته علوم و فناوری نانو گرایش نانوشیمی

عنوان:

نهشت لایه‌های نانوساختار نیمرسانا بر سطح TiO_2 به کمک روش‌های

شیمیایی مختلف و بررسی عملکرد آن‌ها در سلول‌های خورشیدی حساس

شده با رنگینه

استاد راهنما:

دکتر مسعود صلواتی نیاسری

توسط:

محمد ثابت

خرداد ۱۳۹۴

تقدیم به

همسر مهربانم که قدم به قدم با من همراه شد.

سپاس‌گزاری

منت خدای را عز و جل که طاعتش موجب قربتست و به شکر اندرش مزید نعمت هر نفسی که فرو می‌رود
مدد حیاتست و چون بر می‌آید مفرح ذات پس در هر نفسی دو نعمت موجودست و بر هر نعمت شکر واجب

به مصداق «من لم یشکر المخلوق لم یشکر الخالق» بسی شایسته است که از استاد ارجمندم
جناب آقای پروفیسور صلواتی نیاسری که راهنمایی این رساله را به عهده داشتند و به خاطر زحماتی که
در این مدت متقبل شدند بینهایت تشکر و سپاسگزاری نمایم و توفیق ایشان در تمامی مراحل زندگی را از
خداوند متعال خواستارم.

از جناب آقای **پروفیسور بدیعی** به عنوان داور خارج از دانشگاه و **آقایان دکتر همدانیان و دکتر
اکبری** به عنوان داوران داخل دانشگاه که مطالعه‌ی پایان‌نامه‌ی اینجانب را بر عهده گرفته و در جلسه‌ی دفاع
شرکت نمودند بسیار سپاس گزارم. همچنین از جناب آقای **دکتر سلطانی** که به عنوان نماینده‌ی تحصیلات
تکمیلی در جلسه‌ی دفاع حضور به عمل رساندند کمال تشکر را دارم.

از تمامی هم‌آزمایشگاهی‌هایم که در این مدت من را تحمل کردند نیز بسیار سپاس‌گزارم.

متشکرم از پدر و مادرم، آنهایی که نه میتوانم موهایشان را که در راه عزت من سفید شد، سیاه کنم و نه
برای دستهای پینه بسته شان که ثمره تلاش برای افتخار من است، مرهمی دارم. پس، از خداوند متعال
خواهانم تا توفیقم دهد که هر لحظه شکرگزارشان باشم و ثانیه‌های عمرم را در عصای دست بودنشان
بگذرانم.

متشکرم از همسرم، که سایه مهربانیش سایه سار زندگانیم است، او که در زندگی من اسوه صبر و تحمل
بوده و مشکلات مسیر را همواره برایم تسهیل نمود. متشکرم از او که قدم به قدم در مسیر زندگی با من
همراه گردید و در آینده‌ای نزدیک مادری مهربان برای فرزندم خواهد بود. بسیار متأسف و ناراحت از آنم
که حضور او را در این جلسه میسر نگردید و امیدوارم بتوانم ذره‌ای از محبت‌های او را جبران کرده و
تکیه‌گاهی امن برای او و فرزندم باشم.

چکیده

در این کار تحقیقاتی چهار نانوساختار نیمه‌رسانای CdS، PbS، CdSe و CdTe انتخاب گردید و با روش‌های شیمیایی ارزان، سریع و در دسترس نظیر SILAR، لایه نشانی حمام شیمیایی، ریخته‌گری قطره‌ای و مایکروویو بر سطح TiO_2 لایه نشانی شد. نتایج نشان داد که روش‌های لایه‌نشانی تأثیر زیادی بر عملکرد سطوح حاصل در سلول‌های خورشیدی حساس شده با رنگینه می‌گذارند. در واقع این روش‌ها با ایجاد سطوح با میزان ترک‌های سطحی مختلف، در حرکت الکترون‌ها در سطح الکتروود و ورود آن‌ها به مدار خارجی تأثیر گذاشته که منجر به تغییر در عملکرد می‌شوند. با انجام آزمون‌های مختلف، SILAR به عنوان بهترین روش لایه‌نشانی شناخته شد. نتایج حاصل نشان داد که تمامی نیمه‌رساناهای مورد استفاده منجر به افزایش جریان مدار- کوتاه سلول‌های خورشیدی می‌گردند و نانوساختار CdS با افزایش ۱۵٪ جریان مدار-کوتاه پیش‌تاز است. در کنار لایه‌نشانی نانوساختارهای نیمه‌رسانا بر سطح TiO_2 ، نانوکامپوزیت‌های TiO_2 - نیمه‌رسانا به کمک روش هیدروترمال سنتز گردید و بکمک روش دکتر بلید بر سطح FTO لایه‌نشانی گردید. نتایج نشان داد که این سطوح نانوکامپوزیت نسبت به سطوح دیگر عملکرد ضعیفتری از خود نشان می‌دهند که مهمترین علت آن را می‌توان به تخلخل کمتر TiO_2 سنتزی نسبت به P25 نسبت داد. بخش دیگری از کار تحقیقاتی بر ساخت نانوساختارهای TiO_2 دوپه شده با برخی از عناصر فلزات واسطه نظیر Zr، Nb، Mo، Mn، Cu، Ag و Cd به کمک روش سل-ژل متمرکز گردید. در واقع از این ساختارهای فوتوکاتالیستی به عنوان لایه‌ی جاذب نور به منظور افزایش جذب نور و انتقال الکترون در سلول‌های خورشیدی رنگدانه‌ای بهره گرفته شد. نتایج نشان داد که تمامی ساختارهای دوپه شده منجر به افزایش جریان مدار-کوتاه می‌گردند. بهترین افزایش انتقال الکترون به مدار خارجی مربوط به نانوساختار Ag- TiO_2 بود که منجر به افزایش چند برابری جریان مدار-کوتاه نسبت به ساختار آنتاز خالص گردید. نهایتاً ساختار آنتاز خالص و ساختارهای دوپه شده از نقطه‌نظر ساختار نوار انرژی، چگالی حالات الکترونی و خواص نوری به وسیله بسته‌ی نرم‌افزاری کستپ مورد بررسی قرار گرفتند. نتایج نشان داد به دلیل مشارکت اوربیتال‌های d این

عناصر در شکاف انرژی آنتاز، حالات الکترونی جدیدی در میانه‌ی گاف انرژی آنتاز ایجاد می‌شود که انتقال الکترون را تسریع کرده و این ساختارها را به منظور کاربردهای فوتولتایی مناسب می‌سازد.

