

สำนักหอสมุดกลาง พระจอมเกล้าลาดกระบัง

การออกแบบโครงสร้างและสังเคราะห์สารอินทรีย์ไวแสง กลุ่มไดเนอร์-พาย-  
ไซยาโนอะคริลิกแอซิดสำหรับเซลล์แสงอาทิตย์ชนิดสีย้อมไวแสง

STRUCTURAL DESIGN AND SYNTHESIS OF ORGANIC DYE  
SENSITIZERS OF DONOR- $\pi$ -CYANOACRYLICACID FOR  
DYE-SENSITIZED SOLAR CELLS



เลขหมู่.....  
เลขทะเบียน.....132348  
วัน,เดือน,ปี.....17 ก.ค. 2557

b.126193/5  
i.....

วิทยานิพนธ์นี้เป็นส่วนหนึ่งของการศึกษาตามหลักสูตรปริญญาวิทยาศาสตรมหาบัณฑิต

สาขาวิชาเทคโนโลยีและนาโนเทคโนโลยี

สถาบันเทคโนโลยีพระจอมเกล้าเจ้าคุณทหารลาดกระบัง

พ.ศ.2557

KMITL-2014-NT-M-001-006

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า  
ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

STRUCTURAL DESIGN AND SYNTHESIS OF ORGANIC DYE  
SENSITIZERS OF DONOR- $\pi$ -CYANOACRYLICACID FOR  
DYE-SENSITIZED SOLAR CELLS



A THESIS SUBMITTED IN PARTIAL FULFILLMENT  
OF THE REQUIREMENT FOR THE DEGREE OF  
MASTER OF SCIENCE IN NANOSCIENCE AND NANOTECHNOLOGY  
COLLEGE OF NANOTECHNOLOGY  
KING MONGKUT'S INSTITUTE OF TECHNOLOGY LADKRABANG

2014

KMITL-2014-NT-M-001-006

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า  
ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้



**COPYRIGHT 2014**

**SCHOOL OF GRADUATE STUDIES**

**KING MONGKUT'S INSTITUTE OF TECHNOLOGY LADKRABANG**

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า  
ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ตัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

วิทยาลัยนาโนเทคโนโลยีพระจอมเกล้าลาดกระบัง  
สถาบันเทคโนโลยีพระจอมเกล้าเจ้าคุณทหารลาดกระบัง  
ใบรับรองวิทยานิพนธ์

หัวข้อวิทยานิพนธ์ การออกแบบโครงสร้างและสังเคราะห์สารอินทรีย์ไวแสงกลุ่มโคโรนา-พาย-ไซยาโนอะคริลิก  
แอซิดสำหรับเซลล์แสงอาทิตย์ชนิดสีย้อมไวแสง

Thesis Title Structural Design and Synthesis of Organic Dye Sensitizers of Donor- $\pi$ -  
Cyanooarylicacid for Dye-sensitized Solar Cells

การศึกษา นายภควัต จิตตระทาน

รหัสประจำตัว 54670201

ปริญญา วิทยาศาสตรมหาบัณฑิต

สาขาวิชา นาโนวิทยาและนาโนเทคโนโลยี

อาจารย์ที่ปรึกษาวิทยานิพนธ์ ดร.ดารินี พรหมโยธิน

อาจารย์ที่ปรึกษาวิทยานิพนธ์ร่วม -

อาจารย์ที่ปรึกษาวิทยานิพนธ์ร่วม -

หมายเลขวิทยานิพนธ์ KMITL-2014-NT-M-001-006

คณะกรรมการสอบวิทยานิพนธ์		ลายมือชื่อ
ศ.ดร.เบญจพล	ต้นฐี	เบญจพล ต้นฐี
ร.ดารินี	พรหมโยธิน	พรหมโยธิน
ร.สิริพัฒน์	ประไพเทพ	ประไพเทพ
ร.ทุติยาภรณ์	ทิวาวงศ์	ทุติยาภรณ์
ร.ทรงวุฒิ	สุรมิตร	สุรมิตร

น / เดือน / ปี ที่สอบ วันพุธที่ 21 พฤษภาคม พ.ศ. 2557 เวลา 11.00 น. เป็นต้นไป

สถานที่สอบ ณ อาคารวิจัยนาโนเทคโนโลยีสิรินธร ชั้น 1 ห้องประชุมนาโน

สถาบันเทคโนโลยีพระจอมเกล้าเจ้าคุณทหารลาดกระบัง

KING MONGKUT'S INSTITUTE OF TECHNOLOGY LADKRABANG

วิทยาลัยนาโนเทคโนโลยีพระจอมเกล้าลาดกระบังรับรองแล้ว

(ศาสตราจารย์ ดร.จิติ หนูแก้ว)

คณบดี

วันที่...27...เดือน...พฤษภาคม...พ.ศ. 2557

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า  
ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ตัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

หัวข้อวิทยานิพนธ์

การออกแบบโครงสร้างและสังเคราะห์สารอินทรีย์ไวแสง  
กลุ่มโคเนอร์-พาย-ไซยาโนอะคริลิกแอซิดสำหรับเซลล์  
แสงอาทิตย์ชนิดสีย้อมไวแสง

นักศึกษา

นายภควัต จิตตระทาน

รหัสประจำตัว

54670201

ปริญญา

วิทยาศาสตรมหาบัณฑิต

สาขาวิชา

นาโนวิทยาและนาโนเทคโนโลยี

พ.ศ.

2556

อาจารย์ที่ปรึกษาวิทยานิพนธ์

ดร. ดารินี พรหมโยธิน

อาจารย์ที่ปรึกษาวิทยานิพนธ์ร่วม

ดร. วีรัตน์ เจริญบุญ

### บทคัดย่อ

การปรับปรุงโครงสร้างของสีย้อมในเซลล์แสงอาทิตย์ชนิดสีย้อมไวแสงที่มีโครงสร้างพื้นฐานเป็นหมู่ให้อิเล็กตรอน-ตัวส่งผ่านอิเล็กตรอน-หมู่รับอิเล็กตรอนโดยการคำนวณโครงสร้างโมเลกุลด้วยระเบียบวิธีทางเคมีด้วยทฤษฎีความหนาแน่นอิเล็กตรอนเพื่อทำนายคุณสมบัติการดูดกลืนแสงและความสามารถในการถ่ายเทอิเล็กตรอนระหว่างสีย้อมกับโลหะออกไซด์งานวิจัยนี้ได้ศึกษาอิทธิพลของหมู่ฟังก์ชันที่ส่งผลต่อการกระจายอิเล็กตรอนของหมู่ในกลุ่มอนุพันธ์ของไตรฟีนิลอโรมาติก (หมู่ให้อิเล็กตรอน) โดยหมู่แทนที่ที่ศึกษาได้แก่ ไฮโดรเจน โบรมีน ฟีนอล เมทอกซีเบนซีน โทลูอิน อนิลิน และ คาบาริโซลพบว่าอนิลิน เป็นหมู่ให้อิเล็กตรอนที่ให้การดูดกลืนแสงที่มีความมากที่สุดมีการกระจายตัวของอิเล็กตรอนที่สภาวะพื้นและสภาวะเร้า เท่ากับ 53 เปอร์เซ็นต์ จากนั้นได้ศึกษาอิทธิพลของตัวส่งผ่านอิเล็กตรอนพบว่า เมื่อเพิ่มโมเลกุลที่เป็นตัวส่งผ่านอิเล็กตรอนเป็น ไทโอฟิน และไทอะโซลพบว่าไม่ส่งอิทธิพลต่อการเคลื่อนที่ของอิเล็กตรอน แต่ช่วยเพิ่มความเข้มและช่วงการดูดกลืนแสงที่มากขึ้น ซึ่งเป็นคุณสมบัติสำคัญที่ส่งผลต่อประสิทธิภาพของเซลล์แสงอาทิตย์ จากนั้นได้ศึกษาการประดิษฐ์เซลล์แสงอาทิตย์ชนิดสีย้อมไวแสงโดยใช้ตัวดูดกลืนแสงเป็นสีย้อมที่สังเคราะห์ ผ่านปฏิกิริยา Sonogashira coupling reaction และเลือกใช้ฟิล์มไททานเนียมไดออกไซด์เป็นชั้นสารกึ่งตัวนำแบบแถบพลังงานกว้างในชั้นไฟฟ้าเวคคิง โดยมีฟิล์มโลหะแพลทินัม เป็นชั้นตัวเร่งปฏิกิริยาในชั้นแคโทดซึ่งชั้นฟิล์มทั้งสองชั้นนี้เตรียมด้วยวิธีการพิมพ์แบบสกรีน สารละลายอิเล็กโทรไลต์ที่ใช้ในการทดลอง

เป็นระบบสารละลายครีตอกซ์ของไอโอดีน-ไตรไอโอดีน ( $I/I_3$ ) สีย้อมไวแสงที่สังเคราะห์ในงานวิจัยนี้  
เอกสารนี้เป็นเอกสารของมหาวิทยาลัยเทคโนโลยีพระจอมเกล้าธนบุรี การนำเอกสารนี้ไปใช้  
ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

ได้แก่สารในกลุ่มอนุพันธ์ของไดเมทิลแอมมีนที่มีหมู่ไทโอพีนเป็นตัวส่งผ่านอิเล็กตรอนและมีหมู่ไซยาโนกรีกเอเชียคเป็นหมู่รับอิเล็กตรอนได้ค่าประสิทธิภาพ = 1.14 เปอร์เซ็นต์



เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้าไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

<b>Thesis Title</b>	Structural design and synthesis of organic dye sensitizers of donor- $\pi$ -cyanoacrylicacid for dye-sensitized solar cells
<b>Student</b>	Pakawat Chittratan
<b>Student ID</b>	54670201
<b>Degree</b>	Master of Science
<b>Program</b>	Nanoscience and Nanotechnology
<b>Year</b>	2013
<b>Thesis Advisor</b>	Dr. Darinee Phromyothin
<b>Thesis Coadvisor</b>	Dr. Wirat Jareanboon

### ABSTRACT

The organic dyes based donor-linker-accepter were designed and synthesized as photosensitizers for the application of dye-sensitized solar cells (DSSCs). The quantum chemical calculation with density functional theory (DFT) and time-dependent DFT (TD-DFT) calculations has employed to investigate the electron distribution, frontier molecular orbitals, absorption spectra and the intramolecular charge transfer (HOMO-LUMO) of the dyes.

An effect of aromatic donor group including H, phenol, toluene, aniline, methoxybenzene and carbarzole was studied. The results found that the aniline moiety was the best donor group due to their more red shifted absorption and the lowest excitation energy between HOMO and LUMO state (3.10 eV) with 53% distribution of electrons in ground state and the excitation state.

In addition, the effect of linker moieties including thiophene and thiazole between triphenyl donor and cyanoacrylic group was then studied. The linker does not influence the electrons mobility; however, it has been shown to enhance the intensity and the absorption spectra which are important features that affect the performance of DSSCs. The fabrication of DSSCs consists of dimethylamine derivative

dyes synthesized by Sonogashira coupling reaction, TiO<sub>2</sub> film semiconductor layer as a working electrodes, platinum metal film as a counter electrode and redox couple solution of iodide - triiodide ( I / I<sub>3</sub><sup>-</sup> ) as electrolyte. The efficiency of DSSCs, dimethylaminederivative with thiophene linker and cyanoarylic acceptor synthesized dye, is 1.14 %.



เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า  
ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

# กิตติกรรมประกาศ

วิทยานิพนธ์ฉบับนี้ สำเร็จได้ด้วยดี ด้วยความกรุณา ความเอาใจใส่ แนะนำและช่วยเหลือใน  
ทุกด้านเสมอมาจาก ดร.ดารินี พรหมโยธิน อาจารย์ที่ปรึกษาที่เข้าใจลูกศิษย์เป็นอย่างดี ดร.วิรัตน์  
เจริญบุญ อาจารย์ที่ปรึกษาร่วมที่คอยชี้แนะ บอกกล่าว ให้คำแนะนำให้กับลูกศิษย์เสมอมา  
ขอขอบพระคุณอาจารย์ที่ให้ความรู้และดูแลลูกศิษย์ตลอดการศึกษานี้

ขอขอบพระคุณ ศ.ดร.จิตติ หนูแก้ว และวิทยาลัยนาโนเทคโนโลยีพระจอมเกล้าลาดกระบัง ที่  
ให้โอกาสและสอนให้รู้จักเทคโนโลยีใหม่ๆ โดยเฉพาะนาโนเทคโนโลยี รวมไปถึงกระบวนการวิจัยใน  
ระดับปริญญาโทนี้

ขอขอบคุณทุนการศึกษาจากศูนย์ความเป็นเลิศทางด้านฟิสิกส์ สำหรับสนับสนุนการศึกษา  
สำหรับงานวิจัยในระดับปริญญาโทนี้

ขอขอบคุณคณะกรรมการที่ช่วยดูแล ชี้แนะ และแก้ไขวิทยานิพนธ์ให้ถูกต้อง สมบูรณ์  
อาจารย์ทุกท่านที่ให้คำปรึกษาและข้อเสนอแนะสำหรับการศึกษาและการทำวิจัยตลอดมา

ขอบคุณสมาชิกทุกคนในห้องแลป (พีปาล์ม พีสอง โบบาน หนูแฮมมิ่ง พีหญิง พีพีต พีมี)  
รวมทั้งเพื่อน พี น้อง ทุกคนในวิทยาลัยนาโนฯ ที่ให้คำปรึกษา ช่วยเหลือ โดยเฉพาะพีปาล์ม ที่  
ถ่ายทอดวิชาความรู้ และเทคนิคต่างๆ ในการทำงานวิจัย ทำให้ข้าพเจ้าได้รับประสบการณ์ที่ดี และ  
เป็นช่วงเวลาที่สำคัญช่วงหนึ่งในชีวิต

และสุดท้าย ขอขอบพระคุณบุคคลที่สำคัญ คือ บิดา มารดา และครอบครัวอันเป็นที่รักยิ่ง ซึ่ง  
ได้ดูแลและช่วยเหลือข้าพเจ้ามาเป็นอย่างดี พร้อมทั้งให้โอกาสทางการศึกษาอย่างเต็มที่ และยังให้  
กำลังใจ และเอาใจใส่เสมอมาในทุกๆ ด้าน อันหาที่เปรียบมิได้ ข้าพเจ้าขอระลึกในพระคุณอันสุด  
ประมาณ และขอกราบขอบพระคุณมา ณ ที่นี้

ภควัต จิตตระทาน

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า  
ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

# สารบัญ

หน้า

บทคัดย่อภาษาไทย.....	I
บทคัดย่อภาษาอังกฤษ.....	III
กิตติกรรมประกาศ.....	V
สารบัญ.....	VI
สารบัญตาราง.....	IX
สารบัญรูป.....	XI
บทที่ 1 บทนำ.....	1
1.1 ความเป็นมาของงานวิจัย.....	1
1.2 ความมุ่งหมายและวัตถุประสงค์ของงานวิจัย.....	2
1.3 สมมติฐานงานวิจัย.....	2
1.4 ขอบเขตงานวิจัย.....	2
1.5 ประโยชน์ที่คาดว่าจะได้รับ.....	3
1.6 รายละเอียดงานวิจัย.....	3
บทที่ 2 ทฤษฎีและหลักการ.....	5
2.1 พลังงานจากดวงอาทิตย์.....	5
2.2 เซลล์แสงอาทิตย์ (solar cell).....	6
2.2.1 การผลิตไฟฟ้าจากพลังงานแสงอาทิตย์.....	7
2.2.2 ชนิดของเซลล์แสงอาทิตย์.....	7
2.3 เซลล์แสงอาทิตย์ชนิดสีย้อมไวแสง (Dye-Sensitized Solar Cell, DSSC).....	9
2.3.1 ส่วนประกอบของเซลล์แสงอาทิตย์ชนิดสีย้อมไวแสง.....	10
2.3.2 ฟิล์มบางออกไซด์นำไฟฟ้าโปร่งแสง (Transparent conducting oxide thin film, TCO).....	12
2.3.3 ไททาเนียมไดออกไซด์.....	12
2.3.4 สีย้อมไวแสง (Photo sensitizer).....	14
2.3.5 สารละลายอิเล็กโทรไลต์ (electrolyte solution).....	16

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่นิยมนำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า  
ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

## สารบัญ(ต่อ)

หน้า

2.3.6 ขั้วไฟฟ้าเคาน์เตอร์ (Counter Electrode).....	16
2.4 หลักการแปลงพลังงานแสงเป็นพลังงานไฟฟ้าของเซลล์แสงอาทิตย์ชนิดสีย้อมไวแสง.....	17
2.5 ปัจจัยที่มีผลต่อการทำงานของเซลล์แสงอาทิตย์.....	18
2.5.1 รังสีดวงอาทิตย์ที่ผิวโลก.....	18
2.5.2 องค์ประกอบของแสงอาทิตย์ที่มีผลต่อค่าประสิทธิภาพการเปลี่ยนพลังงาน ของเซลล์แสงอาทิตย์.....	19
2.5.3 ค่ามวลอากาศ(Air mass).....	19
2.6 การวัดประสิทธิภาพของเซลล์แสงอาทิตย์.....	20
2.6.1 ค่าพารามิเตอร์ที่เกี่ยวข้องกับการวัดประสิทธิภาพของเซลล์แสงอาทิตย์.....	20
2.7 เทคนิคการวิเคราะห์ด้วยเครื่องยูวี-วิสิเบิลสเปกโทรโฟโตมิเตอร์.....	23
2.7.1 ส่วนประกอบของเครื่องยูวี-วิสิเบิลสเปกโทรโฟโตมิเตอร์.....	24
2.7.2 การวิเคราะห์เชิงคุณภาพและปริมาณ.....	25
2.8 เทคนิคการวิเคราะห์ด้วยเครื่องนิวเคลียร์แมกเนติกเรโซแนนซ์สเปกโทรสโกปี (Nuclear Magnetic Resonance Spectroscopy).....	26
2.8.1 ส่วนประกอบของเครื่องนิวเคลียร์แมกเนติกเรโซแนนซ์สเปกโทรสโกปี.....	27
2.8.2 การวิเคราะห์และการแปลผลเครื่องนิวเคลียร์แมกเนติกเรโซแนนซ์สเปกโทรสโกปี.....	27
2.9 เทคนิคการวิเคราะห์ด้วยเครื่องแมสสเปกโทรเมทรี (Mass spectrometry).....	28
2.9.1 ระบบเครื่องมือแมสสเปกโทรมิเตอร์.....	29
บทที่ 3 ขั้นตอนการดำเนินงานวิจัย.....	30
3.1 การคำนวณและออกแบบสีย้อมไวแสง โดยการคำนวณทางเคมีควอนตัมคอมพิวเตอร์ (Quantum Chemical Calculation).....	30
3.1.1 การทำนายโครงสร้างเสถียร (Optimization).....	30
3.1.2 การคำนวณพลังงาน (Energy) ของโมเลกุลที่สถานะเร้า.....	31
3.1.3 Density of state (DOS).....	31
3.2 การสังเคราะห์สีย้อมไวแสง เพื่อใช้เป็นสีย้อมไวแสงในเซลล์แสงอาทิตย์ชนิดสีย้อมไวแสง.....	31

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า  
ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

## สารบัญ (ต่อ)

หน้า

3.2.1 สารเคมีที่ใช้ในการทดลอง.....	31
3.2.1 อุปกรณ์ที่ใช้ในการทดลอง.....	32
3.2.3 การสังเคราะห์สีย้อมไวแสงที่มีไดเมทิลแอมมินเป็นหมู่ให้อิเล็กตรอน.....	32
3.2.4 ขั้นตอนการสังเคราะห์.....	32
3.3 การเตรียมเซลล์แสงอาทิตย์ชนิดสีย้อมไวแสง.....	33
3.3.1 การเตรียมขั้วไฟฟ้าเวคคิง.....	33
3.3.2 การเตรียมขั้วแคโทด.....	37
3.3.3 การเตรียมสารละลายอิเล็กโทรไลต์.....	38
3.3.4 การประกอบเซลล์แสงอาทิตย์ชนิดสีย้อมไวแสง.....	39
3.3.5 การสร้างเซลล์แสงอาทิตย์ชนิดสีย้อมไวแสง และการวัดประสิทธิภาพ ของเซลล์ แสงอาทิตย์.....	40
บทที่ 4 ผลการทดลอง.....	41
4.1 การคำนวณทางเคมีคอมพิวเตอร์.....	42
4.1.1 การศึกษาอิทธิพลของหมู่ให้อิเล็กตรอนที่ส่งผลต่อการกระจายอิเล็กตรอนของหมู่ ในกลุ่มอนุพันธ์ของไตรฟีนิล (Donor).....	42
4.1.2 การศึกษาอิทธิพลของตัวส่งผ่านอิเล็กตรอนที่ส่งผลต่อการกระจายอิเล็กตรอน ในกลุ่มอนุพันธ์ของไตรฟีนิล (Linker).....	50
4.1.3 การคำนวณทางเคมีควอนตัม เพื่อศึกษาสมบัติต่างๆ ของสีย้อมไวแสงก่อนทำการ สังเคราะห์.....	63
4.1.4 การศึกษาการกระจายตัวของอิเล็กตรอนในสีย้อมกลุ่มอนุพันธ์ไตรฟีนิล เมื่อสีย้อมไวแสงยึดเกาะกับโครงสร้างไททาเนียมไดออกไซด์.....	67
4.2 การสังเคราะห์สีย้อมไวแสง.....	67
4.2.1 การสังเคราะห์สีย้อมไวแสงที่มีหมู่ให้อิเล็กตรอน (Electron donor) เป็นไดเมทิลอนิสิน และมีหมู่ไทโอฟินเป็นตัวส่งผ่านอิเล็กตรอน.....	69
บทที่ 5 สรุปผลการทดลอง.....	77

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า  
ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