کلمات کلیدی: سلول خورشیدی، نانوساختار، SILAR، دوپ، جاذب نور.

فهرست مطالب

۱	فصل اول
۱-۱	۱- معرفی نیمه‌هادی‌های نانوساختار
۱-۱-۱	۱-۱-۱ ویژگی‌های بنیادی نیمه‌هادی‌ها
۲-۱	۲- سلول‌های خورشیدی
۱-۲-۱	۱-۲-۱ سلول‌های خورشیدی رنگدانه‌ای
۲-۲-۱	۲-۲-۱ سلول‌های خورشیدی بر پایه TiO_2
۳-۱	۳- ساختار سلول‌های خورشیدی حساس شده با رنگدانه
۱-۳-۱	۱-۳-۱ زیر لایه
۲-۳-۱	۲-۳-۱ فتوالکتروود (نیمه‌هادی‌ها)
۳-۳-۱	۳-۳-۱ رنگدانه حساس به نور
۴-۳-۱	۴-۳-۱ الکتروولیت اکسایش - کاهش
۵-۳-۱	۵-۳-۱ الکتروود کمکی
۴-۱	۴- سازوکار عملکرد سلول‌های خورشیدی رنگدانه‌ای
۵-۱	۵- روش‌های مناسب لایه نشانی
۱-۵-۱	۱-۵-۱ لایه‌نشانی به روش الکتروفورز
۶-۱	۶- نقاط کوانتومی
۷-۱	۷- روش سل-ژل
۸-۱	۸- هیدروترمال - سولوترمال
۹-۱	۹- عملکرد نانوساختارهای نیمه‌رسانای CdS , $CdSe$, PbS و $CdTe$ در سلول‌های خورشیدی رنگدانه‌ای
۱۰-۱	۱۰- روش‌های شیمیایی لایه نشانی مورد استفاده در این پروژه
۱-۱۰-۱	۱-۱۰-۱ روش جذب و واکنش لایه‌ی یونی متوالی (SILAR)
۲-۱۰-۱	۲-۱۰-۱ روش لایه نشانی حمام شیمیایی (CBD)
۳-۱۰-۱	۳-۱۰-۱ روش میکروویو
۴-۱۰-۱	۴-۱۰-۱ روش قطره چکانی-ریخته گری
۱۱-۱	۱۱- ساختارهای TiO_2 دوپه شده با عناصر فلزات واسطه
۱۲-۱	۱۲- آشنایی با کد کستپ
۱-۱۲-۱	۱-۱۲-۱ تاریخچه کد کستپ
۲-۱۲-۱	۲-۱۲-۱ تئوری و تقریب
۳-۱۲-۱	۳-۱۲-۱ بهینه‌سازی هندسه
۱۳-۱	۱۳- هدف‌های کلی تحقیق
۴۵	فصل دوم
۱-۲	۱-۲ روش الکتروفورز به منظور لایه نشانی TiO_2 بر سطح FTO
۱-۱-۲	۱-۱-۲ وسایل آزمایشگاهی

۴۷ مواد شیمیایی	۲-۱-۲
۴۷ FTO آماده سازی شیشه‌های	۳-۱-۲
۴۸ آماده سازی محلول الکترولیت مورد استفاده در روش الکتروفورز	۴-۱-۲
۴۸ آماده سازی الکترودها	۵-۱-۲
۴۹ انجام لایه نشانی الکتروفورز	۶-۱-۲
۵۰ عملیات حرارتی بعد از لایه نشانی	۷-۱-۲
۵۰ روش لایه نشانی SILAR	۲-۲
۵۰ وسایل آزمایشگاهی	۱-۲-۲
۵۱ مواد شیمیایی	۲-۲-۲
۵۱ آماده سازی محلول‌ها به منظور لایه نشانی	۳-۲-۲
۵۱ انجام مراحل SILAR	۴-۲-۲
۵۲ عملیات حرارتی بعد از لایه نشانی	۵-۲-۲
۵۲ روش لایه نشانی حمام شیمیایی	۳-۲
۵۲ وسایل آزمایشگاهی	۱-۳-۲
۵۳ آماده سازی محلول CBD	۳-۳-۲
۵۴ روش مایکروویو به منظور لایه نشانی نانوساختارهای CdS و PbS بر سطح TiO_2	۴-۲
۵۴ وسایل آزمایشگاهی	۱-۴-۲
۵۴ مواد شیمیایی	۲-۴-۲
۵۴ روش کار	۳-۴-۲
۵۵ روش Drop-Cast به منظور لایه نشانی CdSe و CdTe بر سطح TiO_2	۵-۲
۵۵ مواد شیمیایی	۲-۵-۲
۵۵ تهیه نانوساختارهای CdSe	۳-۵-۲
۵۶ تهیه نانوساختارهای CdTe	۴-۵-۲
۵۶ روش کار	۵-۵-۲
۵۷ عملیات حرارتی بعد از لایه نشانی	۵-۵-۲
۵۷ روش هیدروترمال به منظور تهیه نانوکامپوزیت‌های بر پایه TiO_2	۶-۲
۵۷ وسایل آزمایشگاهی	۱-۶-۲
۵۸ مواد شیمیایی	۲-۶-۲
۵۸ روش کار	۳-۶-۲
۵۹ لایه نشانی نانوکامپوزیت به کمک روش تیغه تنظیم	۷-۲
۶۰ روش سل-ژل به منظور ساخت نانوساختارهای TiO_2 دوپه شده با عناصر فلزات واسطه	۸-۲
۶۰ وسایل آزمایشگاهی	۱-۸-۲
۶۰ مواد شیمیایی	۲-۸-۲
۶۰ روش کار	۳-۸-۲
۶۱ لایه نشانی نانوساختارهای دوپه شده بر سطح FTO	۹-۲
۶۱ ساخت سلول خورشیدی حساس شده با رنگدانه	۱۰-۲

۶۲آماده کردن کاتد.....۱-۱۰-۲
۶۳آماده سازی آند.....۲-۱۰-۲
۶۳بستن سلول خورشیدی از آند و کاتد ایجاد شده.....۳-۱۰-۲
۶۵دستگاه‌های مورد استفاده برای شناسایی محصولات.....۱۱-۲
۶۷	فصل سوم
۶۹۱-۳ شناسایی نانوساختارهای CdS لایه نشانی شده بر سطح TiO_2
۶۹۱-۱-۳ الگوی پراش پرتوی ایکس (XRD).....
۷۰۲-۱-۳ آنالیز EDS.....
۷۲۳-۱-۳ تصاویر SEM سطوح.....
۷۴۴-۱-۳ تصاویر SEM مقطع عرضی.....
۷۹۵-۱-۳ آنالیز میکروسکوپی نیروی اتمی (AFM).....
۸۰۶-۱-۳ بررسی خواص نوری.....
۸۴۷-۱-۳ بررسی میزان جذب رنگ به وسیله سطوح.....
۸۴۸-۱-۳ بررسی عملکرد سلول‌های خورشیدی ساخته شده.....
۸۹۹-۱-۳ نتیجه‌گیری.....
۸۹۲-۳ شناسایی نانوساختارهای PbS لایه نشانی شده بر سطح TiO_2
۸۹۱-۲-۳ الگوی پراش اشعه‌ی ایکس (XRD).....
۹۱۲-۲-۳ آنالیز EDS.....
۹۳۳-۲-۳ تصاویر SEM.....
۹۳۴-۲-۳ تصاویر SEM مقطع عرضی.....
۹۷۵-۲-۳ آنالیز میکروسکوپی نیروی اتمی (AFM).....
۹۹۷-۲-۳ بررسی میزان رنگ جذب شده.....
۱۰۲۹-۲-۳ نتیجه‌گیری.....
۱۰۲۳-۳ شناسایی نانوساختارهای CdSe لایه نشانی شده بر ساختار TiO_2
۱۰۲۱-۳-۳ تصاویر پراش اشعه‌ی ایکس (XRD).....
۱۰۳۲-۳-۳ آنالیز EDS.....
۱۰۵۳-۳-۳ تصاویر SEM.....
۱۰۷۴-۳-۳ تصاویر SEM مقطع عرضی.....
۱۰۸۵-۳-۳ آنالیز AFM.....
۱۰۸۶-۳-۳ بررسی خواص نوری.....
۱۱۰۷-۳-۳ بررسی میزان رنگ جذب شده به وسیله سطوح.....
۱۱۳۴-۳ شناسایی نانوساختارهای CdTe لایه نشانی شده بر سطح TiO_2
۱۱۳۱-۴-۳ الگوی پراش اشعه‌ی ایکس (XRD).....
۱۱۳۲-۴-۳ آنالیز EDS.....
۱۱۵۳-۴-۳ تصاویر SEM.....
۱۱۸۴-۴-۳ تصاویر SEM مقطع عرضی.....

۱۱۹	۵-۴-۳- آنالیز میکروسکوپی نیروی اتمی
۱۱۹	۶-۴-۳- بررسی خواص نوری
۱۲۴	۹-۴-۳- نتیجه‌گیری
۱۲۵	۵-۳- نانوساختارهای TiO_2 دوپه شده با عناصر فلزی
۱۲۵	۱-۵-۳- شناسایی نانوساختارهای TiO_2 خالص تهیه‌شده به روش سل-ژل
۱۲۵	۱-۱-۵-۳- تصویر الگوی پراش اشعه‌ی ایکس (XRD) و طیف EDS
۱۲۷	۲-۱-۵-۳- تصویر SEM
۱۲۸	۳-۱-۵-۳- بررسی خواص نوری
۱۲۸	۲-۵-۳- شناسایی نانوساختارهای $Nb-TiO_2$ تهیه‌شده به روش سل-ژل
۱۲۸	۱-۲-۵-۳- تصویر الگوی پراش اشعه‌ی ایکس (XRD) و طیف EDS
۱۳۰	۲-۲-۵-۳- تصویر SEM
۱۳۱	۳-۲-۵-۳- بررسی خواص نوری
۱۳۱	۳-۵-۳- شناسایی نانوساختارهای $Mo-TiO_2$ تهیه‌شده به روش سل-ژل
۱۳۱	۱-۳-۵-۳- تصویر الگوی پراش اشعه‌ی ایکس (XRD) و طیف EDS
۱۳۳	۲-۳-۵-۳- تصویر SEM
۱۳۴	۳-۳-۵-۳- بررسی خواص نوری
۱۳۴	۴-۵-۳- شناسایی نانوساختارهای $Mn-TiO_2$ تهیه‌شده به روش سل-ژل
۱۳۴	۱-۴-۵-۳- تصویر الگوی پراش اشعه‌ی ایکس (XRD) و طیف EDS
۱۳۶	۲-۴-۵-۳- تصویر SEM
۱۳۷	۳-۴-۵-۳- بررسی خواص نوری
۱۳۷	۵-۵-۳- شناسایی نانوساختارهای $Zr-TiO_2$ تهیه‌شده به روش سل-ژل
۱۳۷	۱-۵-۵-۳- تصویر الگوی پراش اشعه‌ی ایکس (XRD) و طیف EDS
۱۳۹	۲-۵-۵-۳- تصویر SEM
۱۴۰	۳-۵-۵-۳- بررسی خواص نوری
۱۴۰	۶-۵-۳- شناسایی نانوساختارهای $Cu-TiO_2$ تهیه‌شده به روش سل-ژل
۱۴۰	۱-۶-۵-۳- تصویر الگوی پراش اشعه‌ی ایکس (XRD) و طیف EDS
۱۴۲	۲-۶-۵-۳- تصویر SEM
۱۴۳	۳-۶-۵-۳- بررسی خواص نوری
۱۴۳	۷-۵-۳- شناسایی نانوساختارهای $Ag-TiO_2$ تهیه‌شده به روش سل-ژل
۱۴۳	۱-۷-۵-۳- تصویر الگوی پراش اشعه‌ی ایکس (XRD) و طیف EDS
۱۴۴	۲-۷-۵-۳- تصویر SEM
۱۴۶	۳-۷-۵-۳- بررسی خواص نوری
۱۴۶	۸-۵-۳- شناسایی نانوساختارهای $Cd-TiO_2$ تهیه‌شده به روش سل-ژل
۱۴۶	۱-۸-۵-۳- تصویر الگوی پراش اشعه‌ی ایکس (XRD) و طیف EDS
۱۴۸	۲-۸-۵-۳- تصویر SEM
۱۴۹	۳-۸-۵-۳- بررسی خواص نوری