## สารบัญตาราง

ตารางที่	หน้า
2.1 คุณสมบัติทางกายภาพบางประการของสารไททาเนียมไดออกไซด์.....	14
4.1 ค่าพลังงานกระตุ้น (Excitation energy) ค่าความแรงออสซิลเลเตอร์ (oscillator strengths, $f$ ) และการทรานซิชันที่ได้จากการคำนวณด้วยระเบียบวิธี TDDFT-B3LYP/6-31G (d,p).....	44
4.2 เพอร์เซ็นต์ความหนาแน่นของอิเล็กตรอนแต่ละส่วนของโมเลกุลสีย้อมไวแสง ในกลุ่มอนุพันธ์ของไตรฟีนิล .....	45
4.3 ค่าพลังงานกระตุ้น (Excitation energy) ค่าความแรงออสซิลเลเตอร์ (oscillator strengths, $f$ ) และการทรานซิชันที่ได้จากการคำนวณด้วยระเบียบวิธี TDDFT-B3LYP/6-31G (d,p).....	48
4.4 เพอร์เซ็นต์ความหนาแน่นของอิเล็กตรอนแต่ละส่วนของโมเลกุล ในกลุ่มของไดฟีนิลอนีนและไดเมทิลอนีน .....	48
4.5 ค่าพลังงานกระตุ้น (Excitation energy) ค่าความแรงออสซิลเลเตอร์ (oscillator strengths, $f$ ) และการทรานซิชันที่ได้จากการคำนวณด้วยระเบียบวิธี TDDFT-B3LYP/6-31G (d,p).....	52
4.6 เพอร์เซ็นต์ความหนาแน่นของอิเล็กตรอนแต่ละส่วนของโมเลกุล สีย้อมไวแสงในกลุ่มอนุพันธ์ของไตรฟีนิล .....	53
4.7 ค่าพลังงานกระตุ้น (Excitation energy) ค่าความแรงออสซิลเลเตอร์ (oscillator strengths, $f$ ) และการทรานซิชันที่ได้จากการคำนวณด้วยระเบียบวิธี TDDFT-B3LYP/6-31G (d,p).....	58
4.8 เพอร์เซ็นต์ความหนาแน่นของอิเล็กตรอนแต่ละส่วนของโมเลกุลสีย้อมไวแสงในกลุ่ม อนุพันธ์ของไตรฟีนิลที่มีหมู่ไทโอฟีนเป็นตัวส่งผ่านอิเล็กตรอน.....	58
4.9 ค่าพลังงานกระตุ้น (Excitation energy) ค่าความแรงออสซิลเลเตอร์ (oscillator strengths, $f$ ) และการทรานซิชันที่ได้จากการคำนวณด้วยระเบียบวิธี TDDFT-B3LYP/6-31G (d,p).....	61

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า  
ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา ~~~~~X~~~~ ต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

## สารบัญตาราง(ต่อ)

ตารางที่	หน้า
4.10 เปอร์เซ็นต์ความหนาแน่นของอิเล็กตรอนแต่ละส่วนของโมเลกุลสีย้อมไวแสงในกลุ่มอนุพันธ์ของไตรฟีนิลที่มีหมู่ไทโอพีนเป็นตัวส่งผ่านอิเล็กตรอน.....	62
4.11 ค่าพลังงานกระตุ้น (Excitation energy) ค่าความแรงออสซิลเลเตอร์ (oscillator strengths, $f$ ) และการทรานซิชันที่ได้จากการคำนวณด้วยระเบียบวิธี TDDFT-B3LYP/6-31G (d,p).....	65
4.12 เปอร์เซ็นต์ความหนาแน่นของอิเล็กตรอนแต่ละส่วนของโมเลกุลสีย้อมไวแสงในกลุ่มอนุพันธ์ของไตรฟีนิลที่มีหมู่ไทโอพีนเป็นตัวส่งผ่านอิเล็กตรอน.....	65
4.13 ความยาวพันธะของหมู่รับอิเล็กตรอน.....	69
4.14 ค่าพารามิเตอร์ต่างๆ และประสิทธิภาพของเซลล์แสงอาทิตย์ชนิดสีย้อมไวแสงจากสีย้อมอินทรีย์ไวแสงในกลุ่มอนุพันธ์ไดเมทิลอนิลีนที่ได้จากการสังเคราะห์.....	76



เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า  
ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ตัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

## สารบัญรูป

รูปที่	หน้า
2.1 สเปกตรัมของรังสีจากดวงอาทิตย์.....	5
2.2 เซลล์แสงอาทิตย์ชนิดซิลิคอนแบบต่างๆ.....	8
2.3 เซลล์แสงอาทิตย์ชนิดสารอินทรีย์.....	9
2.4 ส่วนประกอบของเซลล์แสงอาทิตย์ชนิดสีย้อมไวแสง.....	11
2.5 โครงสร้างของไททาเนียมไดออกไซด์.....	13
2.6 สีย้อมไวแสงจากการสังเคราะห์.....	15
2.7 การแปลงพลังงานของเซลล์แสงอาทิตย์ชนิดสีย้อมไวแสง.....	17
2.8 ค่ามวลอากาศที่ชื้นและที่มวลอากาศมต่าง ๆ.....	20
2.9 กราฟแสดงสเปกตรัมแสงมาตรฐานที่ ASTM กำหนด.....	20
2.10 วงจรสมมูลของเซลล์แสงอาทิตย์.....	21
2.11 ลักษณะกระแสและแรงดันไฟฟ้าของเซลล์แสงอาทิตย์ (JV-Curve).....	22
2.12 การเกิดอันตรายกิริยาของสารเคมีกับการแผ่รังสีหรือแสง.....	23
2.13 องค์ประกอบของเครื่องยิวี-วีสิเบิลสเปกโตรโฟโตมิเตอร์.....	24
2.14 องค์ประกอบหลักของเครื่องนิวเคลียร์แมกเนติกเรโซแนนซ์สเปกโทรสโคปี.....	27
2.15 ระบบเครื่องมือแมสสเปกโตรมิเตอร์.....	29
3.1 ปฏิริยาในการสังเคราะห์สีย้อมไวแสงที่มีโตนเทิลแอมมีนเป็นหมู่ให้อิเล็กตรอน.....	32
3.2 ปฏิริยาการเปลี่ยนหมู่ฟังก์ชันของสีย้อมไวแสงที่มีโตนเทิลแอมมีนเป็นหมู่ให้อิเล็กตรอน.....	33
3.3 ไททาเนียมไดออกไซด์เพสต์ชนิด PST-18NR (TiO <sub>2</sub> แบบโปร่งแสง).....	34
3.4 บล็อกสกรีนสำหรับเทคนิคการพิมพ์แบบสกรีน.....	34
3.5 ขั้นตอนการเตรียมฟิล์มไททาเนียมไดออกไซด์.....	35
3.6 โครงสร้างชั้นฟิล์มไททาเนียมไดออกไซด์.....	35
3.7 อุณหภูมิการเผาแบบขึ้นบันไดของการเผาฟิล์มไททาเนียมไดออกไซด์.....	35
3.8 ชั้นฟิล์มไททาเนียมไดออกไซด์.....	36
3.9 การแช่สีย้อมไวแสงในสารละลายสีย้อมไวแสง.....	36
3.10 ชั้นของสีย้อมไวแสงบนฟิล์มไททาเนียมไดออกไซด์.....	37

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า  
ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ตัดแปลงเนื้อหา  $\chi$  ต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

## สารบัญรูป (ต่อ)

รูปที่	หน้า
3.11 แพลตินัมเพสต์.....	37
3.12 ชั้นฟิล์มแพลตินัมบนกระจกนำไฟฟ้า FTO.....	38
3.13 สารละลายอิเล็กโทรไลต์ระบบไอโอดีน/ไตรไอโอดีน ( $I^-/I_3^-$ ).....	38
3.14 โครงสร้างการประกอบเซลล์แสงอาทิตย์ชนิดสีย้อมไวแสง.....	39
3.15 เซลล์แสงอาทิตย์ชนิดสีย้อมไวแสงที่ประกอบแล้ว.....	39
3.16 เครื่องโซลาร์ซีมิคอนดักเตอร์พร้อมระบบวัดกระแสและแรงดันไฟฟ้า.....	40
4.1 โครงสร้างของสีย้อมไวแสงในกลุ่มอนุพันธ์ของไตรฟีนิล.....	42
4.2 Frontier Molecular orbital ของโมเลกุลสีย้อมไวแสงที่สถานะพื้นและสถานะเร้าของสีย้อมไวแสงในกลุ่มอนุพันธ์ของไตรฟีนิล.....	43
4.3 ค่าการดูดกลืนแสงของสีย้อมไวแสงในกลุ่มอนุพันธ์ของไตรฟีนิล.....	43
4.4 แถบพลังงานต้องห้ามของสีย้อมไวแสงในกลุ่มอนุพันธ์ของไตรฟีนิล.....	45
4.5 โครงสร้างของสีย้อมไวแสงในกลุ่มของไดฟีนิลอนิซีนและไดเมทิลอนิซีนที่ใช้ศึกษาอิทธิพลของหมู่ให้อิเล็กตรอน.....	46
4.6 Frontier Molecular Orbital ของโมเลกุลในกลุ่มของไดฟีนิลอนิซีนและไดเมทิลอนิซีน.....	47
4.7 ค่าการดูดกลืนแสงของสีย้อมไวแสงที่ใช้ศึกษาอิทธิพลของหมู่ให้อิเล็กตรอนในกลุ่มของไดฟีนิลอนิซีนและไดเมทิลอนิซีน.....	47
4.8 แถบพลังงานต้องห้ามของโมเลกุลในกลุ่มของไดฟีนิลอนิซีนและไดเมทิลอนิซีน.....	49
4.9 โครงสร้างของสีย้อมไวแสงในกลุ่มอนุพันธ์ของไตรฟีนิลที่ใช้ศึกษาอิทธิพลของหมู่ส่งผ่านอิเล็กตรอน.....	50
4.10 Frontier Molecular Orbital ของโมเลกุลสีย้อมไวแสงที่สถานะพื้นและสถานะเร้าของสีย้อมไวแสงในกลุ่มอนุพันธ์ของไตรฟีนิลที่มีวงแหวนเบนซีนเป็นตัวส่งผ่านอิเล็กตรอน.....	51
4.11 ค่าการดูดกลืนแสงของสีย้อมไวแสงในกลุ่มอนุพันธ์ของไตรฟีนิลที่มีวงแหวนเบนซีนเป็นตัวส่งผ่านอิเล็กตรอน.....	51
4.12 โครงสร้างของสีย้อมไวแสงแสดงการวางตัวของวงแหวนเบนซีน.....	52
4.13 แถบพลังงานต้องห้ามของสีย้อมไวแสงในกลุ่มอนุพันธ์ของไตรฟีนิล.....	54

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า  
 ไม่ว่าจะกรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ตัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

## สารบัญรูป (ต่อ)

รูปที่	หน้า
4.14 โครงสร้างของสีย้อมไวแสงที่ใช้ศึกษาอิทธิพลของจำนวนหมู่ไทโอพีนเมื่อใช้เป็นตัวส่งผ่านอิเล็กตรอน ในกลุ่มอนุพันธ์ของไตรฟีนิล.....	55
4.15 Frontier Molecular Orbital ของโมเลกุลสีย้อมไวแสงที่สภาวะพื้นและสภาวะเร้าของสีย้อมไวแสงในกลุ่มอนุพันธ์ของไตรฟีนิลที่มีหมู่ไทโอพีนเป็นตัวส่งผ่านอิเล็กตรอน.....	56
4.16 ค่าการดูดกลืนแสงของสีย้อมไวแสงในกลุ่มอนุพันธ์ของไตรฟีนิลที่ใช้ศึกษาอิทธิพลของการเพิ่มหมู่ไทโอพีนเป็นตัวส่งผ่านอิเล็กตรอน.....	56
4.17 การวางตัวของวงแหวนไทโอพีนในโครงสร้างสีย้อมไวแสง.....	57
4.18 แถบพลังงานต้องห้ามของสีย้อมไวแสงในกลุ่มอนุพันธ์ของไตรฟีนิลที่มีหมู่ไทโอพีนเป็นตัวส่งผ่านอิเล็กตรอน.....	59
4.19 โครงสร้างของสีย้อมไวแสงในกลุ่มอนุพันธ์ของไตรฟีนิลที่มีหมู่ไทโอพีน ไทอะโซลและอิมิดาโซลเป็นตัวส่งผ่านอิเล็กตรอน.....	60
4.20 Frontier Molecular Orbital ของโมเลกุลสีย้อมไวแสงที่สภาวะพื้นและ สภาวะเร้าของสีย้อมไวแสงในกลุ่มอนุพันธ์ของไตรฟีนิลที่มีหมู่ไทโอพีน ไทอะโซลและอิมิดาโซล เป็นตัวส่งผ่านอิเล็กตรอน.....	60
4.21 ค่าการดูดกลืนแสงของสีย้อมไวแสงในกลุ่มอนุพันธ์ของไตรฟีนิลที่ใช้ศึกษาอิทธิพลของการเพิ่มหมู่ไทโอพีนเป็นตัวส่งผ่านอิเล็กตรอน.....	61
4.22 แถบพลังงานต้องห้ามของสีย้อมไวแสงในกลุ่มอนุพันธ์ของไตรฟีนิลที่มีหมู่ไทโอพีนเป็นตัวส่งผ่านอิเล็กตรอน.....	62
4.23 โครงสร้างของสีย้อมไวแสงในกลุ่มอนุพันธ์ของไตรฟีนิลที่มีหมู่ไทโอพีน เป็นตัวส่งผ่านอิเล็กตรอน.....	63
4.24 Frontier Molecular Orbital ของโมเลกุลสีย้อมไวแสงที่สภาวะพื้นและสภาวะเร้าของสีย้อมไวแสงในกลุ่มอนุพันธ์ของโดเมทิลอนิสีน ที่มีหมู่ไทโอพีนเป็นตัวส่งผ่านอิเล็กตรอน.....	63
4.25 ค่าการดูดกลืนแสงของสีย้อมไวแสงในกลุ่มอนุพันธ์ของโดเมทิลอนิสีนที่มีตัวส่งผ่านอิเล็กตรอนเป็นหมู่ไทโอพีน.....	64

## สารบัญรูป (ต่อ)

รูปที่	หน้า
4.26 แถบพลังงานต้องห้ามของสีย้อมไวแสงในกลุ่มอนุพันธ์ของไดเมทิลอนิซีนที่มีหมู่ไทโอพีนเป็น ตัวส่งผ่านอิเล็กตรอน.....	66
4.27 โครงสร้างสีย้อมไวแสงในกลุ่มอนุพันธ์ไดฟีนิลอนิซีน ที่ยึดเกาะกับโครงสร้าง ไททาเนียมไดออกไซด์.....	67
4.28 Frontier Molecular Orbital ของโมเลกุลสีย้อมไวแสงที่สภาวะพื้นและ สภาวะเร้าของสีย้อมไวแสงในกลุ่มอนุพันธ์ของไดเมทิลอนิซีน ที่ยึดเกาะกับโครงสร้างไททาเนียมไดออกไซด์.....	68
4.29 ขั้นตอนการสังเคราะห์สีย้อมไวแสง.....	69
4.30 การวิเคราะห์โมเลกุลสีย้อมไวแสงด้วยเทคนิคนิวเคลียร์แมกเนติกเรโซแนนซ์.....	70
4.31 การวิเคราะห์โมเลกุลสีย้อมไวแสง ด้วยเทคนิคนิวเคลียร์แมกเนติกเรโซแนนซ์.....	71
4.32 ผลการวิเคราะห์ด้วยเทคนิคแมสสเปกโทรสโคปี.....	72
4.33 ผลการวิเคราะห์ด้วยเทคนิคอินฟราเรดสเปกโทรสโคปี.....	73
4.34 ค่าการดูดกลืนพลังงานแสงของสีย้อมไวแสงที่ได้จากการสังเคราะห์.....	74
4.35 แผนภาพแถบพลังงานของเซลล์แสงอาทิตย์ชนิดสีย้อมไวแสงโดยใช้สีย้อมไวแสง ในกลุ่มอนุพันธ์ของไดเมทิลอนิซีน.....	75
4.36 กราฟกระแสและแรงดันไฟฟ้าของเซลล์แสงอาทิตย์ชนิดสีย้อมไวแสงโดยใช้ สีย้อมอินทรีย์ไวแสงในกลุ่มอนุพันธ์ไดเมทิลอนิซีนที่ได้จากการสังเคราะห์.....	76

## บทที่ 1

### บทนำ

#### 1.1 ความเป็นมาของงานวิจัย

พลังงานไฟฟ้า นับเป็นปัจจัยที่สำคัญอย่างหนึ่งในชีวิตประจำวันของมนุษย์ ซึ่งแหล่งพลังงานที่สำคัญในการผลิตกระแสไฟฟ้าจำเป็นต้องใช้พลังงานจากแหล่งพลังงานอื่นๆ เช่น เชื้อเพลิงจากซากฟอสซิล, ถ่านหิน, ปิโตรเลียม และ แก๊สธรรมชาติ ซึ่งปล่อยคาร์บอนไดออกไซด์มหาศาลก่อให้เกิดมลพิษต่อสิ่งแวดล้อม อันเป็นสาเหตุทำให้เกิดภาวะโลกร้อนได้

เนื่องจากแนวโน้มความต้องการพลังงานไฟฟ้าเพื่อการใช้งาน มีค่าเพิ่มขึ้นมาเรื่อยๆ ตั้งแต่อดีตจนถึงปัจจุบันและไม่สามารถเพียงพอได้ในอนาคต ดังนั้นการวิจัยและพัฒนาพลังงานทางเลือกอื่นๆ เพื่อใช้เป็นพลังงานทดแทน เช่น พลังงานลม, พลังงานน้ำ, พลังงานแสงอาทิตย์, พลังงานน้ำขึ้นน้ำลง, พลังงานคลื่น, พลังงานความร้อนใต้พิภพและเชื้อเพลิงชีวภาพ จึงเป็นทางเลือกพลังงานที่สำคัญอีกทางหนึ่ง ซึ่งเทคโนโลยีการผลิตกระแสไฟฟ้าด้วยเซลล์แสงอาทิตย์ ถือได้ว่านำมาใช้งานได้ อย่างประสบความสำเร็จมากที่สุด เนื่องจากดวงอาทิตย์ให้พลังงานจำนวนมหาศาลแก่โลกของเรา แสงอาทิตย์เป็นพลังงานหมุนเวียนที่สะอาดไม่ทำปฏิกิริยาใดๆ อันจะทำให้สิ่งแวดล้อมเป็นพิษ เซลล์แสงอาทิตย์จึงเป็นสิ่งประดิษฐ์ทางอิเล็กทรอนิกส์ชนิดหนึ่ง ที่ถูกนำมาใช้ผลิตไฟฟ้าโดยไม่สร้างมลพิษให้สิ่งแวดล้อม ซึ่งเซลล์แสงอาทิตย์สามารถเปลี่ยนเซลล์แสงอาทิตย์ให้เป็นพลังงานไฟฟ้าได้โดยตรง

เซลล์แสงอาทิตย์เป็นสิ่งประดิษฐ์ที่สามารถแปลงพลังงานแสงให้เป็นพลังงานไฟฟ้าได้ด้วยการปรากฏการณ์โฟโตโวลตาอิก เซลล์แสงอาทิตย์ชนิดแรก ได้แก่ เซลล์แสงอาทิตย์ซึ่งทำมาจากสารกึ่งตัวนำพวกซิลิคอนได้รับการพัฒนาขึ้นในปี ค.ศ. 1954 การใช้งานเซลล์แสงอาทิตย์เริ่มจากการใช้งานในยานอวกาศ ค.ศ. 1958 และเมื่อเกิดเหตุการณ์วิกฤติน้ำมันในต้นทศวรรษที่ 1970 เซลล์แสงอาทิตย์จึงได้รับความสนใจในการใช้เป็นแหล่งพลังงานทดแทนบนพื้นโลกจนถึงปัจจุบัน

เซลล์แสงอาทิตย์ที่นิยมใช้งานบนพื้นโลกมากที่สุดมี 3 ชนิด ได้แก่ เซลล์แสงอาทิตย์ชนิดผลึกเดี่ยวซิลิคอน เซลล์แสงอาทิตย์ชนิดผลึกโพลีซิลิคอน และเซลล์แสงอาทิตย์ชนิดฟิล์มบางอะมอร์ฟัส แต่ในการผลิตเซลล์แสงอาทิตย์ที่ทำจากซิลิคอน ตามปกติแล้วต้องใช้ซิลิคอนบริสุทธิ์อีกทั้งยังมีกระบวนการผลิตที่ยุ่งยากซับซ้อนทำให้เราต้องเสียค่าใช้จ่ายในการผลิตสูงมาก จึงได้มีการพัฒนาเซลล์แสงอาทิตย์อีกชนิดหนึ่งที่นำวัสดุอิเล็กทรอนิกส์ที่เป็นสารอินทรีย์มาใช้คือ เซลล์แสงอาทิตย์ชนิดสีย้อม

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่าจะกรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ตัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

ไวแสง (Dye-Sensitized Solar Cell) ซึ่งใช้ต้นทุนในการผลิตที่ต่ำกว่า มีขั้นตอนในการผลิตที่ง่ายกว่า และมีความปลอดภัยในขั้นตอนการผลิตสูงกว่า

## 1.2 ความมุ่งหมายและวัตถุประสงค์งานวิจัย

1.2.1 เพื่อออกแบบโครงสร้างของโมเลกุลสีย้อมไวแสง ที่ใช้ในเซลล์แสงอาทิตย์ชนิดสีย้อมไวแสง โดยการคำนวณโดยระเบียบวิธีทางเคมีควอนตัม

1.2.2 เพื่อพัฒนาและปรับปรุงโครงสร้างของสีย้อมไวแสง ที่ใช้ในเซลล์แสงอาทิตย์ชนิดสีย้อมไวแสง โดยการคำนวณโดยระเบียบวิธีทางเคมีควอนตัม

1.2.3 เพื่อสังเคราะห์โครงสร้างของโมเลกุลสีย้อมไวแสงที่ได้ผ่านการออกแบบแล้วจากการคำนวณทางเคมีควอนตัม

1.2.4 เพื่อประดิษฐ์เซลล์แสงอาทิตย์ชนิดสีย้อมไวแสงจากสีย้อมไวแสงที่สังเคราะห์ขึ้น

## 1.3 สมมติฐานงานวิจัย

เซลล์แสงอาทิตย์ชนิดสีย้อมไวแสง เป็นอุปกรณ์ซึ่งทำหน้าที่เปลี่ยนพลังงานแสงเป็นพลังงานไฟฟ้า ส่วนประกอบที่สำคัญอย่างหนึ่งซึ่งส่งผลต่อคาประสิทธิภาพของเซลล์แสงอาทิตย์ชนิดนี้นั้นคือคือสีย้อมไวแสง ในงานวิจัยนี้ใช้สีย้อมอินทรีย์ไวแสงที่มีส่วนประกอบของหมู่ให้อิเล็กตรอนเป็นหมู่ไทรฟีนิลแอมมีน และมีหมู่ไซยาโนอะคริลิกเป็นหมู่รับอิเล็กตรอน โดยสีย้อมอินทรีย์ไวแสงที่ได้ผ่านการออกแบบและปรับปรุงโครงสร้างแล้ว จะสามารถเพิ่มประสิทธิภาพของเซลล์แสงอาทิตย์ชนิดสีย้อมไวแสง อีกทั้งยังใช้ทดแทนสีย้อมไวแสงที่เป็นสารประกอบเชิงซ้อนของโลหะ ทำให้ลดมลพิษที่จะเกิดขึ้นต่อสิ่งแวดล้อมอีกด้วย

## 1.4 ขอบเขตงานวิจัย

ในงานวิจัยนี้เริ่มต้นจากการศึกษาทฤษฎี หลักการทำงานของสีย้อมไวแสงที่ใช้ในเซลล์แสงอาทิตย์ชนิดสีย้อมไวแสง จากนั้นศึกษาปฏิกิริยาเคมี และงานวิจัยที่เกี่ยวข้องที่สามารถใช้เป็นข้อมูลในการสังเคราะห์สีย้อมอินทรีย์ไวแสงได้ โดยเริ่มศึกษาจากการคำนวณทางเคมีควอนตัมเพื่อใช้ทำนายคุณสมบัติพื้นฐานของสีย้อมอินทรีย์ไวแสง จากนั้นใช้การคำนวณทางเคมีควอนตัมศึกษาการปรับปรุงโครงสร้างของสีย้อมไวแสงเพื่อเพิ่มประสิทธิภาพโดยการศึกษาอิทธิพลของหมู่ให้อิเล็กตรอนและหมู่ส่งผ่านอิเล็กตรอน เพื่อสังเคราะห์สีย้อมอินทรีย์ไวแสงที่ได้ทำนายประสิทธิภาพแล้ว จากนั้นนำไปประกอบเป็นเซลล์แสงอาทิตย์ชนิดสีย้อมไวแสง โดยการเตรียมขั้วไฟฟ้าเวคคิงด้วยฟิล์มนาโนไททาเนียมไดออกไซด์ และขั้วแคโทดเป็นฟิล์มโลหะแพลตินัม (Pt) ด้วยเทคนิคการสกรีนลงบนเอพ็อกซีเรซินที่เคลือบไว้บนกระจกใสที่เตรียมไว้ก่อนหน้านั้น เมื่อได้เซลล์แล้วนำไปเปรียบเทียบกับเซลล์ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ตัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

กระจกนำไฟฟ้า โดยใช้สารละลายอิเล็กโทรไลต์ระบบสารละลายคู่รีดอกซ์ของไอโอดีน/ไตรไอโอดีน ( $I^-/I_3^-$ ) เพื่อศึกษาค่าประสิทธิภาพ

## 1.5 ประโยชน์ที่คาดว่าจะได้รับ

1.5.1 สามารถทำนายคุณสมบัติพื้นฐานของสีย้อมอินทรีย์ไวแสง โดยใช้การคำนวณทางเคมีควอนตัม

1.5.2 สามารถทำนายอิทธิพลของหมู่ให้ และหมู่ส่งผ่านอิเล็กตรอนของสีย้อมอินทรีย์ไวแสง ที่มีต่อคุณสมบัติพื้นฐานของสีย้อมอินทรีย์ไวแสงได้

1.5.3 สามารถสังเคราะห์สีย้อมไวแสงที่ผ่านการออกแบบและทำนายคุณสมบัติพื้นฐานแล้ว

1.5.4 สามารถประดิษฐ์เซลล์แสงอาทิตย์ชนิดสีย้อมไวแสงเพื่อใช้ศึกษาค่าประสิทธิภาพของเซลล์แสงอาทิตย์ชนิดสีย้อมไวแสงจากสีย้อมไวแสงที่สังเคราะห์ขึ้น

1.5.5 สามารถใช้เครื่องมือและอุปกรณ์ในการวัดค่าประสิทธิภาพของเซลล์แสงอาทิตย์ชนิดสีย้อมไวแสงได้

1.5.6 สามารถวิเคราะห์ปัญหาและข้อบกพร่องในการสร้างเซลล์แสงอาทิตย์ชนิดสีย้อมไวแสงพัฒนาและแก้ไขให้มีประสิทธิภาพดีขึ้นได้

1.5.7 สามารถนำเซลล์แสงอาทิตย์ชนิดสีย้อมไวแสงที่ประดิษฐ์ขึ้นไปพัฒนาต่อเพื่อเป็นทางเลือกของแหล่งพลังงานในอนาคต

## 1.6 รายละเอียดงานวิจัย

ในวิทยานิพนธ์เล่มนี้แบ่งออกเป็น 5 ส่วน โดยในแต่ละบทมีรายละเอียดดังนี้

บทที่ 1 บทนำ กล่าวถึงความเป็นมาและความสำคัญของปัญหา จุดมุ่งหมายและวัตถุประสงค์ สมมติฐานของการศึกษา ขอบเขตของการวิจัย และรายละเอียดของการศึกษาวิทยานิพนธ์เล่มนี้

บทที่ 2 เป็นส่วนของทฤษฎีที่เกี่ยวข้องกับเซลล์แสงอาทิตย์ โดยจะเป็นหลักการทำงานของเซลล์แสงอาทิตย์ชนิดสีย้อมไวแสง ประเภทของสีย้อมไวแสง ทฤษฎีการคำนวณทางเคมีควอนตัมที่ใช้ในการทำนายโครงสร้างของสีย้อมไวแสง รวมถึงทฤษฎีต่างๆ และเครื่องมือที่ใช้ในการทดลอง ที่เกี่ยวข้องในการวัดค่าต่างๆ ของเซลล์แสงอาทิตย์ชนิดสีย้อมไวแสง

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่าจะกรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

บทที่ 3 ขั้นตอนการดำเนินงานวิจัย ประกอบไปด้วยการศึกษา ออกแบบโครงสร้างโมเลกุลของ สีย้อมไวแสง การเลือกศึกษาชนิดหมู่ให้อิเล็กตรอน และหมู่ส่งผ่านอิเล็กตรอนของโมเลกุลสีย้อมไวแสง ผ่านการคำนวณทางเคมีควอนตัม ขั้นตอนการสังเคราะห์สีย้อมไวแสง การออกแบบและสร้างเซลล์ แสงอาทิตย์ชนิดสีย้อมไวแสงรวมถึงการวัดประสิทธิภาพของเซลล์แสงอาทิตย์

บทที่ 4 ผลการทดลองและวิเคราะห์ผลการทดลอง แสดงการทดลองออกแบบโครงสร้าง โมเลกุลสีย้อมไวแสงโดยการศึกษาอิทธิพลของหมู่ให้อิเล็กตรอนและหมู่ส่งผ่านอิเล็กตรอนที่ต่างกัน โดยมีไซยาโนอะคริลิกเป็นหมู่รับอิเล็กตรอน โดยแสดงผลการทดลองต่างๆ เช่น ค่าการดูดกลืนแสง ของสีย้อมไวแสง การเคลื่อนที่ของอิเล็กตรอนภายในโมเลกุลของสีย้อมไวแสง ค่าแถบพลังงาน ต้องห้าม และค่าความหนาแน่นของอิเล็กตรอนในโครงสร้างที่สถานะพื้น และสถานะเร้ารวมไปถึงผล การศึกษาค่าประสิทธิภาพของเซลล์แสงอาทิตย์ชนิดสีย้อมไวแสง

บทที่ 5 บทสรุปและข้อเสนอแนะของงานวิจัย



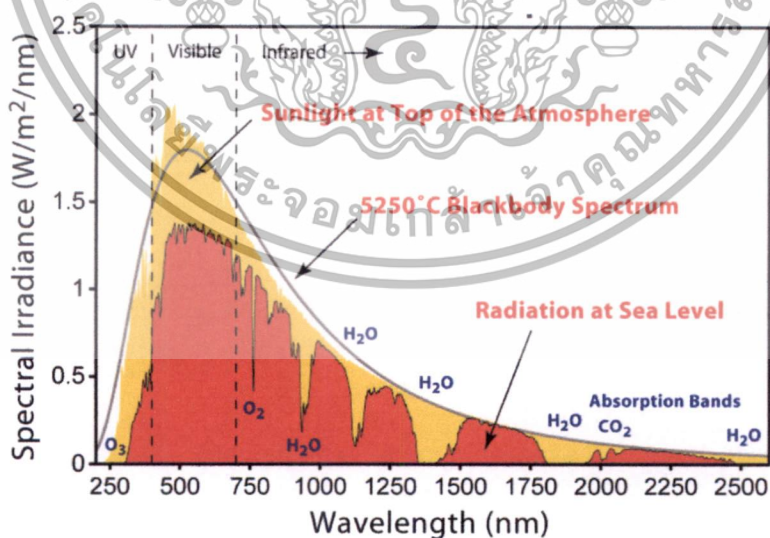
เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่าจะกรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

## บทที่ 2

### ทฤษฎีและหลักการ

#### 2.1 พลังงานจากดวงอาทิตย์

ดวงอาทิตย์เป็นแหล่งกำเนิดพลังงานทั้งทางตรงและทางอ้อมให้แก่โลก โดยแสงสว่างจากดวงอาทิตย์จะให้พลังงานและความร้อนเพื่อให้สิ่งมีชีวิตสามารถดำรงชีวิตอยู่ได้ ดวงอาทิตย์มีเส้นผ่านศูนย์กลางเท่ากับ 1.39 ล้านกิโลเมตร มีมวลเท่ากับ  $1.99 \times 10^{30}$  กิโลกรัม และมีความหนาแน่นเฉลี่ยเท่ากับ 1,410 กิโลกรัมต่อลูกบาศก์เมตร ประกอบด้วยธาตุหลักคือไฮโดรเจน ที่เหลือเป็นฮีเลียมและธาตุหนักอื่นๆ ดวงอาทิตย์เป็นกลุ่มก๊าซร้อนรูปทรงกลมที่มีความหนาแน่นสูง เปรียบได้กับเตาปฏิกรณ์ที่เกิดปฏิกิริยาฟิวชันของก๊าซที่เป็นส่วนประกอบอย่างต่อเนื่อง พลังงานคลื่นแม่เหล็กไฟฟ้าที่แผ่ออกจากดวงอาทิตย์เป็นพลังงานที่ได้จากปฏิกิริยาการแตกตัวหลายชนิด ปฏิกิริยาหนึ่งที่สำคัญ คือ การรวมตัวของไฮโดรเจนเป็นฮีเลียม โดยมวลส่วนที่หายไปของการรวมตัวจะเปลี่ยนรูปไปเป็นพลังงานที่เกิดภายในดวงอาทิตย์ และถ่ายเทออกมาที่ผิวและแผ่ออกสู่อวกาศ พลังงานของแสงอาทิตย์จะประกอบด้วยรังสีในทุกย่าน เช่น คลื่นวิทยุ ความร้อน แสงสว่าง รังสีอัลตราไวโอเล็ต รังสีเอกซ์ และรังสีแกมมา ความเข้มและความยาวคลื่นของรังสีแสดงดังรูปที่ 2.1



รูปที่ 2.1 สเปกตรัมของรังสีจากดวงอาทิตย์<sup>[30]</sup>

ใน 1 ชั่วโมง โลกได้รับพลังงานจากดวงอาทิตย์ประมาณ 174 เพตะวัตต์ (PW), 30 เพอร์เซ็นต์ ของพลังงานนี้ถูกสะท้อนกลับไปในอวกาศ ที่เหลือถูกดูดซับโดยเมฆ มหาสมุทรและพื้นดิน เอกสารนี้เป็นเอกสารพลังงานเพื่อการพัฒนาที่ยั่งยืนและไม่เป็นอันตรายและไม่ก่อให้เกิดมลพิษทางอากาศ ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

3,850,000 เอกซะจูล (EJ) ต่อปี ประมาณว่า พลังงานนี้ใน 1 ชั่วโมงมีปริมาณเกือบเท่ากับพลังงานที่โลกใช้ทั้งปี (510 เอกซะจูล ในปี 2009)

พลังงานนี้เป็นต้นกำเนิดของวัฏจักรของสิ่งมีชีวิตในโลก ทำให้เกิดการหมุนเวียนของน้ำและธาตุต่าง ๆ เช่น คาร์บอน พลังงานแสงอาทิตย์จัดเป็นหนึ่งในพลังงานทดแทน หรือ พลังงานหมุนเวียนที่มีศักยภาพสูง ปราศจากมลพิษ อีกทั้งเกิดใหม่ได้ไม่สิ้นสุด และยังเป็นต้นกำเนิดของพลังงานน้ำ (จากการทำให้น้ำกลายเป็นไอและลอยตัวขึ้นสูง พลังงานน้ำที่ตกกลับลงมาถูกนำไปผลิตกระแสไฟฟ้า) เป็นต้นกำเนิดของพลังงานเคมีในอาหาร (พืชสังเคราะห์แสง เปลี่ยนแร่ธาตุให้เป็นแป้งและน้ำตาล ซึ่งสามารถให้พลังงานแก่มนุษย์และสัตว์ชนิดต่าง ๆ) เป็นต้นกำเนิดของพลังงานลม (ทำให้เกิดความกดอากาศและทำให้เกิดการเคลื่อนที่ของอากาศ) และเป็นต้นกำเนิด พลังงานคลื่น (ทำให้น้ำขึ้น-ลง) [30]

## 2.2 เซลล์แสงอาทิตย์ (solar cell)

เซลล์แสงอาทิตย์ หรือ โซลาร์เซลล์ (solar cell) หรือ เซลล์สุริยะ หรือ เซลล์โฟโตโวลตาอิก (Photovoltaic cell) เป็นอุปกรณ์ไฟฟ้าซึ่งทำหน้าที่แปลงพลังงานแสงหรือโฟตอนเป็นพลังงานไฟฟ้า โดยตรงโดยปรากฏการณ์โฟโตโวลตาอิก นั่นก็คือ คุณสมบัติของสารเช่น ค่าความต้านทานแรงดัน และกระแส จะเปลี่ยนไปเมื่อมีแสงตกกระทบโดยไม่ต้องอาศัยแหล่งจ่ายไฟภายนอก และเมื่อต่อโหลดให้ จะทำให้เกิดกระแสไหลผ่านโหลดนั้นได้

คำว่า "Photovoltaic" มาจากภาษากรีก  $\varphi\omega\varsigma$  (Phos) หมายถึง "แสง" และคำว่า "โวลต์" ซึ่งเป็นหน่วยของแรงเหนี่ยวนำ, คำว่าโวลต์มาจากนามสกุลของนักฟิสิกส์ชาวอิตาลีเลียนเซโอ อเลสซานโดร Volta ซึ่งเป็นนักประดิษฐ์แบตเตอรี่ (เซลล์ไฟฟ้าเคมี) คำว่า "Photovoltaic" ถูกใช้ใน ภาษาอังกฤษตั้งแต่ปี 1849

Solar Cell มีที่มาจากคำว่า photovoltaic โดยแยกออกเป็น photo หมายถึง แสง และ volt หมายถึง แรงดันไฟฟ้า เมื่อรวมคำแล้วหมายถึง "กระบวนการผลิตไฟฟ้าจากการตกกระทบของแสงบนวัสดุที่มีความสามารถในการเปลี่ยนพลังงานแสงเป็นพลังงานไฟฟ้าได้โดยตรง"

## 2.2.1 การผลิตไฟฟ้าจากพลังงานแสงอาทิตย์

เซลล์แสงอาทิตย์ (Solar cell หรือ Photovoltaic cell (PV)) ถูกผลิตครั้งแรกในปีพ.ศ. 2426 โดย Charles Fritts โดยใช้ธาตุ ซีลีเนียม และในปี พ.ศ. 2484 เป็นการเริ่มต้นของการผลิตแผงเซลล์แสงอาทิตย์ด้วยธาตุ ซิลิคอน โมเลกุลเดี่ยว ด้วยต้นทุนการผลิตที่ค่อนข้างสูง การใช้งานของแผงเซลล์แสงอาทิตย์ในช่วงแรก เน้นไปที่การใช้งานในอวกาศ เช่น ใช้กับดาวเทียม

หลังจากประสบกับปัญหาน้ำมันแพง ใน พ.ศ. 2516 และ 2522 กลุ่มประเทศพัฒนาแล้วจึงหันมาให้ความสนใจในพลังงานแสงอาทิตย์และเริ่มมีการพัฒนาอย่างจริงจังมากขึ้น หลังจากการตีพิมพ์ข้อมูลโลกร้อนของ กลุ่มผู้เชี่ยวชาญด้านการเปลี่ยนแปลงภูมิอากาศ การติดตั้งแผงพลังงานแสงอาทิตย์มีปริมาณเพิ่มขึ้น 10-20 เปอร์เซ็นต์ ทุกปี ในประเทศไทยการติดตั้งเพิ่มขึ้นอีกมากเริ่มจากปี 2553 โดยเริ่มมีการติดตั้งเซลล์แสงอาทิตย์เพื่อผลิตไฟฟ้ามาตั้งแต่ปี 2526 จนถึงปี 2553 มียอดติดตั้งรวม 100.39 เมกะวัตต์ แลกจ่ายไฟฟ้า (เฉพาะเชื่อมกับสายส่งของการไฟฟ้าฝ่ายผลิตแล้ว) ทั้งปี 2553 รวม 21.6 กิกะวัตต์ ชั่วโมง (GWh) หรือ 0.0134 เปอร์เซ็นต์ ของปริมาณความต้องการใช้ไฟฟ้าทั้งหมด 161,350 กิกะวัตต์ ชั่วโมง โดยการไฟฟ้าฝ่ายผลิต ผลิตไฟฟ้าได้ 2.2 กิกะวัตต์ ชั่วโมง ผู้ผลิตรายย่อยผลิตไฟฟ้าได้ 19.4 กิกะวัตต์ ชั่วโมง

ตามพระราชบัญญัติการพัฒนาพลังงานหมุนเวียน 15 ปี นับจากปี 2552 กำหนดเป้าหมายการใช้พลังงานหมุนเวียนไว้ที่ 20.3 เปอร์เซ็นต์ ของพลังงานทั้งหมด โดยมีสัดส่วนของพลังงานจากเซลล์แสงอาทิตย์อยู่ที่ 6 เปอร์เซ็นต์ ดังนั้น ตามแผนงาน ในปี 2565 ประเทศไทยต้องมีโรงไฟฟ้าพลังงานแสงอาทิตย์ด้วยเซลล์แสงอาทิตย์มีกำลังการผลิตรวม 500 เมกะวัตต์ ตัวเลขในปี 2554 อยู่ระหว่างดำเนินการติดตั้ง 265 เมกะวัตต์ และอยู่ระหว่างการพิจารณาจากการไฟฟ้าฝ่ายผลิต อีก 336 เมกะวัตต์ โรงไฟฟ้าที่สร้างที่จังหวัดลพบุรีด้วยเทคโนโลยีฟิล์มบางอะมอร์ฟัส (amorphous thin film) ต้องใช้แผงเซลล์แสงอาทิตย์ถึง 540,000 ชุด มีกำลังการผลิต 73 เมกะวัตต์ จะเป็นโรงไฟฟ้าพลังงานแสงอาทิตย์ระบบโฟโตโวลตาอิกที่ใหญ่ที่สุดในโลก [28]

## 2.2.2 ชนิดของเซลล์แสงอาทิตย์

เซลล์แสงอาทิตย์สามารถแบ่งตามสารประกอบหลักที่ใช้ประดิษฐ์เป็น 2 กลุ่มใหญ่ๆ ดังนี้

### 2.2.2.1 เซลล์แสงอาทิตย์ที่ทำจากสารอินทรีย์

เซลล์แสงอาทิตย์ในกลุ่มนี้จะใช้วัสดุสารกึ่งตัวนำที่เป็นสารอินทรีย์ในการประดิษฐ์ เช่น

GaAs, GaP, InTe, InP, CdS, CdTe, CuInSe<sub>2</sub>, Si เป็นต้น ซึ่งในสารกึ่งตัวนำข้างต้นที่กล่าวมา เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่าจะกรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ตัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