۱۴۹	۹-۵-۳- مقایسه خواص نوری نمونه‌های دوپه شده
۱۴۹	۳-۵-۹-۱- مقایسه طیف جذبی نمونه‌های دوپه شده
۱۵۰	۳-۵-۹-۳- محاسبه شکاف انرژی نمونه‌های دوپه شده و مقایسه‌ی آنها
۱۵۱	۳-۵-۱۰- نتیجه‌گیری
۱۵۲	۳-۶-۶- محاسبات ساختار خالص و ساختارهای دوپه شده‌ی آناتاز به وسیله کد کستپ
۱۵۲	۳-۶-۱- محاسبات ساختار TiO_2 خالص
۱۵۴	۳-۶-۲- محاسبات ساختار Zr-TiO_2
۱۵۵	۳-۶-۳- محاسبات ساختار Nb-TiO_2
۱۵۷	۳-۶-۴- محاسبات ساختار Mo-TiO_2
۱۵۸	۳-۶-۵- محاسبات ساختار Mn-TiO_2
۱۶۰	۳-۶-۶- محاسبات ساختار Cu-TiO_2
۱۶۱	۳-۶-۷- محاسبات ساختار Ag-TiO_2
۱۶۳	۳-۶-۸- محاسبات ساختار Cd-TiO_2
۱۶۴	۳-۶-۹- بررسی خواص نوری نمونه‌های دوپه شده مختلف حاصل از محاسبات
۱۶۵	۳-۶-۱۰- نتیجه‌گیری
۱۶۶	۳-۷-۷- ساخت سلول‌های خورشیدی رنگدانه‌ای از ساختارهای دوپه شده
۱۶۶	۳-۷-۱- بررسی عملکرد سلول‌های خورشیدی ساخته‌شده از نمونه‌های TiO_2 دوپه شده
۱۶۹	۳-۷-۲- نتیجه‌گیری
۱۷۰	۳-۸- نتیجه‌گیری
۱۷۲	منابع و مأخذ

فهرست شکل‌ها

فصل اول

- شکل ۱-۱- نمایش نوار هدایت، ظرفیت و سطح فرمی در یک نیمه‌هادی ذاتی..... ۴
- شکل ۱-۲- عملکرد و سطح انرژی سلول‌های خورشیدی DSSC..... ۷
- شکل ۱-۳- دی‌گرام انرژی مربوط به TiO_2 محاسبه‌شده توسط دائود. فلش‌ها نمایان گر تعداد اندکی از انتقال‌های مجاز مستقیم و غیرمستقیم است. سطح X_{2a} برای راحتی در انرژی صفر قرار داده شده است..... ۸
- شکل ۱-۴- شبکه‌های براویس (نقاط) و اولین ناحیه بریلوین مربوطه برای (a) شبکه مربعی و (b) شبکه هگزاگونالی..... ۸
- شکل ۱-۵- تصویر میکروسکوپ الکترونی روبشی (SEM) فیلم نیمه‌هادی مورد استفاده در سلول‌های DSSC حاوی نانو ذرات TiO_2 با فاز آناتاز..... ۹
- شکل ۱-۶- ساختار هندسی TiO_2 آناتاز..... ۱۰
- شکل ۱-۷- شماتیک FTO و ITO..... ۱۳
- شکل ۱-۸- ساختار بلوری TiO_2 ۱۴
- شکل ۱-۹- رنگدانه‌های کمپلکس روتنیوم بی‌پیریدین (N3, N719, N749 و Z907)..... ۱۵
- شکل ۱-۱۰- نحوه جذب سطحی رنگدانه کمپلکس روتنیوم بی‌پیریدین بر روی TiO_2 ۱۵
- شکل ۱-۱۱- رنگدانه‌های آلی..... ۱۵
- شکل ۱-۱۲- سازوکار عملکرد DSSC..... ۱۸
- شکل ۱-۱۳- نحوه انجام فرآیند الکتروفورز..... ۲۲
- شکل ۱-۱۴- مراحل تهیه‌ی کاتالیزورهای سل-ژل..... ۲۴
- شکل ۱-۱۵- خشک کردن تبخیری a- نیروی‌های تراکمی قوی به طرف داخل که به وسیله‌ی نیروی کشش سطحی ژل در حال خشک شدن به وجود می‌آید b- ژل فروریخته..... ۲۷
- شکل ۱-۱۶- نمودار فشار - دمای روش‌های مختلف ساخت مواد..... ۳۱
- شکل ۱-۱۷- نوعی اتوکلاو مورد استفاده در فرایند هیدروترمال..... ۳۳
- شکل ۱-۱۸- شماتیک انتقال الکترون از N719 به TiO_2 در غیاب (چپ) و حضور (راست) CdS..... ۳۴
- شکل ۱-۱۹- مراحل انجام روش Drop-Cast..... ۳۹