นี้สารกึ่งตัวนำซิลิกอน จะได้รับความนิยมมากที่สุด อันเนื่องมาจากเป็นธาตุที่มีอยู่มากในโลกทำให้มีราคาถูกกว่าสารกึ่งตัวนำอินทรีย์ชนิดอื่นๆ ถึงแม้ว่าจะมีประสิทธิภาพต่ำกว่า(เซลล์แสงอาทิตย์ที่ทำจาก GaAs จะให้ประสิทธิภาพสูงมากกว่า 25 เปอร์เซ็นต์ ขึ้นไป) โดยเซลล์แสงอาทิตย์ที่ทำจากสารกึ่งตัวนำซิลิกอน สามารถแบ่งตามลักษณะผลึกที่เกิดขึ้นได้เป็นหลายแบบ เช่น เซลล์แสงอาทิตย์ซิลิกอนแบบผลึกเดี่ยว (Single Crystalline Silicon Solar Cell) หรือที่รู้จักกันในชื่อ Monocrystalline Silicon Solar Cell และแบบผลึกรวม (Polycrystalline Silicon Solar Cell) ทั้งสองแบบจะมีลักษณะเป็นผลึก สีน้ำเงินเข้ม ค่อนข้างแข็งและบางมาก ความแตกต่างระหว่างแบบผลึกเดี่ยวและแบบผลึกรวมสังเกตได้จากแบบผลึกรวมจะเห็นหน้าผลึกหลาย ๆ หน้าในแผ่นเซลล์ ในขณะที่แบบผลึกเดี่ยวจะเห็นเป็นสีเดียว คือสีน้ำเงินเข้ม เซลล์แสงอาทิตย์ซิลิกอนแบบผลึกรวมนี้จะให้ประสิทธิภาพต่ำกว่าแบบผลึกเดี่ยว อย่างไรก็ตามเซลล์ทั้งสองชนิดมีข้อเสีย คือแตกหักง่าย นอกจากนี้ยังมีเซลล์แสงอาทิตย์อีกชนิดหนึ่งที่ใช้การเคลือบสารซิลิกอนที่เป็นฟิล์มบาง (Thin film) เพียง 0.5 ไมครอน บนแผ่นแก้วหรือแผ่นโลหะ สารซิลิกอนที่ใช้เป็นแบบไม่มีรูปผลึกหรืออะมอร์ฟัส (Amorphous) ซึ่งมีประสิทธิภาพในการเปลี่ยนรูปพลังงานต่ำกว่า 2 แบบแรก ลักษณะสีม่วงน้ำตาล มีข้อดีที่น้ำหนักเบา สามารถติดตั้งได้โดยไม่แตกหัก ราคาถูกกว่า นิยมใช้ในเครื่องคิดเลข อุปกรณ์ขนาดเล็กต่างๆ โดยเซลล์แสงอาทิตย์ชนิดซิลิกอนแบบต่างๆแสดงดังรูปที่ 2.2



รูปที่ 2.2 เซลล์แสงอาทิตย์ชนิดซิลิกอนแบบต่างๆ<sup>[28]</sup>

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่าจะกรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ตัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

### 2.2.2.2 เซลล์แสงอาทิตย์ที่ทำจากสารอินทรีย์

เซลล์แสงอาทิตย์ในกลุ่มนี้จะใช้วัสดุสารอินทรีย์เป็นองค์ประกอบหลักในการทำเซลล์แสงอาทิตย์ เช่น phthalocyanine, pentacene, poly (phenylene vinylene) (PPV) และ poly(3-hexylthiophene) (P3HT) เป็นต้น มีข้อดีกว่าเซลล์แสงอาทิตย์ที่ใช้สารอนินทรีย์ คือสามารถใช้งานได้ในพื้นที่ที่มีแสงน้อย มีความยืดหยุ่นสูงสามารถโค้งงอได้ทนต่อการแตกหักสามารถใช้เทคโนโลยีการพิมพ์แบบอิงค์เจ็ท ซึ่งทำให้ประดิษฐ์ได้ที่ละมากๆ และที่สำคัญสามารถนำกลับมาใช้ใหม่ได้ง่ายกว่า แต่อย่างไรก็ตามเซลล์แสงอาทิตย์ในกลุ่มนี้ยังมีประสิทธิภาพไม่สูงนัก ประมาณ 3-7 เปอร์เซ็นต์ และไม่เสถียรเมื่อใช้งานในสภาพแวดล้อมที่สุดโต่ง เช่น สภาพแสงความเข้มสูงและความชื้นสูง เป็นต้น โครงสร้างเบื้องต้นของเซลล์แสงอาทิตย์ชนิดสารอินทรีย์มีชั้นสารอินทรีย์แบบชั้นเดียว สองชั้น และบัลค์เฮเทอโรจังก์ชัน (Bulk heterojunctions) ที่เป็นพอลิเมอร์สมระหว่างพอลิเมอร์ 2 ชนิดทำหน้าที่เป็นชั้นของตัวให้และรับอิเล็กตรอน (donor-acceptor bilayer) จากนั้นประกบกับขั้วไฟฟ้าสองด้าน โดยด้านหนึ่งเป็นขั้วไฟฟ้าโปร่งแสง เช่น ITO และอีกด้านเป็นโลหะเช่น Al, Ca และ Mg เป็นต้น ตัวอย่างเซลล์แสงอาทิตย์ที่ทำจากสารอินทรีย์แสดงดังรูปที่ 2.3

รูปที่ 2.3 เซลล์แสงอาทิตย์ชนิดสารอินทรีย์<sup>[3]</sup>

### 2.3 เซลล์แสงอาทิตย์ชนิดสีย้อมไวแสง (Dye-Sensitized Solar Cell, DSSC)

เซลล์แสงอาทิตย์ในกลุ่มของชนิดรอยต่อพี-เอ็นได้พัฒนาจนมีประสิทธิภาพการให้กระแสไฟฟ้าสูง แต่มีข้อเสียคือมีราคาแพง มีต้นทุนการผลิตที่สูง นอกจากนี้ในกระบวนการผลิตยังมีก๊าซมลพิษ จึงได้มีแนวคิดใหม่ที่จะไม่อาศัยรอยต่อพีเอ็นของสารกึ่งตัวนำ โดยสร้างรอยต่อสารกึ่งตัวนำกับของเหลว เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่าจะกรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

แทน เช่น เซลล์แสงอาทิตย์ชนิดรอยต่อระหว่างสารกึ่งตัวนำแคดเมียมเทลลูไรด์กับสารละลายอิเล็กโทรไลต์ของ  $[\text{Fe}(\text{CH}_3)_6]^{3+/4-}$  เซลล์แสงอาทิตย์ชนิดนี้เมื่อมีแสงตกกระทบ จะมีชั้นฟิล์มบางของสารกึ่งตัวนำบนขั้วไฟฟ้าเป็นตัวดูดกลืนแสงทำให้อิเล็กตรอนในแถบวาเลนซ์ถูกกระตุ้นขึ้นไปทีแถบการนำทำให้เกิดโฮลในแถบวาเลนซ์ อิเล็กตรอนในแถบการนำจะเคลื่อนที่ออกสู่วงจรภายนอก ซึ่งโฮลของแถบวาเลนซ์ ได้รับความเร่งจากสารละลายอิเล็กโทรไลต์และอิเล็กโทรไลต์จะรับอิเล็กตรอนคืนจากขั้วแคโทด กระบวนการนี้จะทำให้เกิดกระแสไฟฟ้าไหลครบวงจร ในการเลือกใช้สารกึ่งตัวนำของเซลล์แสงอาทิตย์ชนิดนี้ จะต้องมีช่องว่างแถบพลังงาน (Eg) ในช่วง 1-2 อิเล็กตรอนโวลต์ และมีความคงตัวต่อแสง อุณหภูมิ ความชื้น รวมทั้งการเปลี่ยนแปลงค่าพีเอชของสารละลายเพื่อไม่ให้โฮลที่เกิดขึ้นถูกทำลายได้ง่าย โดยส่วนมากจะเป็นสารกึ่งตัวนำในกลุ่ม CdSe หรือ InP แต่สารในกลุ่มนี้เกิดปฏิกิริยากับน้ำหรือออกซิเจนได้ง่าย กลายเป็นชั้นฟิล์มบางที่เป็นฉนวนและมีโฮลที่ไม่เสถียร จึงได้มีการพัฒนาต่อไปเป็นเซลล์แสงอาทิตย์ชนิดรอยต่อสารกึ่งตัวนำและของเหลวที่ใช้สารกึ่งตัวนำเป็นโลหะออกไซด์ที่มีแถบพลังงานกว้างมากกว่า 3 อิเล็กตรอนโวลต์ แทนสารกึ่งตัวนำที่มีแถบพลังงานแคบ โดยเคลือบผิวของสารกึ่งตัวนำโลหะออกไซด์ด้วยโมเลกุลสีย้อมไวแสง ซึ่งทำหน้าที่ดูดกลืนพลังงานจากแสงอาทิตย์แล้วให้อิเล็กตรอนส่งผ่านไปยังสารกึ่งตัวนำ ซึ่งจะเรียกเซลล์แสงอาทิตย์ชนิดนี้ว่า เซลล์แสงอาทิตย์ชนิดสีย้อมไวแสง

### 2.3.1 ส่วนประกอบของเซลล์แสงอาทิตย์ชนิดสีย้อมไวแสง

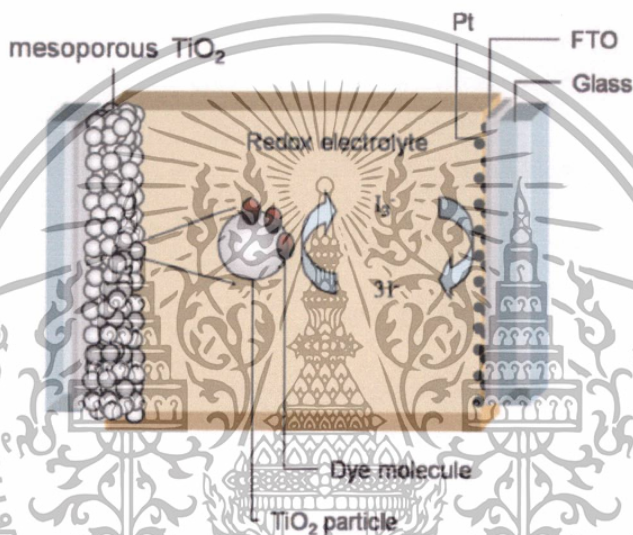
เซลล์แสงอาทิตย์ชนิดสีย้อมไวแสงมีส่วนประกอบที่สำคัญ คือ ขั้วไฟฟ้าเวดคิง ขั้วแคโทด สีย้อมไวแสง และอิเล็กโทรไลต์ ซึ่งในแต่ละส่วนทำหน้าที่ต่างๆ ดังนี้

1) กระจกนำไฟฟ้า (Transparent conductive oxide glass : TCO glass) ทำจากกระจกใสที่เคลือบด้วย Fluorine-doped tin oxide (FTO) หรืออาจใช้สารในกลุ่มออกไซด์ที่นำไฟฟ้าได้ (Transparent conducting oxide, TCO) 1 ด้าน เพื่อส่งผ่านอิเล็กตรอน

2) ชั้นอนุภาคสารกึ่งตัวนำ (Semiconductor layer) เป็นสารกึ่งตัวนำโลหะออกไซด์ (Metal-oxide semiconductor) ที่มีช่องว่างแถบพลังงานสูง (Wide band gap) และสามารถสร้างพันธะยึดเหนี่ยวกับโมเลกุลของสีย้อมไวแสงได้ โดยชั้นสารกึ่งตัวนำที่ใช้ในที่นี้คือ ไททาเนียมไดออกไซด์ เนื่องจากไททาเนียมไดออกไซด์ แบบอนาเทส มีรูพรุนในรูปผลึกระดับนาโน เป็นวัสดุที่มีความเสถียรราคาถูก ไม่เป็นพิษต่อสิ่งแวดล้อม ชั้นนี้ยังมีพื้นที่ผิวมาก จะยิ่งดีเพราะความพรุน จะช่วยให้สีย้อมไวแสงยึดเกาะได้มาก

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่าจะกรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ตัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

3) โมเลกุลสีย้อมไวแสง (Dye) สีย้อมไวแสงที่เหมาะสมในการใช้งานควรมีคุณสมบัติเบื้องต้นคือ เป็นโมเลกุลที่ดูดกลืนแสงได้มากเป็นช่วงกว้าง ในช่วงความยาวคลื่นที่มีแสงตกลงมามาก (เช่น ถ้ามีพันธะคู่สลับเดี่ยวหรือเป็นวงอะโรมาติก ก็จะได้เพราะสามารถดูดกลืนคลื่นแม่เหล็กไฟฟ้าแล้วส่งอิเล็กตรอนผ่านพันธะไพ และยังมีคุณสมบัติเมื่อเกิดประจุบวกในกระบวนการ) มีคุณสมบัติในการถ่ายโอนอิเล็กตรอน ควรจะยึดเกาะบนไททาเนียมไดออกไซด์ได้ดี (การมีหมู่ฟังก์ชันที่เป็นหมู่กรดอินทรีย์ เช่น ไฮยาโนอะคริลิก เป็นต้น) มีความคงทนคือไม่สลายตัวเมื่อใช้ไปเป็นเวลานานๆ สามารถดูดซับพลังงานแสงและปลดปล่อยอิเล็กตรอนที่สถานะกระตุ้นโดยจะยึดเกาะกับอนุภาคของไททาเนียมไดออกไซด์ด้วยพันธะ  $-OH$  หรือ  $=O$



รูปที่ 2.4 ส่วนประกอบของเซลล์แสงอาทิตย์ชนิดสีย้อมไวแสง<sup>[2]</sup>

4) สารละลายอิเล็กโทรไลต์ ทำหน้าที่ในการส่งผ่านอิเล็กตรอนที่ทำงานในวงจรภายนอก กลับคืนสู่โมเลกุลสีย้อมที่เสียอิเล็กตรอนไปในตอนแรกจากการถูกกระตุ้นด้วยแสง โดยอาศัยกระบวนการเกิดปฏิกิริยารีดอกซ์ (Redox reaction) ซึ่งคุณสมบัติของสารละลายอิเล็กโทรไลต์ที่ดีจะต้องไม่มีการดูดกลืนแสงอาทิตย์ในช่วงที่ตามองเห็น มีความสามารถในการเกิดปฏิกิริยารีดอกซ์ออกซิเดชันได้ง่ายเพื่อชดเชยอิเล็กตรอนให้แก่เม็ดสีย้อมที่อยู่ในรูปตัวออกซิไดซ์ได้อย่างรวดเร็วและต้องมีความคงตัวสูง ไม่ก่อให้เกิดสารประกอบตัวใหม่ที่ไม่ต้องการขึ้นภายในเซลล์

5) เคาน์เตอร์อิเล็กโทรด (Counter-electrode) ทำหน้าที่ถ่ายโอนอิเล็กตรอนที่มาจากภายนอกให้กลับเข้าสู่สารละลายอิเล็กโทรไลต์ (Electrolyte solution) โดยที่เคาน์เตอร์อิเล็กโทรดต้องมีสมบัติดังนี้คือ มีค่าการนำไฟฟ้าที่ดี มีความเป็นรูพรุนสูงเพื่อเพิ่มพื้นที่ผิวในการเกิดปฏิกิริยา และจะต้องเป็นตัวเร่งปฏิกิริยาที่ดีด้วย วัสดุที่นิยมใช้เป็นเคาน์เตอร์อิเล็กโทรดคือ สารละลายแพลทินัม เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่าจะกรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ตัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

### 2.3.2 พิล์มบางออกไซด์นำไฟฟ้าโปร่งแสง (Transparent conducting oxide thin film, TCO)

ฟิล์มบางออกไซด์นำไฟฟ้าโปร่งแสง เป็นฟิล์มบางที่นำไปใช้กันมากในอุปกรณ์ Optoelectronic device ซึ่งฟิล์มชนิดนี้เป็นฟิล์มที่มีสมบัติทางไฟฟ้าและสมบัติทางแสงที่ดีควบคู่กัน โดยฟิล์มต้องมีคุณสมบัตินำไฟฟ้าได้ดีและแสงสามารถทะลุผ่านได้มาก ดังนั้นการเลือกสารตั้งต้นเพื่อนำมาเตรียมฟิล์มต้องพิจารณาคุณสมบัติทั้งสองข้อนี้เป็นสำคัญและโดยทั่วไป สารที่จะนำมาใช้ควรเป็นสารที่มีแถบช่องว่างพลังงานสูง สภาพต้านทานต่ำและมีความสามารถในการทะลุผ่านของแสงได้สูง ซึ่งฟิล์มบางที่นิยมใช้กันได้แก่ ฟิล์มบางทินออกไซด์ ( $\text{SnO}_2$ ) ฟิล์มบางอินเดียมออกไซด์ ( $\text{In}_2\text{O}_3$ ) อินเดียมทินออกไซด์ (ITO) ฟิล์มบางแคดเมียมสแตนเนส ( $\text{Cd}_2\text{SnO}_4$ ) ฟิล์มบางซิงค์ออกไซด์ ( $\text{ZnO}_2$ ) เป็นต้น ซึ่งสารเหล่านี้สามารถปรับปรุงคุณสมบัติทั้งทางไฟฟ้าและสมบัติทางแสงได้ด้วยการเติมสารเจือ

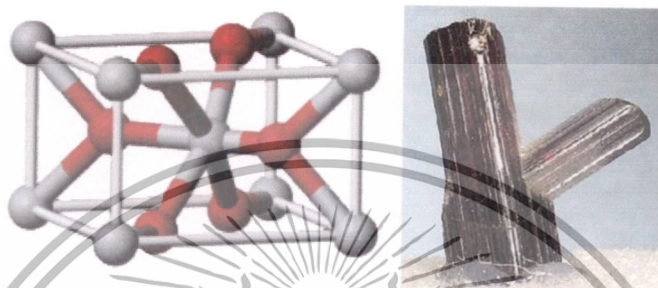
### 2.3.3 ไททาเนียมไดออกไซด์

ไททาเนียมไดออกไซด์ เป็นสารประกอบกึ่งโลหะเก่าแก่ชนิดหนึ่งเท่าๆ กับโลกของเรา และเป็น 1 ใน 50 ชนิดของสารที่ผลิตมากที่สุดในโลก มีสีขาว ทึบแสง เกิดเองตามธรรมชาติ เกิดจากการทำปฏิกิริยาระหว่างโลหะไททาเนียมซึ่งเป็นโลหะทรานซิชันกับออกซิเจน มีสมบัติทางกายภาพเป็นของแข็งสีขาว มีจุดหลอมเหลว 1,660.0 องศาเซลเซียส และ มีความหนาแน่นประมาณ 4.54 กรัมต่อ ลูกบาศก์เซนติเมตร (ที่อุณหภูมิ 20 องศาเซลเซียส) ลักษณะโครงสร้างผลึกของไททาเนียมไดออกไซด์มี 3 รูปแบบ คืออนาเทส (anatase) รูไทล์ (rutile) และบรูคไคต์ (brookite) เนื่องจากการจัดเรียงตัวของออกตรเซอีตราลแตกต่างกันจึงส่งผลให้แต่ละเฟสมีคุณสมบัติบางประการต่างกัน และมีความเหมาะสมในการนำไปใช้งานที่แตกต่างกัน ซึ่งไททาเนียมไดออกไซด์ทั้ง 3 รูปแบบนั้น ต้องผ่านกระบวนการทางเคมีนำสารปนเปื้อนออกจึงจะได้ไททาเนียมไดออกไซด์บริสุทธิ์ซึ่งมีประโยชน์สำหรับการใช้งานต่อไป โครงสร้างผลึกของไททาเนียมไดออกไซด์รูปแบบต่างๆ แสดงดังรูปที่ 2.5

เนื่องจากไททาเนียมมีตำแหน่งที่ว่างของออกซิเจนในโครงผลึก จึงจัดได้ว่าเป็นสารกึ่งตัวนำชนิดเอ็น ตัวเร่งปฏิกิริยาแบบใช้แสงที่เป็นสารกึ่งตัวนำนั้นจะมีความสามารถในการดูดซับสารตั้งต้นในการเกิดปฏิกิริยา 2 ชนิดไปพร้อมๆ กัน ทั้งปฏิกิริยาออกซิเดชันและรีดักชัน โดยการกระตุ้นด้วยโฟตอนที่มีพลังงานเท่ากับหรือมากกว่าค่าพลังงานแถบต้องห้ามของสารกึ่งตัวนำ สารกึ่งตัวนำจะมีความแตกต่างจากโลหะที่ระดับพลังงานไม่ต่อเนื่องทำให้เกิดเป็นช่องว่างของแถบพลังงาน ซึ่งส่งผลให้เกิดการเอกสารนี้เป็นเอกสารที่สวอนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่าจะกรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

แยกกันของอิเล็กตรอนและโฮลหลังจากที่ถูกกระตุ้นด้วยแสง ความแตกต่างของโครงสร้างผลึกของไททานเนียมไดออกไซด์ชนิดอนาเทสและรูไทล์จะมีความหนาแน่นและโครงสร้างทางอิเล็กทรอนิกส์ต่างกัน ซึ่งส่งผลให้มีช่องว่างของแถบพลังงานที่แตกต่างกัน คือ โครงสร้างผลึกอนาเทสมีช่องว่างของแถบพลังงาน 3.20 อิเล็กตรอนโวลต์ และ โครงสร้างผลึกรูไทล์มีช่องว่างของแถบพลังงาน 3.02 อิเล็กตรอนโวลต์

(ก)



(ข)



(ค)



รูปที่ 2.5 โครงสร้างของไททานเนียมไดออกไซด์; (ก) รูไทล์ (ข) อนาเทส (ค) บรูคไคท์

ดังนั้นโครงสร้างทั้งสองชนิดจึงมีช่วงการดูดกลืนแสงที่แตกต่างกัน และส่งผลต่อประสิทธิภาพในการเกิดปฏิกิริยาจากการกระตุ้นด้วยแสงคุณสมบัติบางประการของไททานเนียมไดออกไซด์บางประการแสดงดังตารางที่ 2.1

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่าจะกรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

## ตารางที่ 2.1 คุณสมบัติทางกายภาพบางประการของสารไททาเนียมไดออกไซด์

ความหนาแน่น	4.23 g/cm <sup>3</sup>
จุดหลอมเหลวและจุดเดือด	1843 °C, 2972 °C
ช่องว่างแถบพลังงาน	3.2 eV
น้ำหนักโมเลกุล	79.866 g/mol
ค่าความต้านทาน (Resistivity, 25 °C)	10 <sup>12</sup> ohm.cm
Modulus of Elasticity	230 GPa

### 2.3.4 สีย้อมไวแสง (Photosensitizer)

สีย้อมไวแสงในเซลล์แสงอาทิตย์ชนิดสีย้อมไวแสง ทำหน้าที่ดูดกลืนพลังงานแสงอาทิตย์และส่งผ่านอิเล็กตรอนให้กับอนุภาคโลหะออกไซด์ ดังนั้นจะต้องมีคุณสมบัติที่สำคัญ เช่น มีสเปกตรัมการดูดกลืนแสงกว้างในช่วงที่ตามองเห็นและใกล้อินฟราเรดเพื่อดูดกลืนแสงอาทิตย์ให้ได้มากที่สุด มีค่าสัมประสิทธิ์การดูดกลืนแสงสูงเพื่อเพิ่มประสิทธิภาพการจับแสง โฟตอนที่ตกกระทบ มีคุณสมบัติของสภาวะพื้นและสภาวะกระตุ้นที่เหมาะสม มีเสถียรภาพสูงในสภาวะถูกออกซิไดซ์ และสามารถยึดเกาะบนผิวอนุภาคโลหะออกไซด์ได้ดี เซลล์แสงอาทิตย์ชนิดสีย้อมไวแสงจะใช้สีย้อมไวแสงทำหน้าที่เป็นตัวรับแสงจากภายนอก สีย้อมจัดเป็นส่วนประกอบที่สำคัญที่สุดของเซลล์แสงอาทิตย์ประเภทนี้ เนื่องจากสีย้อมมีหน้าที่เป็นแหล่งกำเนิดอิเล็กตรอนสำหรับเซลล์แสงอาทิตย์ชนิดนี้ เมื่อสีย้อมไวแสงได้รับพลังงานแสงโมเลกุลของสีย้อมที่อยู่ในสถานะพื้น (HOMO) จะถูกกระตุ้นให้ไปอยู่ในสถานะกระตุ้น (LUMO) อิเล็กตรอนจากสีย้อมจะเคลื่อนที่ไปยังแถบการนำไฟฟ้าของสารกึ่งตัวนำ จึงเกิดการเคลื่อนที่ของอิเล็กตรอนได้ [15,16,21]

สีย้อมไวแสง สามารถจำแนกได้เป็น 2 ประเภทใหญ่ๆ ได้ดังนี้

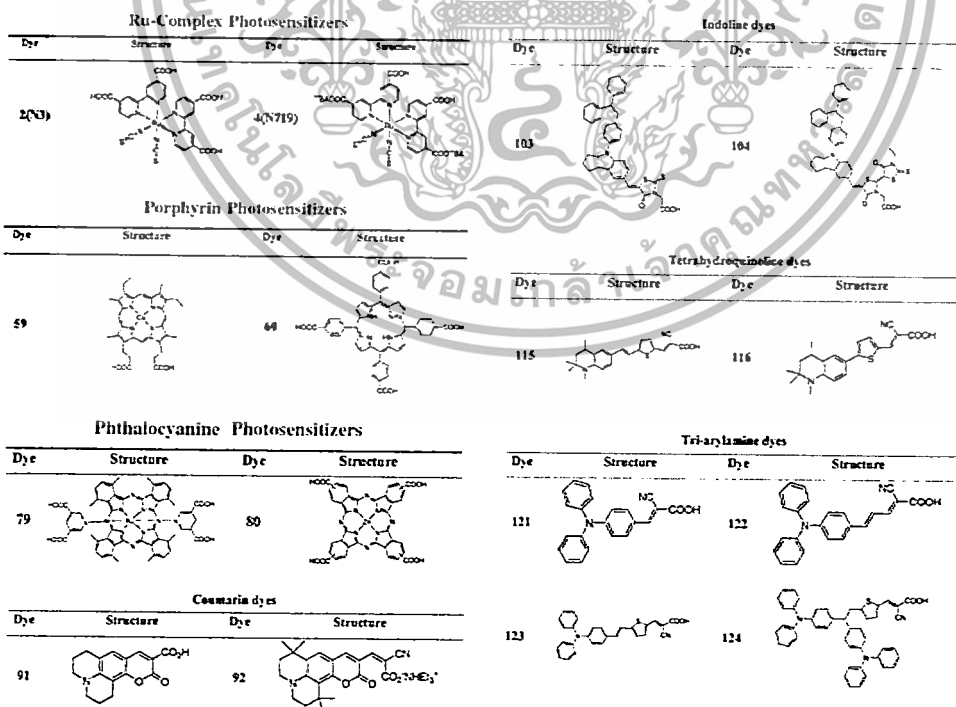
#### 1. สีย้อมไวแสงจากพืชธรรมชาติ

สีย้อมประเภทนี้สามารถสกัดได้จากธรรมชาติ เช่น ผลไม้ ดอกไม้ หรือใบไม้ เป็นต้น สีย้อมประเภทนี้มีข้อดีคือ หาง่าย ราคาถูก ไม่ทำลายสิ่งแวดล้อม ตัวอย่างสีย้อมไวแสงที่ได้จากธรรมชาติ ได้แก่ เปลือกไม้ เปลือกมังคุด ดอกอัญชัน เฟื่องฟ้า เมล็ดคำแสด เป็นต้น

2. สีย้อมไวแสงจากการสังเคราะห์

สีย้อมที่ได้จากการสังเคราะห์เป็นสีย้อมที่ได้จากการนำคุณสมบัติของธาตุแต่ละชนิดมารวมกันเพื่อสร้างพันธะในการยึดเกาะกันได้ดี ในปัจจุบันมีการสังเคราะห์สีย้อมหลายกลุ่ม เช่น Metal Complexs, Porphyrins and Phthalocyanines, และสีย้อมอินทรีย์ (Organic Dye) ซึ่งสีย้อมอินทรีย์แบ่งออกได้เป็นกลุ่มๆ เช่น Coumarin dyes, Indoline dyes, Tri-arylamine dyes, Heteroanthracene dyes, Squaraines and Perylene dyes. ตัวอย่างสีย้อมไวแสงที่ได้จากการสังเคราะห์ประเภทต่างๆ แสดงดังรูปที่ 2.6

สีย้อมไวแสงที่ใช้ในงานวิจัยนี้ เป็นกลุ่มของ Tri-arylamine dyes ซึ่งสีย้อมประเภทนี้เป็นสีย้อมอินทรีย์ที่มีความสามารถในการดูดกลืนพลังงานในช่วงกว้าง เนื่องจากความสามารถที่โดดเด่นในการให้อิเล็กตรอน และคุณสมบัติการเคลื่อนที่ของโซลของหมู่ Triarylamine unit. ปัจจุบัน สีย้อมไวแสงในกลุ่มนี้ได้ถูกพัฒนาขึ้นอย่างมาก และสีย้อมส่วนใหญ่ที่อยู่ในกลุ่มนี้จะมีประสิทธิภาพที่ค่อนข้างดี โดยสีย้อมไวแสงในกลุ่มนี้ Yanagida และผู้ร่วมวิจัยได้คิดค้นเป็นครั้งแรกและรายงานผล ประสิทธิภาพอยู่ที่ 3.3 เปอร์เซ็นต์ สำหรับสีย้อม TC1 [2]



รูปที่ 2.6 สีย้อมไวแสงจากการสังเคราะห์<sup>[2]</sup>

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่าจะกรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

### 2.3.5 สารละลายอิเล็กโทรไลต์ (electrolyte solution)

สารละลายอิเล็กโทรไลต์ทำหน้าที่ในการส่งผ่านอิเล็กตรอน (electron transfer) จากขั้วไฟฟ้าแคโทดที่เป็นฟิล์มบางของโลหะแพลตินัมไปยังโมเลกุลของสีย้อมไวแสงที่เสียอิเล็กตรอนไปในตอนแรกจากการถูกกระตุ้นด้วยแสง ในสารละลายอิเล็กโทรไลต์จะอาศัยกระบวนการเกิดปฏิกิริยารีดักชัน (Reduction) และปฏิกิริยาออกซิเดชัน (Oxidation) หรือที่เรียกว่า ปฏิกิริยารีดอกซ์ (Redox reaction) ซึ่งคุณสมบัติของสารละลายอิเล็กโทรไลต์ที่ดี จะต้องไม่มีการดูดกลืนแสงอาทิตย์ในช่วงที่ตามองเห็นมีความสามารถในการเกิดปฏิกิริยารีดักชัน-ออกซิเดชันได้ง่ายเพื่อชดเชยอิเล็กตรอนให้แก่เม็ดสีย้อมที่อยู่ในรูปตัวออกซิไดซ์ได้อย่างรวดเร็วและต้องมีความคงตัวสูง ไม่ก่อให้เกิดสารประกอบตัวใหม่ที่ไม่ต้องการขึ้นภายในเซลล์ สารละลายอิเล็กโทรไลต์ที่นิยมใช้ในการประดิษฐ์เซลล์แสงอาทิตย์ชนิดนี้คือสารละลายอิเล็กโทรไลต์ในระบบ ที่ได้จากการแตกตัวของสารไอโอดีน ( $I_2$ ) โดยจะมีประสิทธิภาพในการให้อิเล็กตรอนกับเม็ดสีย้อมที่อยู่ในรูปของตัวออกซิไดซ์ที่สถานะพื้นได้เป็นอย่างดี สารละลายอิเล็กโทรไลต์แบบของเหลวจะให้ค่าประสิทธิภาพที่ดี แต่มีข้อเสียคือ ตัวทำละลายที่ใช้ระเหยง่าย จึงทำให้เกิดปัญหาการรั่วซึมของสารละลายออกจากตัวเซลล์แสงอาทิตย์ ส่งผลให้อายุการใช้งานของเซลล์แสงอาทิตย์ลดลง ไม่มีความคงทน ซึ่งถือเป็นปัญหาใหญ่ของระบบอิเล็กโทรไลต์แบบของเหลว จึงได้มีการคิดค้นระบบอิเล็กโทรไลต์แบบของเหลวไอออนิกที่มีจุดเดือดสูงขึ้นไป มีการนำไฟฟ้าที่ดี ซึ่งที่นิยมใช้จะเป็นสารประกอบของอิมิดาโซเลียม (Imidazolium) แม้ว่าระบบนี้จะช่วยแก้ปัญหาของการระเหยได้ แต่ก็ยังคงมีการรั่วซึมอยู่ และให้ค่ากระแสไฟฟ้าลัดวงจรต่ำกว่าระบบอิเล็กโทรไลต์ของเหลว เพราะมีความหนืดสูงกว่า ทำให้ไอออนแพร่ได้ช้ากว่า นอกจากนี้ยังมีอีกระบบหนึ่งที่ได้รับการพัฒนาขึ้นมา คือ ระบบพอลิเมอร์อิเล็กโทรไลต์ โดยมีข้อดีในการพาไอออนสูง และสามารถแข็งตัวได้ช่วยป้องกันปัญหาการระเหยและรั่วซึมของสารละลาย แต่อย่างไรก็ตามระบบอิเล็กโทรไลต์ยังคงต้องได้รับการพัฒนาต่อไปอย่างต่อเนื่อง เพื่อเพิ่มประสิทธิภาพของเซลล์แสงอาทิตย์ชนิดสีย้อมไวแสงให้สูงขึ้น

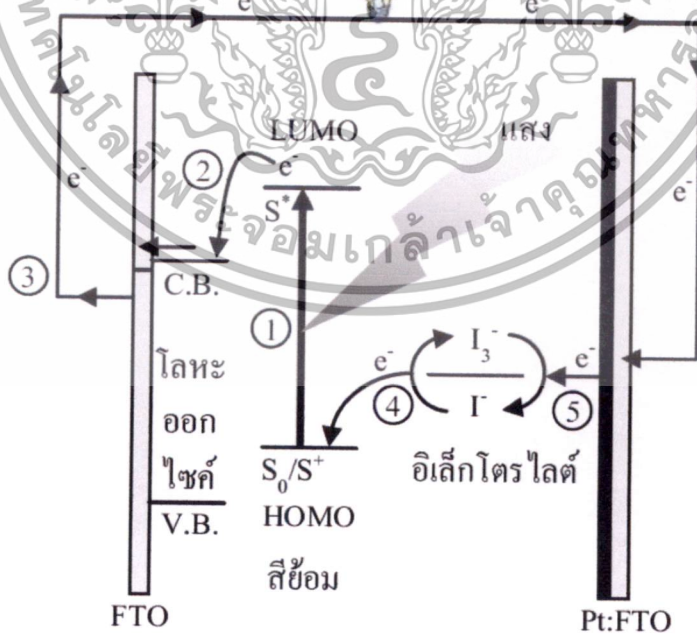
### 2.3.6 ขั้วไฟฟ้าแคโทด (Counter Electrode)

ขั้วไฟฟ้าแคโทดทำหน้าที่ถ่ายโอนอิเล็กตรอนที่มาจากภายนอกให้กลับเข้าสู่สารละลายอิเล็กโทรไลต์โดยที่ขั้วไฟฟ้าแคโทดต้องมีสมบัติการนำไฟฟ้าที่ดี มีความเป็นรูพรุนสูงเพื่อเพิ่มพื้นที่ผิวในการเกิดปฏิกิริยาและจะต้องเป็นตัวเร่งปฏิกิริยาที่ดีด้วย วัสดุที่นิยมใช้ทำเป็นขั้วไฟฟ้าแคโทดคือ

โลหะแพลตินัม (Pt) แต่เนื่องจากโลหะแพลตินัมมีราคาแพงอาจใช้วัสดุอื่นแทนได้ เช่น ผงคาร์บอน ท่อคาร์บอนนาโน หรือโพลิเมอร์นำไฟฟ้า

2.4 หลักการแปลงพลังงานแสงเป็นพลังงานไฟฟ้าของเซลล์แสงอาทิตย์ชนิดสีย้อมไวแสง

เมื่อแสงอาทิตย์หรือพลังงานโฟตอน ทะลุผ่านกระจกนำไฟฟ้ามารวมกระทบกับโมเลกุลของสีย้อมไวแสงที่เกาะอยู่บนผิวของไททาเนียมไดออกไซด์ โฟตอนที่ม่ีพลังงานมากพอจะกระตุ้นให้อิเล็กตรอนของสีย้อมจากสถานะพื้น [Highest occupied molecular orbital (HOMO)] ไปสถานะกระตุ้น [Lowest unoccupied molecular orbital (LUMO)] จากนั้นอิเล็กตรอนในสถานะกระตุ้นจะเคลื่อนที่ไปยังแถบนำของไททาเนียมไดออกไซด์ แล้วเคลื่อนที่ผ่านกระจกนำไฟฟ้าออกสู่วงจรภายนอก แล้วเคลื่อนที่ไปยังอีกขั้วหนึ่งของเซลล์ ในขณะที่สีย้อมไวแสงสูญเสียอิเล็กตรอนไปนั้น จะดึงอิเล็กตรอนจากสารละลายอิเล็กโทรไลต์ โดยปฏิกิริยานี้จะเกิดขึ้นอย่างรวดเร็วเมื่อเทียบกับการฉีดอิเล็กตรอนจากสีย้อมไวแสงไปยังแถบนำของสารไททาเนียมไดออกไซด์ เพื่อป้องกันการไหลกลับของอิเล็กตรอน หลังจากนั้นอิเล็กโทรไลต์ที่สูญเสียอิเล็กตรอน จะแพร่ผ่านมายังอีกขั้วหนึ่ง (counter electrode) เพื่อรับอิเล็กตรอนแล้วกลับมาอยู่ในสถานะพื้น เพื่อให้อิเล็กตรอนต่อไป ดังรูปที่ 2.7



รูปที่ 2.7 การแปลงพลังงานของเซลล์แสงอาทิตย์ชนิดสีย้อมไวแสง<sup>[32]</sup>

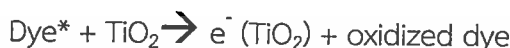
เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่าจะกรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหาของเอกสารหรืออ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

หลักการแปลงพลังงานของเซลล์แสงอาทิตย์ชนิดสีย้อม เป็นขั้นตอนดังนี้

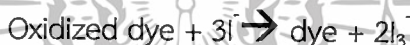
- 1) เมื่อโมเลกุลสีย้อมไวแสงได้รับพลังงานจากแสงอาทิตย์ จะถูกพลังงานแสงกระตุ้นให้ไปอยู่ในสถานะกระตุ้น (Excited state)



- 2) อิเล็กตรอนสถานะกระตุ้นของสีย้อม มีพลังงานที่สูงกว่าระดับพลังงานต่ำสุดของแถบนำไฟฟ้าของสารกึ่งตัวนำ (conduction band) จะย้ายไปอยู่บนแถบนำไฟฟ้าของสารกึ่งตัวนำ



- 3) อิเล็กตรอนเคลื่อนที่จากสารกึ่งตัวนำออกไปสู่วงจรภายนอก
- 4) อิเล็กตรอนที่สูญเสียพลังงานจากวงจรภายนอก กลับคืนสู่เซลล์ผ่านทางขั้วไฟฟ้าแคโทด
- 5) อิเล็กตรอนกลับคืนสู่โมเลกุลสีย้อมผ่านปฏิกิริยารีดอกซ์ของอิเล็กโทรไลต์



## 2.5 ปัจจัยที่มีผลต่อการทำงานของเซลล์แสงอาทิตย์

### 2.5.1 รังสีดวงอาทิตย์ที่ผิวโลก

ปริมาณแสงอาทิตย์ที่วัดได้ในอากาศมีค่าคงที่ เรียกว่า Solar Constant มีค่าเท่ากับ 1,365 วัตต์ต่อตารางเมตร เมื่อแสงเดินทางผ่านชั้นบรรยากาศของโลก ความเข้มแสงจะลดลงประมาณ 30 เปอร์เซ็นต์ เนื่องจากปัจจัยหลักๆ คือ

1. การกระเจิง (Scattering) ของรังสีโดยโมเลกุลในชั้นบรรยากาศ ซึ่งเกิดขึ้นกับทุกความยาวคลื่น โดยเฉพาะกับรังสีที่มีความยาวคลื่นสั้น (กล่าวคือ แสงสีน้ำเงินจะกระเจิงง่ายกว่าแสงสีแดง) การกระเจิงของแสงทำให้มีความเข้มของรังสีลดลงประมาณ 10 เปอร์เซ็นต์
2. การดูดกลืนแสง (Absorption) ของรังสี จะดูดกลืนด้วยแสงเมฆ ฝุ่น ก๊าซเรือนกระจก และชั้นโอโซน การสูญเสียที่เกิดจากการดูดกลืนรังสีอยู่ที่ประมาณ 18 เปอร์เซ็นต์

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่าจะกรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ตัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

## 2.5.2 องค์ประกอบของแสงอาทิตย์ที่มีผลต่อค่าประสิทธิภาพการเปลี่ยนพลังงานของเซลล์แสงอาทิตย์

1. สเปกตรัมของแสงอาทิตย์
2. ความเข้มแสงจากดวงอาทิตย์
3. องศาของแสงที่ตกกระทบแผงเซลล์แสงอาทิตย์
4. พลังงานรังสีต่อหนึ่งหน่วยพื้นที่ต่อหนึ่งหน่วยเวลา หรือ Insolation

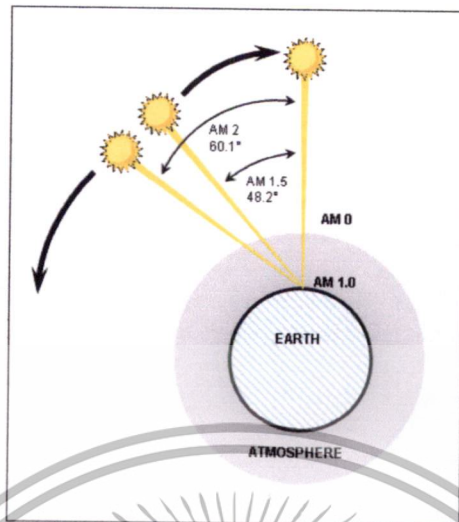
### 2.5.3 ค่ามวลอากาศ (Air mass)

เมื่อแสงอาทิตย์เดินทางผ่านชั้นบรรยากาศของโลก จะเกิดการสะท้อนกลับ และถูกดูดกลืนด้วยเมฆ ฝุ่น ก๊าซในบรรยากาศ และชั้นโอโซน เมื่อแสงแดดเดินทางผ่านชั้นบรรยากาศเป็นระยะทางมากขึ้น ความเข้มแสงก็จะลดลงตามลำดับ ส่งผลให้ในวันเดียวกัน เราจะสังเกตความเข้มแสงเปลี่ยนไป ทั้งนี้ความเข้มแสงจะมีค่ามากที่สุดเมื่อดวงอาทิตย์อยู่ตรงกลางพอดี เราสามารถบอกลักษณะความเข้มแสงได้ ตามระยะทางที่แสงเดินทางผ่านบรรยากาศ โดยอิทธิพลของบรรยากาศต่อความเข้มแสงที่เปลี่ยนไปนั้นสามารถแสดงด้วยดัชนีที่เรียกว่า มวลอากาศ (Air mass, AM) มีค่าความสัมพันธ์กับมุมที่แสงอาทิตย์กระทำกับเส้นตั้งฉากผิวโลก ถ้ามุมดังกล่าวคือ  $\theta$  ค่ามวลอากาศจะมีค่าเท่ากับ  $\frac{1}{\cos\theta}$