فصل دوم

- شکل ۲-۱- تصویر منبع تغذیه، مولتی متر و الکترودهای مورد استفاده در روش الکتروفورز..... ۴۹
- شکل ۲-۲- شماتیک فرآیند الکتروفورز..... ۵۰
- شکل ۲-۳- مراحل انجام روش SILAR..... ۵۲
- شکل ۲-۴- شماتیک فرآیند CBD..... ۵۳
- شکل ۲-۵- شماتیک فرآیند لایه نشانی به وسیله مایکروویو..... ۵۴
- شکل ۲-۶- شماتیک روش Drop-Cast..... ۵۷
- شکل ۲-۷- تصویر دریل مخصوص سوراخ کردن شیشه (چپ) و نمونه‌ای از یک شیشه‌ی سوراخ شده (راست)..... ۶۳

فصل سوم

- شکل ۳-۱ (a-f) به ترتیب الگوی XRD نمونه‌های S3-S1, B2, B1, FTO..... ۷۱

- شکل ۳-۲- الگوی XRD نمونه‌ی S4* ۷۱
- شکل ۳-۳- (a-d) طیف EDS نمونه‌های S1, S2, S3 و S4* ۷۲
- شکل ۳-۴ (a-e) به ترتیب تصاویر SEM (راست) و طرح پردازش‌شده‌ی ترک‌های سطحی (چپ) نمونه‌های S1, S2, B2, B1, S3 ۷۵
- شکل ۳-۵ (a) تصویر SEM و (b) TEM نمونه‌ی S4* ۷۶
- شکل ۳-۶ (a-f) به ترتیب تصاویر سطح مقطع نمونه‌های S1, B2, B1, S2, S3 و S4 ۷۸
- شکل ۳-۷ (a-c) به ترتیب تصاویر AFM دو بعدی (چپ) و سه بعدی (راست) نمونه‌های S1, B1 و S3 ۷۹
- شکل ۳-۸- به ترتیب طیف جذبی و نمودار $(\alpha hv)^2$ در برابر (hv) نمونه‌های B1, B2, TiO₂/Dye, S1-S4 ۸۳
- شکل ۳-۹ (a-f) به ترتیب طیف UV-Vis محلول رنگ واجذب شده از سطوح نمونه‌های B1, B2, S1-S4 ۸۷
- شکل ۳-۱۰ (a-f) منحنی چگالی ولتاژ-جریان سلول‌های خورشیدی تهیه‌شده از نمونه‌های B1, B2, S1-S4 ۸۸
- شکل ۳-۱۱- شماتیک سلول خورشیدی CdS-TiO₂ و انتقال الکترون از رنگدانه به TiO₂ به وسیله CdS ۸۸
- شکل ۳-۱۲ (a-c) به ترتیب الگوی XRD نمونه‌های P1-P3 ۹۰
- شکل ۳-۱۳- الگوی XRD نمونه‌ی P4* ۹۱
- شکل ۳-۱۴ (a-d) به ترتیب طیف EDS نمونه‌های P1-P4 ۹۲
- شکل ۳-۱۵ (a-c) به ترتیب تصاویر SEM (راست) و طرح پردازش‌شده‌ی ترک‌های سطحی (چپ) نمونه‌های P1-P3 ۹۴
- شکل ۳-۱۶ (a) تصویر SEM و (b) TEM نمونه‌ی P4* ۹۵
- شکل ۳-۱۷ (a-d) به ترتیب تصاویر سطح مقطع نمونه‌های P1-P4 ۹۶
- شکل ۳-۱۸ (a و b) - به ترتیب تصاویر AFM دو بعدی (چپ) و سه بعدی (راست) نمونه‌های P1 و P3 ۹۷
- شکل ۳-۱۹ (a-d) به ترتیب طیف جذبی و نمودار $(\alpha hv)^2$ در برابر (hv) نمونه‌های P1-P4 ۹۸
- شکل ۳-۲۰ (a-d) به ترتیب طیف UV-Vis محلول رنگ واجذب شده از سطوح نمونه‌های P1-P4 ۱۰۰
- شکل ۳-۲۱ (a-e) - منحنی چگالی ولتاژ-جریان سلول‌های خورشیدی تهیه‌شده از نمونه‌های P1-P4 ۱۰۱
- شکل ۳-۲۲- شماتیک سلول خورشیدی PbS-TiO₂ و انتقال الکترون از رنگدانه به TiO₂ به وسیله PbS در دو حالت توده‌ای و نانوساختار ۱۰۱
- شکل ۳-۲۳ (a و b) به ترتیب الگوی XRD نمونه‌های Se1 و Se2 ۱۰۳
- شکل ۳-۲۴- الگوی XRD نمونه‌ی Se3* ۱۰۴
- شکل ۳-۲۵ (a-c) به ترتیب طیف EDS نمونه‌های Se1, Se2 و Se3* ۱۰۴
- شکل ۳-۲۶ (a و b) - تصاویر SEM (راست) و طرح پردازش‌شده‌ی ترک‌های سطحی (چپ) نمونه‌های Se1 و Se2 ۱۰۵
- شکل ۳-۲۷- تصویر SEM نمونه‌ی P3* ۱۰۶
- شکل ۳-۲۸ (a-c) به ترتیب تصاویر سطح مقطع نمونه‌های Se1-Se3 ۱۰۷
- شکل ۳-۲۹ (a و b) - به ترتیب تصاویر AFM دو بعدی (چپ) و سه بعدی (راست) نمونه‌های Se1 و Se2 ۱۰۸
- شکل ۳-۳۰- طیف جذبی و نمودار $(\alpha hv)^2$ در برابر (hv) نمونه‌های Se1-Se3 ۱۰۹
- شکل ۳-۳۱ (a-c) طیف UV-Vis محلول رنگ واجذب شده از سطوح نمونه‌های Se1-Se3 ۱۱۰
- شکل ۳-۳۲ (a-c) - منحنی چگالی ولتاژ-جریان سلول‌های خورشیدی تهیه‌شده از نمونه‌های Se1-Se3 ۱۱۲
- شکل ۳-۳۳- شماتیک سلول خورشیدی CdSe-TiO₂ ۱۱۲
- شکل ۳-۳۴ (a و b) - به ترتیب الگوی XRD نمونه‌های Te1 و Te2 ۱۱۴
- شکل ۳-۳۵- الگوی XRD نمونه‌ی Te3* ۱۱۵

۱۱۵	شکل ۳-۳۶ (a و b) - طیف EDS نمونه‌های Te1 و Te3*.....
۱۱۶	شکل ۳-۳۷ (a و b) - به ترتیب تصاویر SEM (راست) و طرح پردازش‌شده‌ی ترک‌های سطحی (چپ) نمونه‌های Te1 و Te2.....
۱۱۷	شکل ۳-۳۸ - تصویر SEM نمونه‌ی Te3*.....
۱۱۸	شکل ۳-۳۹ (a-c) - به ترتیب تصاویر سطح مقطع نمونه‌های Te1-Te3.....
۱۱۹	شکل ۳-۴۰ (a و b) - به ترتیب تصاویر AFM دو بعدی (چپ) و سه بعدی (راست) نمونه‌های Te1 و Te2.....
۱۲۰	شکل ۳-۴۱ - طیف جذبی و نمودار $(\alpha h\nu)^2$ در برابر $(h\nu)$ نمونه‌های Te1-Te3.....
۱۲۱	شکل ۳-۴۲ (a-c) - به ترتیب طیف UV-Vis محلول رنگ واجذب شده از سطوح نمونه‌های Te1-Te3.....
۱۲۳	شکل ۳-۴۳ - منحنی چگالی ولتاژ-جریان سلول‌های خورشیدی تهیه‌شده از نمونه‌های Te1-Te3.....
۱۲۳	شکل ۳-۴۴ - شماتیک ساختار سلول خورشیدی CdTe-TiO ₂ و نحوه‌ی انتقال الکترون از رنگدانه به نیمه‌رسانا در دو حالت توده‌ای و نانوساختار.....
۱۲۳	شکل ۳-۴۵ - منحنی چگالی جریان- ولتاژ سلولهای خورشیدی متشکل از لایه‌های نانوساختار نیمه‌رسانای لایه نشانی شده بر سطح TiO ₂
۱۲۴	شکل ۳-۴۶ - تصویر XRD نمونه‌ی TiO ₂ خالص.....
۱۲۶	شکل ۳-۴۷ - طیف EDS نمونه‌ی TiO ₂ خالص.....
۱۲۶	شکل ۳-۴۸ - تصویر SEM نمونه‌ی TiO ₂ خالص.....
۱۲۷	شکل ۳-۴۹ - طیف جذبی نمونه‌ی TiO ₂ خالص.....
۱۲۸	شکل ۳-۵۰ - تصویر XRD نمونه‌ی Nb-TiO ₂
۱۲۹	شکل ۳-۵۱ - طیف EDS نمونه‌ی Nb-TiO ₂
۱۲۹	شکل ۳-۵۲ - تصویر SEM نمونه‌ی Nb-TiO ₂
۱۳۰	شکل ۳-۵۳ - طیف جذبی نمونه‌ی Nb-TiO ₂
۱۳۱	شکل ۳-۵۴ - تصویر XRD نمونه‌ی Mo-TiO ₂
۱۳۲	شکل ۳-۵۵ - طیف EDS نمونه‌ی Mo-TiO ₂
۱۳۲	شکل ۳-۵۶ - تصویر SEM نمونه‌ی Mo-TiO ₂
۱۳۳	شکل ۳-۵۷ - طیف جذبی نمونه‌ی Mo-TiO ₂
۱۳۴	شکل ۳-۵۸ - تصویر XRD نمونه‌ی Mn-TiO ₂
۱۳۵	شکل ۳-۵۹ - طیف EDS نمونه‌ی Mn-TiO ₂
۱۳۵	شکل ۳-۶۰ - تصویر SEM نمونه‌ی Mn-TiO ₂
۱۳۶	شکل ۳-۶۱ - منحنی جذبی نمونه‌ی Mn-TiO ₂
۱۳۷	شکل ۳-۶۲ - تصویر XRD نمونه‌ی Zr-TiO ₂
۱۳۸	شکل ۳-۶۳ - طیف EDS نمونه‌ی Zr-TiO ₂
۱۳۸	شکل ۳-۶۴ - تصویر SEM نمونه‌ی Zr-TiO ₂
۱۳۹	شکل ۳-۶۵ - طیف جذبی نمونه‌ی Zr-TiO ₂
۱۴۰	شکل ۳-۶۶ - تصویر XRD نمونه‌ی Cu-TiO ₂
۱۴۱	شکل ۳-۶۷ - طیف EDS نمونه‌ی Cu-TiO ₂
۱۴۱	شکل ۳-۶۸ - تصویر SEM نمونه‌ی Cu-TiO ₂
۱۴۲	شکل ۳-۶۹ - طیف جذبی نمونه‌ی Cu-TiO ₂
۱۴۳	شکل ۳-۶۹ - طیف جذبی نمونه‌ی Cu-TiO ₂