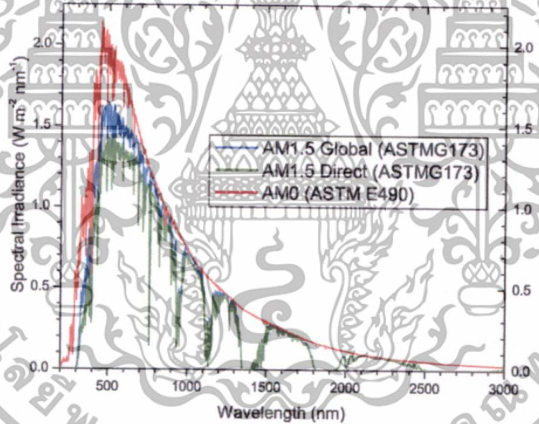
เนื่องจากกระแสของเซลล์แสงอาทิตย์เป็นส่วนโดยตรงกับความเข้มแสง เมื่อความเข้มแสงสูง กระแสที่ได้จากเซลล์แสงอาทิตย์ก็จะสูงขึ้น ในขณะที่แรงดันไฟฟ้าแทบจะไม่เป็นตามความเข้มแสงมากนัก แต่จะแปรตามอุณหภูมิดังนั้นจึงได้มีการกำหนดค่าความเข้มแสงมาตรฐานที่ใช้ในการทดสอบประสิทธิภาพเซลล์แสงอาทิตย์คือ ความเข้มแสงที่วัดได้บนโลกในสภาพอากาศปลอดโปร่ง ปราศจากเมฆหมอกและวัดที่ระดับน้ำทะเล ที่ดวงอาทิตย์ทำมุมเท่ากับ 48.2 องศากับแนวตั้ง ซึ่งมีความเข้มแสงเท่ากับ 1,000 เมกะวัตต์ต่อตารางเซนติเมตร ( $\text{mW}/\text{cm}^2$ ) คือค่ามวลอากาศ 1.5 (AM 1.5) ซึ่งเป็นค่ามาตรฐานที่ใช้ในการวัดเซลล์แสงอาทิตย์ของหลายหน่วยงาน ตามมาตรฐานของ American Society for Testing and Materials (ASTM)

และเมื่อดวงอาทิตย์ทำมุม 60.1 องศากับแนวตั้ง คือค่ามวลอากาศ 2 (AM 2) ส่วนค่าที่แสงอาทิตย์นอกระบบบรรยากาศโลกจะเรียกว่า ค่ามวลอากาศ 0 (AM 0) และเมื่อแสงเดินทางผ่านชั้นบรรยากาศเข้ามาในขณะที่ดวงอาทิตย์อยู่ตรงศีรษะพอดีจะมีค่ามวลอากาศ 1 (AM 1) ดังแสดงในรูปที่ 2.8 ซึ่งแต่ละค่ามวลอากาศมีสเปกตรัมแสงมาตรฐานที่ ASTM กำหนดดังแสดงในรูปที่ 2.9

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ตัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้



รูปที่ 2.8 ค่ามวลอากาศที่ขึ้นขีและหีมวลอากาศมูมต่างๆ



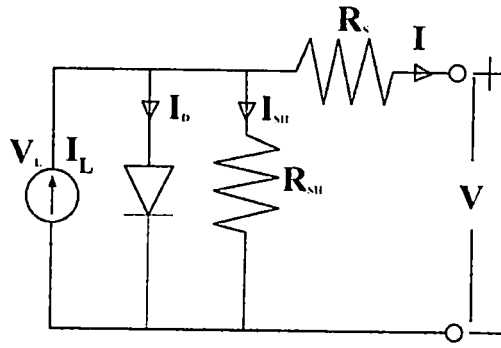
รูปที่ 2.9 กราฟแสดงสเปกตรัมแสงมาตรฐานที่ ASTM กำหนด

## 2.6 การวัดประสิทธิภาพของเซลล์แสงอาทิตย์

### 2.6.1 ค่าพารามิเตอร์ที่เกี่ยวข้องกับการวัดประสิทธิภาพของเซลล์แสงอาทิตย์

โดยทั่วไปสมบัติทางไฟฟ้าของเซลล์แสงอาทิตย์แสดงในรูปความสัมพันธ์ระหว่างค่ากระแสและแรงดันไฟฟ้า เริ่มต้นที่วงจรมูลของเซลล์แสงอาทิตย์

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ตัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้



รูปที่ 2.10 วงจรสมมูลของเซลล์แสงอาทิตย์

จากรูป 2.10 จะให้ว่ามี ไดโอด (รอยต่อพี-เอ็น) และตัวต้านทานขนาน(Shunt resistance,  $R_{SH}$ ) ต่อขนานกับเซลล์แสงอาทิตย์ และยังมีความต้านทานอีกตัวต่ออนุกรมกับวงจร โดยค่ากระแสสุทธิ  $I$  ที่ได้จากเซลล์แสงอาทิตย์ที่สามารถจ่ายไปยังโหลด มีค่าเท่ากับกระแส  $I_L$  ที่เกิดจากเซลล์แสงอาทิตย์หักลบด้วยกระแสที่ไหลผ่านไดโอด  $I_D$  และกระแสที่ไหลผ่านความต้านทานขนาน  $R_{SH}$  ในขณะที่กระแสไฟฟ้าไหลผ่านจะทำให้เกิดค่าแรงดันไฟฟ้าตกคร่อมในแต่ละจุดขึ้นและค่าแรงดันไฟฟ้า ณ จุดใดๆ เท่ากับแรงดันไฟฟ้าที่ขาออกแล้วบวกด้วยผลคูณระหว่างกระแสไฟฟ้ากับความต้านทานอนุกรม ความสัมพันธ์แสดงดังสมการที่ 2.1 และ 2.2 นี้

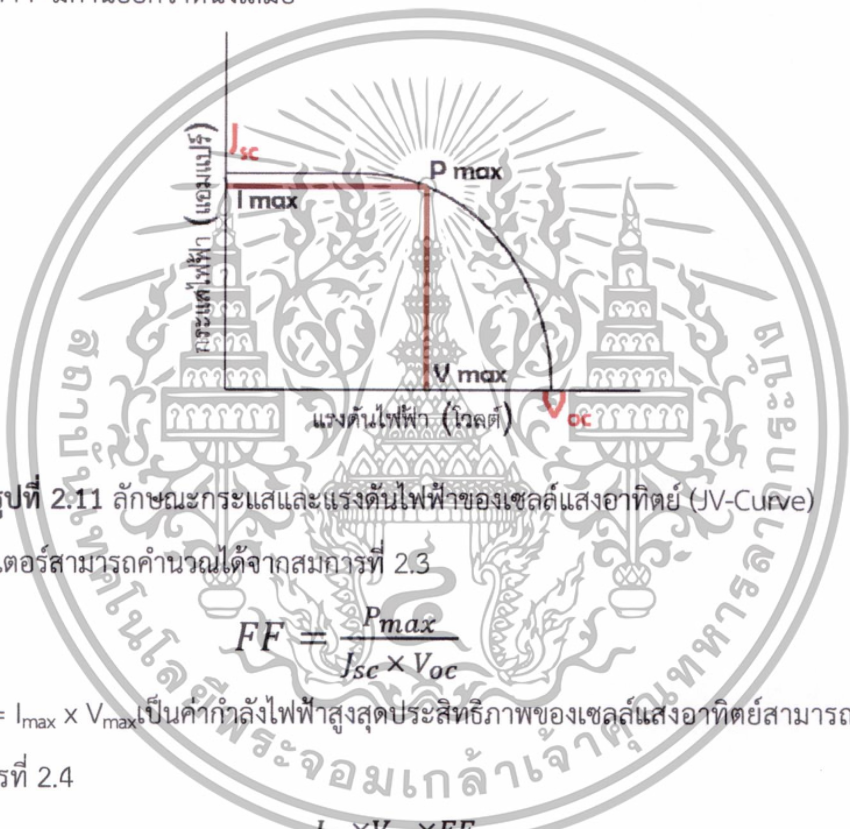
$$I = I_L - I_D - I_{SH} \tag{2.1}$$

$$V_L = V + IR_S \tag{2.2}$$

โดยที่	$I$	กระแสไฟฟ้าขาออกสุทธิ มีหน่วยเป็นแอมแปร์
	$I_L$	กระแสไฟฟ้าที่เกิดจากแหล่งพลังงานแสง มีหน่วยเป็นแอมแปร์
	$I_D$	กระแสไฟฟ้าที่ไหลผ่านไดโอด มีหน่วยเป็นแอมแปร์
	$I_{SH}$	กระแสไฟฟ้าที่ไหลผ่านความต้านทาน Shunt มีหน่วยเป็นแอมแปร์
	$V$	แรงดันไฟฟ้าขาออก มีหน่วยเป็นโวลต์
	$I$	กระแสไฟฟ้าขาออก มีหน่วยเป็นแอมแปร์
	$R_S$	ความต้านทานอนุกรม มีหน่วยเป็นโอห์ม
	$V_L$	แรงดันไฟฟ้าที่ตกคร่อมไดโอดและความต้านทาน Shunt มีหน่วยเป็นโวลต์

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่าจะกรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

ประสิทธิภาพการเปลี่ยนพลังงานแสงเป็นพลังงานไฟฟ้าของเซลล์แสงอาทิตย์จะขึ้นกับความยาวคลื่นแสง โดยประสิทธิภาพการเปลี่ยนพลังงานแสงเป็นพลังงานไฟฟ้า (Solar Cell Conversion Efficiency) จะมีค่าพารามิเตอร์ที่สำคัญประกอบด้วย กระแสไฟฟ้าลัดวงจร ( $J_{sc}$ ) แรงดันไฟฟ้าวงจรเปิด ( $V_{oc}$ ) และฟิลต์แฟกเตอร์ (FF) โดยค่า  $J_{sc}$  เป็นกระแสไฟฟ้าสูงสุดขณะที่แรงดันไฟฟ้าของเซลล์แสงอาทิตย์มีค่าเป็นศูนย์ ส่วนค่า  $V_{oc}$  เป็นแรงดันไฟฟ้าสูงสุดขณะไม่มีกระแสไฟฟ้างอกที่ 2.11 ส่วนค่าฟิลต์แฟกเตอร์เป็นสัดส่วนระหว่างผลคูณแรงดันไฟฟ้ากับกระแสไฟฟ้าที่จุดทำงานสูงสุด (จุดที่ให้กำลังไฟฟ้าสูงสุด,  $P_{max}$ ) และผลคูณของกระแสไฟฟ้าลัดวงจรกับแรงดันไฟฟ้าวงจรเปิดตั้งสมการที่ 2.4 และพบว่าค่า FF มีค่าน้อยกว่าหนึ่งเสมอ



รูปที่ 2.11 ลักษณะกระแสและแรงดันไฟฟ้าของเซลล์แสงอาทิตย์ (JV-Curve)

ค่าฟิลต์แฟกเตอร์สามารถคำนวณได้จากสมการที่ 2.3

$$FF = \frac{P_{max}}{J_{sc} \times V_{oc}} \tag{2.3}$$

โดยที่  $P_{max} = I_{max} \times V_{max}$  เป็นค่ากำลังไฟฟ้าสูงสุดประสิทธิภาพของเซลล์แสงอาทิตย์สามารถคำนวณได้จากสมการที่ 2.4

$$\eta = \frac{J_{sc} \times V_{oc} \times FF}{P_{in}} \tag{2.4}$$

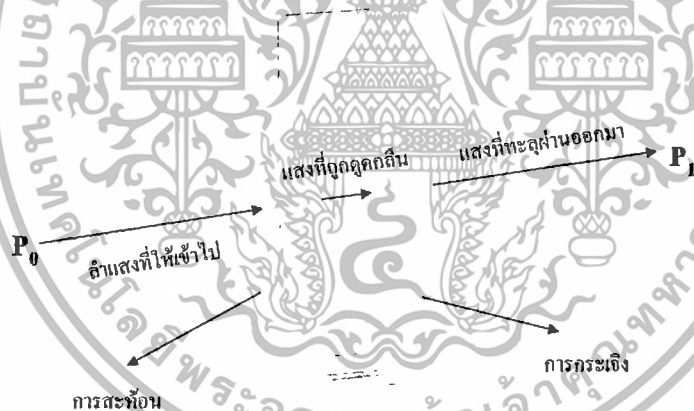
เมื่อ  $P_{in}$  คือ พลังงานแสงที่ตกกระทบบนเซลล์แสงอาทิตย์ (วัตต์)

$\eta$  คือค่าประสิทธิภาพของเซลล์แสงอาทิตย์

## 2.7 เทคนิคการวิเคราะห์ด้วยเครื่องยูวี-วิสิเบิลสเปกโทรโฟโตมิเตอร์

(UV-Vis Spectrophotometer)

การตรวจวัดสารเคมีเพื่อศึกษาถึงสมบัติ และโครงสร้างของสารนั้นจะใช้เทคนิคสเปกโทรสโคปี (spectroscopy) ซึ่งเป็นศาสตร์ที่ศึกษาเกี่ยวกับการดูดกลืน (absorption) หรือการคาย (emission) รังสีแม่เหล็กไฟฟ้า (electromagnetic radiation) ของสารโดยเฉพาะสารส่วนใหญ่สามารถดูดกลืนคลื่นในช่วงอัลตราไวโอเล็ต (ultraviolet UV) และช่วงแสงที่มองเห็นได้ (visible) จากสมบัตินี้จึงนำมาใช้เป็นเทคนิควิเคราะห์ที่เรียกว่ายูวี-วิสิเบิลสเปกโทรสโคปี ในปัจจุบันยูวี-วิสิเบิลสเปกโทรสโคปีเป็นเทคนิคที่มีความสำคัญทางวิทยาศาสตร์เป็นอย่างมากยิ่งเพราะถือว่าเป็นเทคนิคที่ง่าย ถูกต้องแม่นยำและใช้กันอย่างกว้างขวางโดยเมื่อให้ลำแสงเคลื่อนที่อย่างต่อเนื่องผ่านเข้าไปในวัสดุใสจะพบว่าแสงบางส่วนถูกดูดกลืน บางส่วนเกิดการสะท้อน บางส่วนกระเจิง และบางส่วนทะลุผ่านออกไป ดังแสดงในรูปที่ 2.12 ถ้าให้แสงที่ผ่านออกไปนั้นผ่านเข้าเครื่องกระจายแสงพวกปริซึมหรือเกรตติง จะเห็นว่าสเปกตรัมหายไปส่วนหนึ่ง ส่วนที่หายไปเรียกว่า สเปกตรัมที่ถูกดูดกลืน (absorption spectrum)



รูปที่ 2.12 การเกิดอันตรกิริยาของสารเคมีกับการแผ่รังสีหรือแสง

ในการวัดปริมาณของแสงหรือ radiation ที่ถูกดูดกลืนด้วยสารตัวอย่างนั้น เราสามารถทำได้โดยให้ลำแสงผ่านเข้าไปในสารตัวอย่าง แล้ววัดปริมาณของแสงที่ผ่านทะลุออกมาโดยเปรียบเทียบกับแสงที่ทะลุออกมาเมื่อไม่มีสารตัวอย่าง เมื่อพิจารณาถึงการเปลี่ยนแปลงของแสงที่ผ่านโมโนโครมาเตอร์เข้าไปยังเซลล์ที่ใส่ตัวทำละลายกับสารอื่นๆ ซึ่งไม่มีสารที่จะดูดกลืนแสง เรียกว่า สารละลาย blank ดังนั้น ค่าแสงที่ทะลุออกมาให้เป็น  $P_0$  (Corrected incident radiant energy) จากกฎของเบียร์และแลมเบิร์ต (Beer and Lambert's law) จะแสดงค่าความสัมพันธ์ได้ดังนี้

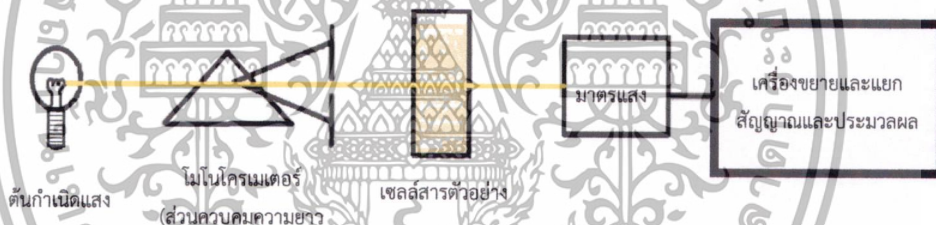
เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

$$A = \epsilon bc = \log \frac{P_0}{P} \text{ หรือ } -\log T = \epsilon bc \quad (2.5)$$

เมื่อ  $A$  คือ แอ็บซอร์เบอานซ์ (absorbance)  $\epsilon$  คือโมลาร์แอ็บซอร์ปติวิตี (molar absorptivity)  $b$  คือ ความกว้างของเซลล์เป็นเซนติเมตร และ  $c$  คือความเข้มข้นเป็นโมลต่อลิตร แต่ถ้าความเข้มข้นเป็นหน่วยอื่นให้เขียนเป็น  $A = abc$  เมื่อ  $a$  คือ แอ็บซอร์ปติวิตี (absorptivity) ทั้ง  $\epsilon$  และ  $a$  เป็นค่าคงที่ขึ้นกับชนิดของสารและความยาวคลื่น อาจกล่าวได้ว่า ค่าแอ็บซอร์เบอานซ์ของสารละลายจะเป็นปฏิภาคโดยตรงกับความเข้มข้น ตามกฎของเบียร์และแลมเบิร์ต ได้สมมติให้ แสงที่ใช้ผ่านสารละลายหรือวัตถุนั้นต้องเป็นแสงโมโนโครมาติก (monochromatic radiation) และกระบวนการดูดกลืนแสงแต่ละอนุภาคต้องไม่ขึ้นแก่กัน คือ ต้องทำให้สารละลายเจือจาง และเป็นเนื้อเดียวกัน

### 2.7.1 ส่วนประกอบของเครื่องยูวี-วิสิเบิลสเปกโทรโฟโตมิเตอร์

เครื่องยูวี-วิสิเบิลสเปกโทรโฟโตมิเตอร์โดยทั่วไปจะประกอบด้วยส่วนต่างๆ ดังรูป



รูปที่ 2.13 องค์ประกอบของเครื่องยูวี-วิสิเบิลสเปกโทรโฟโตมิเตอร์

ในส่วนของต้นกำเนิดแสงที่ใช้กันจะเป็นหลอดไฮโดรเจน หรือหลอดดิวทีเรียม ให้แสงอยู่ในช่วงความยาวคลื่น 185-375 นาโนเมตร ซึ่งเกิดจากการคายพลังงานของหลอดแสง ช่องที่ให้แสงออกจะต้องทำด้วยควอร์ตซ์ ทั้งหลอดดิวทีเรียมและไฮโดรเจนมีอายุใช้งานจำกัด แต่หลอดดิวทีเรียมซึ่งมีราคาแพงกว่าจะมีอายุการใช้งานมากกว่า และให้ความเข้มแสงมากกว่า ส่วนแสงที่มีความยาวคลื่นในช่วงที่ตามองเห็นมักใช้หลอดชนิดทั้งสแตน โมโนโครเมเตอร์เป็นส่วนที่ควบคุมแสงที่ออกมาจากต้นกำเนิดแสง ซึ่งเป็นพอลิโครเมติก (แสงที่ประกอบด้วยแสงที่มีความยาวคลื่นต่างๆ) ให้เป็นแสงโมโนโครเมติก ซึ่งเป็นแถบแสงแคบๆ โมโนโครเมเตอร์จะประกอบด้วย ช่องที่ปล่อยให้แสงเข้า กระจกและเลนส์เพื่อให้เกิดการสะท้อนไปมาในเครื่อง และส่วนที่ใช้ทำให้แสงกระจายออกเป็นความยาวคลื่นต่างๆ กันเพื่อให้เหมาะแก่การใช้หรืออาจเป็นส่วนที่ตัดแสงบางช่วงออกไปให้เหลือเฉพาะช่วงแสงที่

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่าจะกรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

ต้องการ เช่น เกรตติง (grating) แสงจากส่วนโมโนโครเมเตอร์จะผ่านช่องแสงออกไปสู่สารตัวอย่าง และมาตรวจวัดแสง โดยทั่วไปช่องแสงเข้าและช่องแสงออกมักจะเปิดเท่ากัน เซลล์ที่บรรจุสารตัวอย่าง บางครั้งเรียกว่า คิวเวท (cuvettes) ซึ่งทำจากซิลิกาและควอร์ตซ์ที่ใช้ได้ทั้งในช่วงยูวีและวิสิเบิล ส่วนสุดท้ายจะเป็นส่วนของเครื่องวัดแสงซึ่งจะมีหลายแบบ แต่ละแบบอาจแตกต่างกันบ้างที่ความกว้างของช่วงคลื่นแสงที่สามารถตรวจสอบได้ ความเร็วของการตอบสนองของแสง สภาพไวของการรับแสง เป็นต้น เครื่องวัดแสงที่ดีควรมีลักษณะที่มีสภาพไวแสงสูง มีการตอบสนองเป็นแบบสภาพเชิงเส้นตามแสงที่ตกกระทบ มีสัญญาณรบกวนน้อย มีเสถียรภาพที่ดีให้ค่าที่วัดไม่แปรปรวนมาก ขนาดไม่ใหญ่และราคาไม่แพงมาก ที่นิยมใช้ได้แก่ PMT (photomultiplier tube), diode arrays และ CCDs (charge coupled devices) เครื่องจะทำการบันทึกค่าความยาวคลื่นร่วมกับค่ามุมของแต่ละความยาวคลื่นที่ เกิดการดูดกลืน ผลของสเปกตรัมที่ได้จะแสดงในรูปของกราฟระหว่างค่า absorbance และค่าความยาวคลื่น