۱۴۴	شکل ۳-۷۰- تصویر XRD نمونه‌ی $Ag-TiO_2$
۱۴۴	شکل ۳-۷۱- طیف EDS نمونه‌ی $Ag-TiO_2$
۱۴۵	شکل ۳-۷۲- تصویر SEM نمونه‌ی $Ag-TiO_2$
۱۴۶	شکل ۳-۷۳- طیف جذبی نمونه‌ی $Ag-TiO_2$
۱۴۷	شکل ۳-۷۴- تصویر XRD نمونه‌ی $Cd-TiO_2$
۱۴۷	شکل ۳-۷۵- طیف EDS نمونه‌ی $Cd-TiO_2$
۱۴۸	شکل ۳-۷۶- تصویر SEM نمونه‌ی $Cd-TiO_2$
۱۴۹	شکل ۳-۷۷- طیف جذبی نمونه‌ی $Cd-TiO_2$
۱۵۰	شکل ۳-۷۸- طیف جذبی TiO_2 خالص و تمامی نمونه‌های دوپه شده.
۱۵۱	شکل ۳-۷۹- منحنی $(\alpha h\nu)^2$ در برابر $h\nu$ نمونه‌ی TiO_2 خالص و تمامی نمونه‌های دوپه شده.
۱۵۳	شکل ۳-۸۰- ساختار نوار انرژی و منحنی DOS نمونه‌ی TiO_2 خالص.
۱۵۳	شکل ۳-۸۱- منحنی PDOS نمونه‌ی TiO_2 خالص.
۱۵۴	شکل ۳-۸۲- ساختار نوار انرژی و منحنی DOS نمونه‌ی $Zr-TiO_2$
۱۵۵	شکل ۳-۸۳- منحنی PDOS عناصر و ترکیب $Zr-TiO_2$
۱۵۶	شکل ۳-۸۴- ساختار نوار انرژی و منحنی DOS نمونه‌ی $Nb-TiO_2$
۱۵۶	شکل ۳-۸۵- منحنی PDOS عناصر و ترکیب $Nb-TiO_2$
۱۵۷	شکل ۳-۸۶- ساختار نوار انرژی و منحنی DOS نمونه‌ی $Mo-TiO_2$
۱۵۸	شکل ۳-۸۷- منحنی PDOS عناصر و ترکیب $Mo-TiO_2$
۱۵۹	شکل ۳-۸۸- ساختار نوار انرژی و منحنی DOS نمونه‌ی $Mn-TiO_2$
۱۵۹	شکل ۳-۸۹- منحنی PDOS عناصر و ترکیب $Mn-TiO_2$
۱۶۰	شکل ۳-۹۰- ساختار نوار انرژی و منحنی DOS نمونه‌ی $Cu-TiO_2$
۱۶۱	شکل ۳-۹۱- منحنی PDOS عناصر و ترکیب $Cu-TiO_2$
۱۶۲	شکل ۳-۹۲- ساختار نوار انرژی و منحنی DOS نمونه‌ی $Ag-TiO_2$
۱۶۲	شکل ۳-۹۳- منحنی PDOS عناصر و ترکیب $Ag-TiO_2$
۱۶۳	شکل ۳-۹۴- ساختار نوار انرژی و منحنی DOS نمونه‌ی $Cd-TiO_2$
۱۶۴	شکل ۳-۹۵- منحنی PDOS عناصر و ترکیب $Cd-TiO_2$
۱۶۵	شکل ۳-۹۶- منحنی جذبی نمونه‌ی TiO_2 خالص و تمامی نمونه‌های دوپه شده حاصل از محاسبات.
۱۶۷	شکل ۳-۹۷- شماتیک ساختار سلول خورشیدی $M-TiO_2$ (فلز واسطه = M).
۱۶۸	شکل ۳-۹۸- منحنی چگالی ولتاژ- جریان سلولهای خورشیدی $M-TiO_2$ (فلز واسطه = M) حساس شده با رنگدانه‌ی Eosin Y

فهرست جدول‌ها

فصل دوم

- جدول ۲-۱- انواع مواد شیمیایی مورد استفاده در روش الکتروفورز..... ۴۷
- جدول ۲-۲- انواع مواد شیمیایی مورد استفاده در لایه نشانی SILAR..... ۵۱
- جدول ۲-۳- انواع مواد شیمیایی مورد استفاده در روش CBD..... ۵۳
- جدول ۲-۴- انواع مواد شیمیایی مورد استفاده در روش Drop-Cast..... ۵۵
- جدول ۲-۵- انواع مواد شیمیایی مورد استفاده در تهیه نانو ساختارهای کامپوزیتی..... ۵۸
- جدول ۲-۶- نام و ساختار نانوکامپوزیت‌های مختلف..... ۵۹
- جدول ۲-۷- انواع مواد شیمیایی مورد استفاده در روش سل-ژل..... ۶۰
- جدول ۲-۸- انواع مواد شیمیایی مورد استفاده در ساخت سلول‌های خورشیدی رنگدانه‌ای..... ۶۲
- جدول ۲-۹- شرایط آماده سازی نمونه‌های TiO_2 خالص..... ۶۴
- جدول ۲-۱۰- شرایط آماده سازی نمونه‌های TiO_2-CdS ۶۴
- جدول ۲-۱۱- شرایط آماده سازی نمونه‌های TiO_2-PbS ۶۴
- جدول ۲-۱۲- شرایط آماده سازی نمونه‌های TiO_2-CdSe ۶۵
- جدول ۲-۱۳- شرایط آماده سازی نمونه‌های TiO_2-CdTe ۶۵

فصل سوم

- جدول ۳-۱- مقادیر شکاف انرژی نمونه‌های مختلف..... ۸۳
- جدول ۳-۲- ویژگی‌های فوتوولتایی نمونه‌های B1، B2 و S1-S4..... ۸۸
- جدول ۳-۳- مقادیر شکاف انرژی نمونه‌های P1-P4..... ۹۹
- جدول ۳-۴- ویژگی‌های فوتوولتایی نمونه‌های P1-P4..... ۱۰۱
- جدول ۳-۵- مقادیر شکاف انرژی نمونه‌های Se1-Se3..... ۱۰۹
- جدول ۳-۶- ویژگی‌های فوتوولتایی نمونه‌های Se1-Se3..... ۱۱۲
- جدول ۳-۷- مقادیر شکاف انرژی نمونه‌های Te1-Te3..... ۱۲۰
- جدول ۳-۸- ویژگی‌های فوتوولتایی نمونه‌های Te1-Te3..... ۱۲۳
- جدول ۳-۹- ویژگی‌های فوتوولتایی سلول‌های خورشیدی متشکل از لایه‌های نانو ساختار نیمه‌رسانای لایه نشانی شده بر سطح TiO_2 ۱۲۵
- جدول ۳-۱۰- مقادیر شکاف انرژی نمونه‌های TiO_2 دوپه شده با عناصر مختلف..... ۱۵۱
- جدول ۳-۱۱- ویژگی‌های فوتوولتایی نمونه‌های $M-TiO_2$ (فلز واسطه M)..... ۱۶۹

فهرست علائم و اختصارات (Abbreviations)

EDS	Energy Dispersive Spectroscopy
mA	Miliamper
SEM	Scanning Electron Microscope
TEM	Transmission Electron Microscope
XRD	X-ray diffraction pattern
J_{sc}	Short Circuit current density
V_{oc}	Open Circuit Volate
FF	Fill Factor
Cross-SEM	Cross section SEM
DRS	Diffuse reflectance spectroscopy
AFM	Atomic Force Microscopy
SILAR	Successive ionic layer adsorption and reaction
CBD	Chemical bath deposition
MW	Microwave
DB	Doctor-blade
FTO	Fluorine doped Tin Oxide
R	Reflectance

فصل اول

مقدمه

۱-۱- معرفی نیمه‌هادی‌های نانوساختار

از اوایل قرن ۲۱ نانو فناوری به سرعت شروع به گسترش کرده و به بسیاری از حوزه‌ها نظیر الکترونیک، علم مواد، شیمی، علوم زیستی، مکانیک و اپتوالکترونیک وارد شد. یکی از مهم‌ترین زمینه‌های توسعه‌ی این فناوری، ساخت و گسترش نیمه‌هادی‌ها^۱ بوده است. با ورود به قرن ۲۱ و تمرکز بر روی کوچک‌تر کردن ابزارها، نیمه‌هادی‌های نانوساختار از اهمیت ویژه‌ای برخوردار شدند. کاهش اندازه‌ی ابزارها از اندازه‌های میلی‌متری به میکرومتری موجب پیشرفت در فناوری ساخت بلورهای پیشرفته و فیلم‌های نازک با بلورینگی و خلوص بالا گردید.

نیمه‌هادی‌های نانوساختار کاربردهای بسیار گسترده‌ای در انواع زمینه‌ها همچون الکترونیک، اجزای نوری، کاتالیزور، حسگر، انرژی و غیره دارند. مهم‌ترین ابزارهای تولیدشده از نیمه‌هادی‌ها عبارت‌اند از: سلول‌های خورشیدی، حسگرهای گازی، کاتالیزورها، لیزرها و غیره.

یکی از مهم‌ترین کاربردهای نیمه‌هادی‌ها در ساخت سلول‌های خورشیدی است. از آنجا که تأمین انرژی پاک یکی از مهم‌ترین مسائل بشر در قرن حاضر است و از طرفی انرژی خورشیدی یک منبع

1. Semiconductors

انرژی تجدید پذیر، پاک، در دسترس و فاقد کربن است، بنابراین امروزه تحقیقات بسیاری برای گسترش کاربرد این انرژی در حال انجام است. در اغلب موارد، نیمه‌هادی‌ها به عنوان مهم‌ترین بخش در سلول‌های خورشیدی به حساب می‌آیند. تبدیل انرژی شامل جذب انرژی نور (فوتون) به وسیله یک نیمه‌هادی، در ادامه تولید جفت‌های الکترون-حفره و سپس جدا کردن حامل‌های بار است. نیمه‌هادی‌هایی که در ساخت سلول‌های خورشیدی نانو ساختار از آن‌ها بهره گرفته می‌شود به چندین گروه طبقه‌بندی می‌شود که بسته به نوع سلول خورشیدی از یکی به عنوان الکتروود کار استفاده می‌شود. از مهم‌ترین نیمه‌هادی‌های به کاررفته عبارت‌اند از: Si ، CdS ، CdTe ، Cu_2S ، CuInS_2 ، ZnO و TiO_2 .

۱-۱-۱- ویژگی‌های بنیادی نیمه‌هادی‌ها

الکترون‌های یک اتم منفرد سطوح انرژی مجزایی دارد. هنگامی که اتم به فرم بلوری در می‌آید، سطوح انرژی، به علت برهم‌کنش‌های اتمی به سطوحی مجزا اما خیلی نزدیک به هم تبدیل می‌شود که منجر به نوار انرژی پیوسته می‌گردد. بین دو نوار که پایینی نوار ظرفیت و بالایی نوار هدایت نام دارد، یک فاصله تحت عنوان گاف انرژی^۱ وجود دارد که با E_g نمایش داده شده و پارامتر مهمی در سلول‌های خورشیدی به شمار می‌رود. در دمای صفر کلوین تمام سطوح انرژی در نوار ظرفیت به وسیله الکترون‌ها پر شده‌اند و نوار هدایت خالی است. برخی پیوندها به وسیله ارتعاش گرمایی در دمای اتاق شکسته می‌شود زیرا گاف انرژی در محدوده‌ی $3-5\text{ eV}$ است. این امر موجب ایجاد الکترون‌ها در نوار هدایت و حفره‌ها در نوار ظرفیت می‌شود. نمایش نوار انرژی در شکل ۱-۱ آمده است. E_c برابر است با سطح پایین نوار هدایت و E_v سطح بالایی نوار ظرفیت. E_F نیز سطح فرمی^۲

1. Band gap
2. Fermi Level