เครื่องยูวี-วิสิเบิลสเปกโตรโฟโตมิเตอร์สามารถแบ่งได้เป็น 2 ระบบ คือ แบบลำแสงเดี่ยว และแบบลำแสงคู่ สำหรับเครื่องแบบลำแสงเดี่ยวเป็นเครื่องที่ใช้ลำแสงเดี่ยวจากแหล่งกำเนิดผ่านไปยังตัวอย่าง เครื่องมือนี้ได้รับการออกแบบให้สามารถใช้งานได้ง่ายสะดวก และมีราคาไม่แพงมากนัก สำหรับเครื่องแบบลำแสงคู่ นั้น แสงจะถูกแยกออกเป็น 2 ลำ ก่อนที่จะไปตกลงบนตัวอย่าง โดยแสงลำหนึ่งจะใช้เป็นลำแสงอ้างอิงขณะที่อีกลำจะผ่านไปยังตัวอย่าง เครื่องมือที่เป็นแบบลำแสงคู่บางรุ่นจะมีเครื่องตรวจวัด 2 ตัวเพื่อที่จะตรวจวัดแสงอ้างอิงและแสงที่มาจากตัวอย่างได้พร้อมกัน แต่ในบางรุ่นจะมีเครื่องตรวจวัดเพียงตัวเดียว โดยแสงทั้งสองลำจะผ่านตัวชิ้อบเปอร์ (chopper) ซึ่งจะทำหน้าที่กักแสงลำหนึ่งไว้ในช่วงระยะเวลาหนึ่ง เครื่องตรวจวัดจึงสามารถตรวจวัดความแตกต่างของแสงทั้งสองลำได้

### 2.7.2 การวิเคราะห์เชิงคุณภาพและปริมาณ

โดยหลักการแล้ว สเปกตรัมซึ่งเกิดจากการดูดกลืนแสงในช่วงรังสียูวีและแสงขาวของสารตัวอย่างจะแสดงคุณสมบัติเฉพาะของสารนั้นๆ ทำให้สามารถนำไปใช้วิเคราะห์สารชนิดต่างๆ ได้ แต่ทั้งนี้การวิเคราะห์ด้วยเทคนิคนี้เท่านั้นจะให้ผลได้เพียงคร่าวๆ เพราะลักษณะของสเปกตรัมของสารแต่ละชนิดที่ได้จะมีความกว้างมากและยังมีรายละเอียดอีกเยอะจึงต้องใช้เทคนิคอื่นๆ ร่วมวิเคราะห์ด้วย สำหรับการวิเคราะห์สารในเชิงปริมาณด้วยเทคนิคนี้สามารถทำได้โดยใช้วิธีการทำกราฟมาตรฐานระหว่างค่าการดูดกลืนแสงและค่าความเข้มข้น ดังนั้นเมื่อสามารถวัดค่าการดูดกลืนแสงของสารได้ก็สามารถหาปริมาณของสารที่จะวิเคราะห์ได้จากกราฟ

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่าจะกรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

## 2.8 เทคนิคการวิเคราะห์ด้วยเครื่องนิวเคลียร์แมกเนติกเรโซแนนซ์สเปกโตรสโคปี (Nuclear Magnetic Resonance Spectroscopy)

นิวเคลียร์แมกเนติกเรโซแนนซ์สเปกโตรสโคปี หรือชื่อย่อว่าเอ็นเอ็มอาร์ (NMR) นั้น มีประโยชน์มากในการศึกษาเกี่ยวกับสูตรโครงสร้างของสาร ไม่ว่าจะเป็นสารอินทรีย์หรือสารอนินทรีย์ก็ตามเป็นเทคนิคที่เกี่ยวข้องกับการวัดระดับพลังงานที่แตกต่างกันของนิวเคลียสภายใต้อิทธิพลของสนามแม่เหล็กซึ่งพลังงานที่เกี่ยวข้องจะเป็นคลื่นแม่เหล็กไฟฟ้าในช่วงคลื่นวิทยุ ส่งผลให้เกิดการเปลี่ยนแปลงสปิน (spin) หรือการหมุนของนิวเคลียส ซึ่งเป็นสปินที่มีค่าไม่เท่ากับศูนย์ อย่างเช่น  $^1\text{H}$ ,  $^{13}\text{C}$ ,  $^{19}\text{F}$  เป็นต้น แต่ที่สำคัญจะเป็น  $^1\text{H}$  ซึ่งพบมากในสารเคมีทั่วไป ในส่วนของหลักการของเทคนิคนี้จะศึกษาในส่วนของนิวเคลียสที่อนุภาคที่มีประจุและมีพฤติกรรมเหมือนกับหมุนอยู่ตลอดเวลาการสปินนี้จะก่อให้เกิดโมเมนต์แม่เหล็กบริเวณการหมุน ซึ่ง  $^1\text{H}$  มีเลขสปินควอนตัมเป็น  $\frac{1}{2}$  และมีค่าที่เป็นไปได้ 2 แบบคือ  $+\frac{1}{2}$  และ  $-\frac{1}{2}$  เมื่อให้สนามแม่เหล็กภายนอกแก่นิวเคลียส จะเกิดการจัดเรียงตัวแบบใหม่ที่เป็นไปได้เพียงสองแบบ คือ นิวเคลียสที่มีสปินบวกจะวางตัวในแนวขนานกับสนามแม่เหล็ก แต่มีทิศทางเดียวกัน และเป็นสถานะที่มีพลังงานต่ำ ส่วนนิวเคลียสที่มีสปินเป็นลบ จะวางตัวในแนวขนานเช่นเดียวกัน แต่มีทิศทางตรงกันข้ามกับสนามแม่เหล็ก และจะมีพลังงานสูงกว่า ความแตกต่างของพลังงาน ( $\Delta E$ ) ระหว่างการจัดเรียงตัวทั้งสองแบบจะเป็นไปตามสมการที่ 2.6

$$\Delta E = h\nu \quad (2.6)$$

หากนำตัวอย่างที่มีนิวเคลียส  $^1\text{H}$  ไปวางในสนามแม่เหล็ก แล้วให้พลังงานในช่วงความถี่วิทยุที่เหมาะสม จะเกิดการเปลี่ยนแปลงของนิวเคลียส โดยนิวเคลียสที่ระดับพลังงานต่ำจะดูดกลืนพลังงานแล้วขึ้นไปอยู่ในระดับพลังงานสูง (จัดตัวในทิศทางตรงข้ามกับสนามแม่เหล็ก) นิวเคลียสบางตัวจะถูกกระตุ้นให้คายพลังงานออกมาแล้วลงไปอยู่ในระดับพลังงานที่ต่ำ (จัดตัวในทิศทางเดียวกับสนามแม่เหล็ก) เรียกว่า การเกิดเรโซแนนซ์ จะเห็นว่า  $\Delta E$  จะขึ้นกับชนิดของนิวเคลียส และความแรงของสนามแม่เหล็กนอกจากนี้ถ้าสิ่งแวดล้อมต่างกันก็จะให้ค่าต่างกันด้วย จากข้อนี้จึงใช้ศึกษาโครงสร้างของสารได้

## 2.8.1 ส่วนประกอบของเครื่องนิวเคลียร์แมกเนติกเรโซแนนซ์สเปกโตรสโคปี

ส่วนประกอบหลักๆ ของเอ็นเอ็มอาร์ประกอบด้วย 3 องค์ประกอบหลักดังนี้

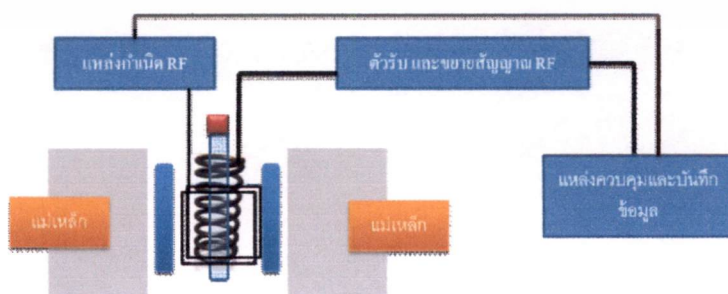
1) แม่เหล็ก (Magnets) สมบัติของแม่เหล็กเป็นตัวกำหนดความถี่ของนิวเคลียสในการหมุนควงในเครื่องเอ็นเอ็มอาร์ ซึ่งกำหนดในหน่วย SI ว่าเป็นสนามเหนี่ยวนำแม่เหล็ก (Magnetic induction field) ให้สัญลักษณ์เป็น B มีหน่วยเป็นเทสลา โดยทั่วไปจะมีอยู่ 3 แบบ คือ แม่เหล็กถาวร แม่เหล็กไฟฟ้า และ แม่เหล็กชนิด superconducting

2) แหล่งกำเนิดความถี่คลื่นวิทยุ (Radio frequency transmitter) และตัวรับความถี่คลื่นวิทยุ (Radio frequency receiver) ทำหน้าที่ส่งสัญญาณคลื่นวิทยุไปยังตัวอย่างและตรวจวัดสัญญาณที่ถูกดูดกลืน หรือปลดปล่อยออกมา

3) แหล่งเก็บและบันทึกข้อมูล (Data Processor) เพื่อใช้เก็บข้อมูลสัญญาณในการวัดสารตัวอย่าง ก่อนนำไปวิเคราะห์ผล

## 2.8.2 การวิเคราะห์และการแปลผลเครื่องนิวเคลียร์แมกเนติกเรโซแนนซ์สเปกโตรสโคปี

ในการวัดสัญญาณเอ็นเอ็มอาร์จะต้องนำตัวอย่างไปละลายในตัวทำละลายที่เหมาะสม ซึ่งไม่มีนิวเคลียสชนิดเดียวกันกับที่ตรวจวัดสัญญาณ อย่างเช่นจะวัดสัญญาณโปรตอนของสารตัวอย่างจะใช้ตัวทำละลายเป็นสารละลายที่มีตัวที่เตรียมแทน ข้อมูลที่ได้จากเครื่องเอ็นเอ็มอาร์จะประกอบด้วยความเข้มของสัญญาณ (แกน y) พล็อตเทียบกับความถี่ (แกน x) ในลักษณะกลับหัวกับอินฟราเรดสเปกตรัม พิกที่สูงแสดงว่ามีกรดดูดกลืนคลื่นวิทยุที่ความถี่นั้นมาก ในการระบุความถี่นั้นไม่นิยมระบุความถี่โดยตรง จึงจะอ้างอิงถึงความถี่ในลักษณะสัมพันธ์กับความถี่อ้างอิงค่าหนึ่งซึ่งคำนวณจาก  $\delta = (V - V_{ref}) / V_{ref}$  ค่าสัมพัทธ์นี้เรียกว่าเคมีคัลชิฟต์ (chemical shift) หน่วยคือ ppm ค่าเคมีคัลชิฟต์ของโปรตอนทั่วไปจะอยู่ในช่วง 0-10 ppm



รูปที่ 2.14 องค์ประกอบหลักของเครื่องนิวเคลียร์แมกเนติกเรโซแนนซ์สเปกโตรสโคปี

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

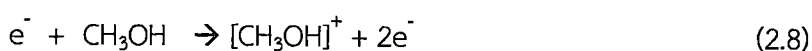
หลักการแปลผลเอ็นเอ็มอาร์เป็นการแปลผลจากข้อมูลที่บอกถึงความสัมพันธ์ระหว่างนิวเคลียสทั้งหมดที่ประกอบกันขึ้นเป็นโครงของสารตัวอย่างนั้นในสเปกตรัมของเอ็นเอ็มอาร์ โดยจำนวนชนิดของสัญญาณจะให้ข้อมูลเกี่ยวกับจำนวนชนิดของโปรตอนที่แตกต่างกันในโมเลกุล ตำแหน่งของสัญญาณหรือตำแหน่งของเคมีคัลชิฟต์จะให้ข้อมูลเกี่ยวกับสภาพแวดล้อมอิเล็กทรอนิกส์ของโปรตอนแต่ละกลุ่มนั้น ความเข้มของสัญญาณ ซึ่งแสดงในรูปพื้นที่ใต้พีค จะให้ข้อมูลเกี่ยวกับจำนวนของโปรตอนแต่ละชนิด และการแยกของสัญญาณ กลุ่มหนึ่งๆ ออกเป็นหลายพีค จะให้ข้อมูลเกี่ยวกับจำนวนโปรตอนอื่นๆ ที่ต่ออยู่กับคาร์บอนซึ่งต่อกับคาร์บอนที่โปรตอนที่กำลังพิจารณาอยู่นั้นต่ออยู่ด้วย

## 2.9 เทคนิคการวิเคราะห์ด้วยเครื่องแมสสเปกโตรเมทรี (Mass spectrometry)

หลักการพื้นฐานของเทคนิคแมสสเปกโตรเมทรีก็คือการเกิดไอออนเซชันกับการแยกมวลและการบันทึกไอออนที่เกิดขึ้น อธิบายได้ดังนี้ เมื่อสารตัวอย่างถูกเปลี่ยนให้อยู่ในสถานะแก๊สและถูกระดมยิงด้วยอิเล็กตรอนที่มีพลังงานสูง การชนกันระหว่างอิเล็กตรอนกับไอของโมเลกุล ทำให้อิเล็กตรอนหลุดออกจากโมเลกุลตัวหนึ่ง และได้ไอออนที่มีประจุบวกหนึ่งซึ่งเรียกว่าไอออนโมเลกุล (Molecular ions),  $M^+$ . ไอออนโมเลกุลที่เกิดขึ้นสามารถจะเกิดการแตกหักต่อไปเป็นส่วนย่อยได้อีก ดังแสดงในสมการที่ 2.7 ไอออนบวกทั้งหมดรวมทั้งไอออนโมเลกุลจะถูกแยกจากกันตามอัตราส่วนของมวลต่อประจุ ( $m/z$ ) ของมันและถูกบันทึกเป็นสเปกตรัมที่เรียกว่า แมสสเปกตรัม การบันทึก  $m/z$  ของไอออนที่มีประจุบวกหนึ่งก็คือการบันทึกมวลของไอออนสำหรับค่า  $m/z$  ของไอออนโมเลกุลจะมีค่าเท่ากับมวลโมเลกุลของสารตัวอย่าง ดังนั้น mass spectroscopy จึงเป็นเครื่องมือที่ใช้หามวลโมเลกุลของสารนั่นเอง



เช่น methanol



methanol molecular

ion ( $m/z = 32$ )

แมสสเปกตรัมของสารตัวอย่างแต่ละชนิดจะมีรูปแบบการแตกหักที่เป็นเอกลักษณ์ ให้  $m/z$  ที่มีค่าเฉพาะ สามารถนำมาแปรผลว่าสารตัวอย่างนั้นมีสูตรโครงสร้างอย่างไร หรืออาจนำไปเทียบ

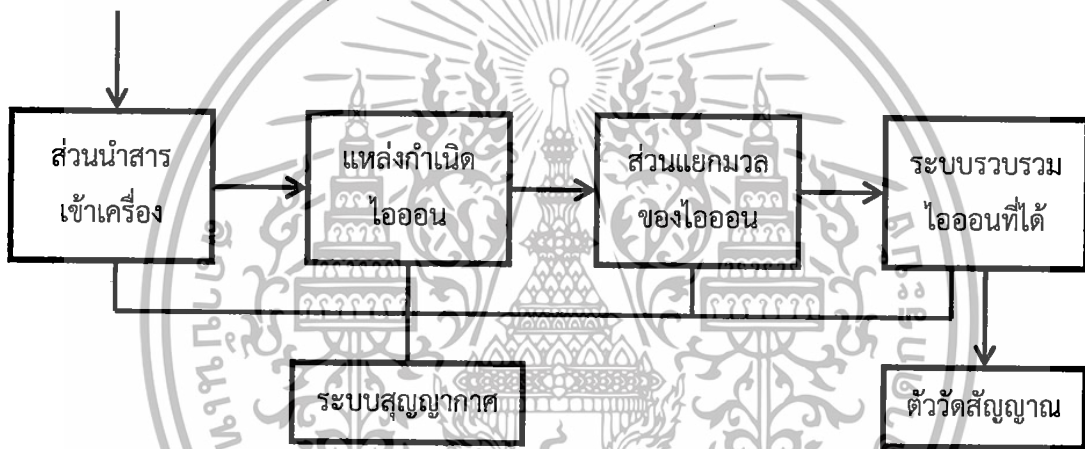
กับแมสสเปกตรัมมาตรฐานที่เป็นข้อมูลรวบรวมอยู่ในคอมพิวเตอร์ที่เรียกว่า library search ก็ได้ เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

### 2.9.1 ระบบเครื่องมือแมสสเปกโตรมิเตอร์

เครื่องมือแมสสเปกโตรมิเตอร์มีส่วนประกอบที่สำคัญ 3 ส่วนคือ

- ก. ส่วนนำสารเข้าเครื่อง
- ข. แหล่งกำเนิดไอออน
- ค. ส่วนแยกมวลของไอออนและตัววัดสัญญาณ

ซึ่งองค์ประกอบหลักที่สำคัญทั้ง 3 ส่วนจะอยู่ในระบบสุญญากาศ (vacuum system) ประมาณ  $10^{-5} - 10^{-7}$  ทอร์ เพื่อให้ไอออนที่เกิดขึ้นเคลื่อนที่ได้อย่างอิสระโดยไม่ต้องไปชนกับโมเลกุลของอากาศ



รูปที่ 2.15 ระบบเครื่องมือแมสสเปกโตรมิเตอร์

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่าจะกรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

## บทที่ 3

### ขั้นตอนการดำเนินงานวิจัย

ขั้นตอนการดำเนินงานวิจัยของวิทยานิพนธ์นี้ จะเริ่มจากการศึกษางานวิจัยที่เกี่ยวข้องกับการออกแบบโครงสร้างโมเลกุลสี้อมไวแสงโดยการคำนวณทางเคมีควอนตัม การสังเคราะห์สี้อมไวแสง รวมไปถึง หลักการของเซลล์แสงอาทิตย์ชนิดสี้อมไวแสง ขั้นตอนการออกแบบและการสร้าง วัสดุ อุปกรณ์ วิธีการประกอบและการวัดประสิทธิภาพของเซลล์แสงอาทิตย์ชนิดนี้ แล้วนำข้อมูลมาออกแบบแนวทางของงานวิจัย โดยออกแบบและสังเคราะห์โครงสร้างสี้อมไวแสง พร้อมทั้งทดสอบประสิทธิภาพของเซลล์แสงอาทิตย์ที่สร้างขึ้น

#### 3.1 การคำนวณและออกแบบสี้อมไวแสง โดยการคำนวณทางเคมีควอนตัม

##### (Quantum Chemical Calculation)

ในการคำนวณทางเคมีควอนตัมนั้น แบ่งการคำนวณเป็น 2 ขั้นตอนหลักๆ คือ การทำนายโครงสร้างเสถียร (Optimization) ที่สถานะพื้น (ground state) และการคำนวณพลังงาน (Energy) ของโมเลกุลที่สถานะเร้า (excited state) เพื่อทำนายคุณสมบัติต่างๆ ของสี้อมไวแสง เช่น ค่าการดูดกลืนแสง (Absorption spectra) ค่าแถบพลังงานต้องห้าม (Energy gap) และความสามารถในการเคลื่อนที่ของอิเล็กตรอนภายในโมเลกุล เป็นต้น

ซึ่งการทดลองในการคำนวณแบ่งเป็น 2 หัวข้อ คือการปรับปรุงโครงสร้างของสี้อมไวแสงโดยการปรับปรุงในส่วนของหมู่ให้อิเล็กตรอน และการปรับปรุงโครงสร้างของสี้อมไวแสง โดยการปรับปรุงในส่วนของตัวส่งผ่านอิเล็กตรอน ซึ่งการคำนวณทางเคมีควอนตัม ทั้งหมดเป็นจะคำนวณผ่านระเบียบวิธีทฤษฎีความหนาแน่นอิเล็กตรอน (Density Functional Theory )

##### 3.1.1 การทำนายโครงสร้างเสถียร (Optimization)

การคำนวณโดยใช้ทฤษฎีความหนาแน่นอิเล็กตรอนโดยใช้ระเบียบวิธี B3LYP/6-31G(d) เพื่อหาโครงสร้างที่เสถียรที่สภาวะพื้นซึ่งเป็นโครงสร้างที่ถูกต้องที่สุดที่สามารถใช้ในการคำนวณพลังงานต่อไปได้การคำนวณใช้สภาวะจำลองโดยให้สี้อมไวแสงละลายในสารละลายไดคลอโรฟอร์มเทน

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

### 3.1.2 การคำนวณพลังงาน (Energy) ของโมเลกุลที่สถานะเร้า

เป็นการคำนวณค่าพลังงานที่สภาวะกระตุ้นเมื่อโมเลกุลถูกกระตุ้นตั้งแต่ระดับพลังงานสภาวะเร้าที่ 1-10 โดยใช้ทฤษฎีความหนาแน่นอิเล็กตรอนโดยใช้ระเบียบวิธี cam-B3LYP/6-31G(d) เพื่อนำไปใช้ทำการดูคลื่นพลังงาน ออพิทอลโมเลกุล ค่าพลังงานแถบต้องห้าม เพื่อศึกษาอิทธิพลของการเปลี่ยนแปลงของหมู่ฟังก์ชันแต่ละส่วนในโครงสร้าง

### 3.1.3 Density of state (DOS)

เป็นการทำนายการเคลื่อนที่ของอิเล็กตรอนภายในโมเลกุล (intra molecular charge transfer) เพื่อศึกษาความหนาแน่นอิเล็กตรอนในแต่ละบริเวณของโครงสร้างที่สภาวะพื้นและสภาวะเร้า

## 3.2 การสังเคราะห์สีย้อมไวแสง เพื่อใช้เป็นสีย้อมไวแสงในเซลล์แสงอาทิตย์ชนิดสีย้อมไวแสง

### 3.2.1 สารเคมีที่ใช้ในการทดลอง

1. 4-Ethynyl-N,N-dimethylaniline	SIGMA ALDRICH
2. 5-bromo-2-thiophenecarboxaldehyde	SIGMA ALDRICH
3. PdCl <sub>2</sub> (PPh) <sub>3</sub>	SIGMA ALDRICH
4. Copper Iodide (CuI)	SIGMA ALDRICH
5. Triethylamine	SIGMA ALDRICH
6. Cyanoacetic acid	ACROS ORGANIC
7. Ammonium acetate	CARLO ERBA REAGENT
8. Potassium carbonate (K <sub>2</sub> CO <sub>3</sub> )	CARLO ERBA REAGENT
9. Sodium chloride (NaCl)	CARLO ERBA REAGENT
10. Silica gel (0.063-0.200 mm) (1.07734.1000)	CARLO ERBA REAGENT
11. Thin layer chromatography (TLC, aluminium sheet)	MERCK
12. Cyanoacetic acid (A.R. grade)	MERCK
13. Piperidine (C <sub>5</sub> H <sub>11</sub> N)	MERCK
14. Toluene (A.R. grade)	CARLO ERBA REAGENT

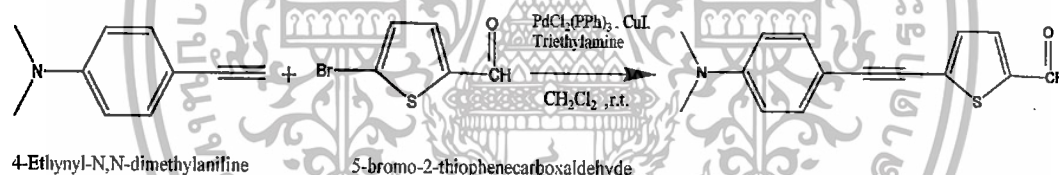
เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่าจะกรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

- |   |                    |
|---|--------------------|
| 15. Tetrahydrofuran (THF, A.R. grade)   | MERCK              |
| 16. Dimethylformamide (DMF, A.R. grade) | CARLO ERBA REAGENT |
| 17. Acetonitrile (A.R. grade)           | CARLO ERBA REAGENT |
| 18. น้ำปราศจากไอออน                     |                    |
| 19. ก๊าซไนโตรเจน                        |                    |

### 3.2.2 อุปกรณ์ที่ใช้ในการทดลอง

1. ปริภัณฑ์เครื่องแก้ว
2. เครื่องซังสาร
3. เครื่องกวนสารละลายชนิดแม่เหล็กพร้อมให้ความร้อน
4. แม่เหล็กปั่นกวน (Magnetic stirrer)
5. เครื่องระเหยตัวทำละลายแบบหมุน (evaporator)

### 3.2.3 การสังเคราะห์สี่อ้อมไวแสงที่มีไดเมทิลแอมมีนเป็นหมู่ให้อิเล็กตรอน



รูปที่ 3.1 ปฏิกริยาในการสังเคราะห์สี่อ้อมไวแสงที่มีไดเมทิลแอมมีนเป็นหมู่ให้อิเล็กตรอน

### 3.2.4 ขั้นตอนการสังเคราะห์

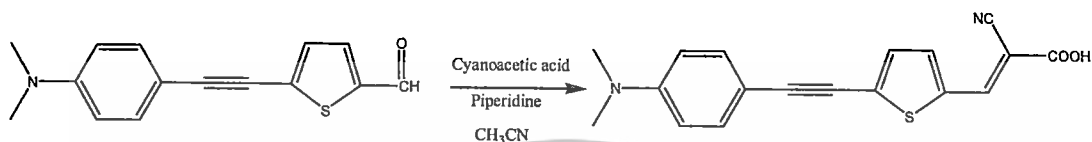
4-Ethynyl-N,N-dimethyl aniline ทำปฏิกิริยากับ 5-bromo-2-thiophenecarboxaldehyde โดยมี Copper Iodide (CuI) และ Bis(triphenylphosphine)palladium(II) dichloride ( $\text{PdCl}_2(\text{PPh}_3)_2$ ) เป็นตัวเร่งปฏิกิริยา โดยมีโทลูอีนเป็นตัวทำละลาย ภายใต้สภาวะก๊าซไนโตรเจนที่อุณหภูมิห้องเป็นเวลา 24 ชม.

1. ล้างคอปเปอร์ด้วยสารละลายอิมตัวแอมโมเนียมคลอไรด์ ( $\text{NH}_4\text{Cl}$ )
2. ล้างเบสด้วยสารละลายอิมตัวโซเดียมไฮดรอกไซด์คาร์บอเนต ( $\text{Na}_2\text{CO}_3$ )
3. ล้างไอออนด้วยสารละลายอิมตัวโซเดียมคลอไรด์ ( $\text{NaCl}$ )
4. ระเหยตัวทำละลายด้วยเครื่องระเหยตัวทำละลายแบบหมุนและทำสารให้บริสุทธิ์โดยการ

#### ทำคอลัมน์โครมาโทกราฟี

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่าจะกรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ตัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

5. จากนั้นทำปฏิกิริยาเปลี่ยนหมู่ฟังก์ชันแอลดีไฮด์เป็นไซยาโนอริลิก โดยทำปฏิกิริยากับ ไซยาโนซิติคแอซิด โดยมี ไพเพอริดีน piperidine เป็นตัวเร่งปฏิกิริยา ภายใต้สภาวะก๊าซ ไนโตรเจนที่อุณหภูมิ 60 องศาเซลเซียส เป็นเวลา 3 ชั่วโมง (แสดงดังรูปที่ 3.2) ตรวจสอบการดำเนินไปของปฏิกิริยาด้วยทินเลเยอร์โครมาโทกราฟี (Thin layer Chromatography)



รูปที่ 3.2 ปฏิกิริยาการเปลี่ยนหมู่ฟังก์ชันของสีย้อมไวแสงที่มีไดเมทิลแอมมีนเป็นหมู่ให้อิเล็กตรอน

6. จากนั้นระเหยตัวทำละลายออกด้วยเครื่องระเหยตัวทำละลายแบบหมุน และทำสารให้บริสุทธิ์โดยการทำคอลัมน์โครมาโทกราฟี

### 3.3 การเตรียมเซลล์แสงอาทิตย์ชนิดสีย้อมไวแสง

เซลล์แสงอาทิตย์ชนิดสีย้อมไวแสงจะประกอบด้วยส่วนสำคัญ คือ ขั้วไฟฟ้าเวคคิง ขั้วแคโทด และสารละลายอิเล็กโทรไลต์ ซึ่งสามารถเตรียมได้ ดังนี้

#### 3.3.1 การเตรียมขั้วไฟฟ้าเวคคิง

ขั้วไฟฟ้าเวคคิงจะประกอบไปด้วยส่วนใหญ่ว่า คือ กระจกเคลือบด้วยสารนำไฟฟ้าโปร่งแสง (FTO) ชั้นฟิล์มสารกึ่งตัวนำโลหะออกไซด์ (ไททาเนียมไดออกไซด์) และโมเลกุลของสีย้อมไวแสงที่แทรกอยู่ในรูพรุนของชั้นฟิล์มโลหะออกไซด์

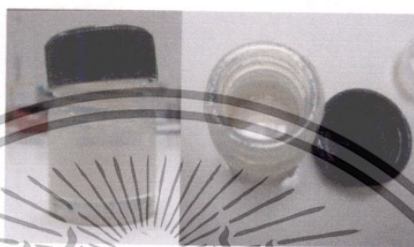
##### 3.3.1.1 กระจกเคลือบด้วยสารนำไฟฟ้าโปร่งแสง (กระจกนำไฟฟ้า)

กระจกนำไฟฟ้าที่ใช้ในงานวิจัยนี้จะใช้เป็นแก้วเคลือบด้วยสารทินออกไซด์ที่เจือด้วยสารฟลูออไรด์ ( $\text{SnO}_2 : \text{F}$ ) หรือ กระจกนำไฟฟ้า FTO ของบริษัทโซลาร์โรนิก (Solaronix SA) ซึ่งมีค่าความต้านทานประมาณ  $15 \Omega/\text{m}^2$  นำมาตัดให้มีขนาด  $1.5 \times 2$  เซนติเมตร และทำความสะอาดด้วยสารทำความสะอาด ล้างด้วยน้ำปราศจากไอออนล้างด้วยสารละลายเอทานอลและล้างด้วยน้ำปราศจากไอออนอีกครั้ง จากนั้นทำให้แห้ง จะได้แผ่นแก้วสะอาดสำหรับการเตรียมชั้นฟิล์มไททาเนียมไดออกไซด์

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

### 3.3.1.2 ชั้นฟิล์มสารกึ่งตัวนำโลหะออกไซด์ (ไททาเนียมไดออกไซด์)

การเตรียมชั้นฟิล์มไททาเนียมไดออกไซด์นี้จะใช้ไททาเนียมไดออกไซด์เพสต์ (Titanium dioxide paste) ชนิด PST-18NR ที่ผลิตโดยบริษัท JGC Catalysts and Chemicals Ltd. จากประเทศญี่ปุ่นซึ่งมีขนาดอนุภาคไททาเนียมไดออกไซด์ระดับนาโนเมตร มีสีขาวขุ่น ลักษณะชั้นคล้ายนมชั้นดังรูปที่ 3.3 เป็นชั้นฟิล์มโลหะออกไซด์แบบโปร่งแสง



รูปที่ 3.3 ไททาเนียมไดออกไซด์เพสต์ชนิด PST-18NR ( $\text{TiO}_2$  แบบโปร่งแสง)

โดยเตรียมชั้นฟิล์มด้วยเทคนิคการพิมพ์แบบสกรีน ขนาด  $0.5 \times 0.5$  ตารางเซนติเมตร โดยใช้บล็อกสกรีนแสดงในรูปที่ 3.4 ลงบนแผ่นแก้วที่เคลือบสารนำไฟฟ้า (FTO) ขนาด  $1.5 \times 2$  ตารางเซนติเมตร ซึ่งทำความสะอาดแล้วหลังจากเคลือบด้วย PST-18NR นำไปให้ความร้อนที่อุณหภูมิประมาณ 90 องศาเซลเซียสเพื่อทำให้ชั้นฟิล์มที่สกรีนแห้ง ทำการสกรีนไททาเนียมไดออกไซด์เพสต์ซ้ำเป็นจำนวนหลายชั้น แสดงในรูปที่ 3.5 จากนั้นจะทำการสกรีนชั้นบนสุดด้วยไททาเนียมไดออกไซด์แบบกระเจิงแสงโดยใช้ สแคตเตอริงเพสต์ ( $\text{TiO}_2$ -scattering paste) ชนิด PST-400C ที่ผลิตโดยบริษัท JGC Catalysts and Chemicals Ltd. ให้เป็นชั้นฟิล์มสำหรับกระเจิงแสง โดยมีโครงสร้างแสดงในรูปที่ 3.6



รูปที่ 3.4 บล็อกสกรีนสำหรับเทคนิคการพิมพ์แบบสกรีน

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่าจะกรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้



รูปที่ 3.5 ขั้นตอนการเตรียมฟิล์มไททาเนียมไดออกไซด์



รูปที่ 3.6 โครงสร้างชั้นฟิล์มไททาเนียมไดออกไซด์

จากนั้นนำฟิล์มไปเผาในเตาเผาที่อุณหภูมิการเผาแบบขั้นบันไดดังรูปที่ 3.7 แล้วปล่อยให้เย็นตัวลงถึงอุณหภูมิห้อง ซึ่งหลังจากการเผาจะได้ฟิล์มไททาเนียมไดออกไซด์เคลือบอยู่บนกระจกนำไฟฟ้า FTO ดังรูปที่ 3.8



รูปที่ 3.7 อุณหภูมิการเผาแบบขั้นบันไดของการเผาฟิล์มไททาเนียมไดออกไซด์

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่าจะกรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้



รูปที่ 3.8 ชั้นฟิล์มไททาเนียมไดออกไซด์

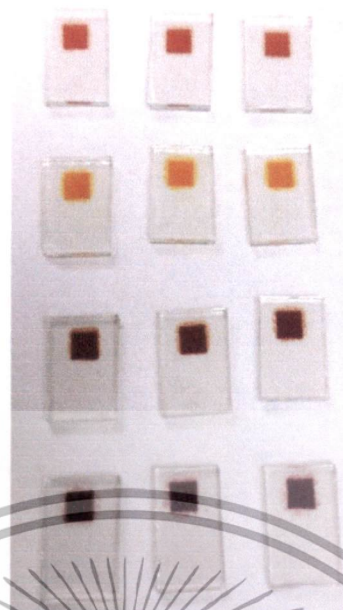
### 3.3.1.3 ชั้นของสีย้อมไวแสง

การเตรียมชั้นของสีย้อมโดยการนำชั้นฟิล์มไททาเนียมไดออกไซด์ที่เย็นตัวแล้วมาแช่ในสีย้อมไวแสงที่เตรียมไว้ ซึ่งมีสีย้อมไวแสงจากสีมาตรฐาน N719 (cis-dithiocyanate-N,N'-bis-(4-carboxylate-4'-tetra butyl ammonium-carboxylate-2,2'-bipyridine) ruthenium (II)) จากบริษัทดายโซล (Dyesol) ประเทศออสเตรเลีย และสีย้อมที่ได้จากการสังเคราะห์ โดยใช้เวลาในการแช่สีย้อมอย่างน้อย 24 ชั่วโมง ดังรูปที่ 3.9 โดยเก็บที่อุณหภูมิห้อง และไม่ให้อากาศ แสง หลังจากนั้นนำชั้นฟิล์มไททาเนียมไดออกไซด์ขึ้นจากสีย้อมและล้างด้วยสารละลายชนิดเดียวกันกับที่ใช้เป็นตัวทำละลายสีย้อม แล้ววางพักไว้ให้แห้งสำหรับใช้เป็นขั้วเวกคิงของเซลล์แสงอาทิตย์ชนิดสีย้อมไวแสงต่อไปดังรูปที่ 3.10



รูปที่ 3.9 การแช่สีย้อมไวแสงในสารละลายสีย้อมไวแสง

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่าจะกรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้



รูปที่ 3.10 ชั้นของสีย้อมไวแสงบนฟิล์มไททาเนียมไดออกไซด์

### 3.3.2 การเตรียมขั้วแคโทด

ขั้วไฟฟ้าแคโทดจะประกอบไปด้วยส่วนหลายๆ คือ กระจกเคลือบด้วยสารนำไฟฟ้าโปร่งแสง (FTO) และชั้นฟิล์มบางแพทตินัม

#### 3.3.2.1 การเตรียมแพทตินัมเพสต์ (Platinum paste)

ขั้วแคโทดในการวิจัยนี้จะใช้โลหะแพทตินัมสำหรับเป็นตัวเร่งปฏิกิริยาของขั้วนี้โดยจะทำการเตรียมแพทตินัมเพสต์ซึ่งมีลักษณะเป็นสารละลายเหลวข้น สีขุ่นตามรูปที่ 3.11 โดยสามารถเตรียมได้จากการนำผงแพทตินัม (Tetraammineplatinum(II)chloride (hydrate)) ผสมสารละลายกรด, น้ำกลั่นปราศจากไอออนและเอทานอล จากนั้นเติมสารละลาย เทอพิเนล (Terpineol) และเอทิลเซลลูโลส (Ethyl cellulose) ที่ละลายในเอทานอลลงไป แล้วผสมให้เข้ากันด้วยโฮโมจีไนเซอร์ (Homogenizer) เมื่อผสมเข้ากันดีแล้วนำไปประเหยตัวทำละลายออก จนเป็นสารละลายเหลวข้น



รูปที่ 3.11 แพทตินัมเพสต์

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่าจะกรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

### 3.3.2.2 การเตรียมฟิล์มแพลตินัม

การเตรียมชั้นฟิล์มแพลตินัมจะใช้เทคนิคการพิมพ์แบบสกรีน เตรียมฟิล์มขนาด  $0.5 \times 0.5$  ตารางเซนติเมตร โดยใช้บล็อกสกรีนเช่นเดียวกับชั้นฟิล์มไททาเนียมไดออกไซด์ แล้วสกรีนลงบนกระจกนำไฟฟ้า FTO ขนาด  $1.5 \times 2$  ตารางเซนติเมตร ซึ่งทำความสะอาดแล้ว จากนั้นนำไปให้ความร้อนที่อุณหภูมิประมาณ 90 องศาเซลเซียสเพื่อให้ชั้นฟิล์มที่สกรีนแห้งและนำไปเผาในเตาเผาตามการขึ้นของอุณหภูมิการเผาแบบขั้นบันไดดังรูปที่ 3.7 จะได้เป็นขั้วไฟฟ้าเคาน์เตอร์ สำหรับประดิวซ์เซลล์แสงอาทิตย์ชนิดสีย้อมไวแสงต่อไปดังรูปที่ 3.12

รูปที่ 3.12 ชั้นฟิล์มแพลตินัมบนกระจกนำไฟฟ้า FTO

### 3.3.3 การเตรียมสารละลายอิเล็กโทรไลต์

ในงานวิจัยนี้ใช้สารละลายอิเล็กโทรไลต์เป็นระบบไอโอดีด-ไตรไอโอดีด ( $I^-/I_3^-$ ) ในการเกิดปฏิกิริยารีดอกซ์เพื่อให้คืนอิเล็กตรอนกับสีย้อมไวแสง โดยเตรียมสารละลายจากไอโอดีดเข้มข้น 0.05 โมลต่อลิตร ลิเทียมไอโอดีด (LiI) เข้มข้น 0.5 โมลต่อลิตร สารละลายเตตระบิวทิลไพริดีน (4-tert-butylpyridine, TBP) เข้มข้น 0.5 โมลต่อลิตรและอิมิดาโซเลียมไอโอดีด (Imidazolium iodide) เข้มข้น 0.5 โมลต่อลิตร ในตัวทำละลายคือสารละลาย 3-เมทอกซีโพรพิโอนิไตรล์ (3-methoxypropionitrile) ผสมให้เข้าเป็นเนื้อเดียวกันจะได้สารละลายสีน้ำตาลเข้มดังรูปที่ 3.13

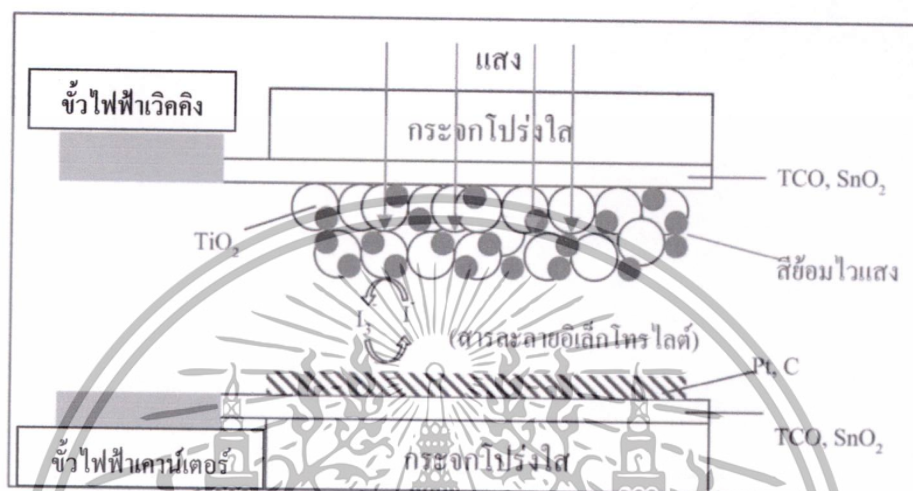


รูปที่ 3.13 สารละลายอิเล็กโทรไลต์ระบบไอโอดีด/ไตรไอโอดีด ( $I^-/I_3^-$ )

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

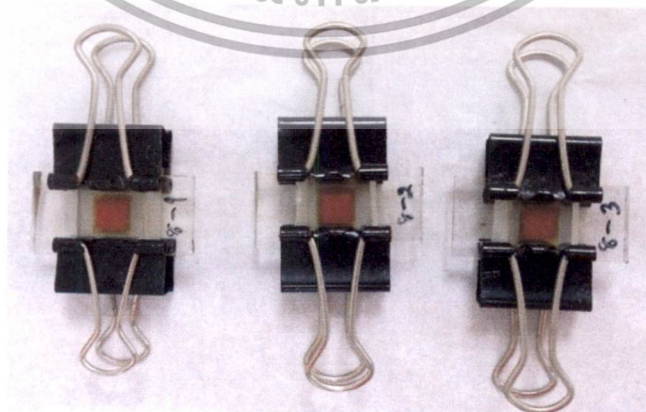
### 3.3.4 การประกอบเซลล์แสงอาทิตย์ชนิดสีย้อมไวแสง

เมื่อเตรียมส่วนประกอบของเซลล์แสงอาทิตย์ชนิดสีย้อมไวแสง คือ ขั้วไฟฟ้าเวดคิง ขั้วแคโทด และสารละลายอิเล็กโทรไลต์แล้ว จะเป็นขั้นตอนการประกอบเซลล์แสงอาทิตย์ซึ่งมีโครงสร้างดังรูป 3.14



รูปที่ 3.14 โครงสร้างการประกอบเซลล์แสงอาทิตย์ชนิดสีย้อมไวแสง [32]

การประกอบเซลล์แสงอาทิตย์ชนิดนี้เป็นกรนำขั้วไฟฟ้าเวดคิงมาประกบกับขั้วแคโทดที่เป็นแพททินัมโดยมีชั้นฟิล์มพลาสติกเป็นส่วนกัน (sealing) กระจกนำไฟฟ้าทั้งสองแผ่นซึ่งจะเว้นพื้นที่ในส่วนของขั้วไฟฟ้าไว้เท่านั้น โดยฟิล์มพลาสติกที่ใช้จะเป็นพาราฟิล์ม ส่วนตรงกลางเป็นชั้นของสารละลายอิเล็กโทรไลต์ซึ่งจะเติมเข้าไปหลังการประกบของขั้วทั้งสอง เซลล์แสงอาทิตย์ที่เตรียมได้จะมีขนาดพื้นที่ 0.25 ตารางเซนติเมตร (0.5 x 0.5 ตารางเซนติเมตร)

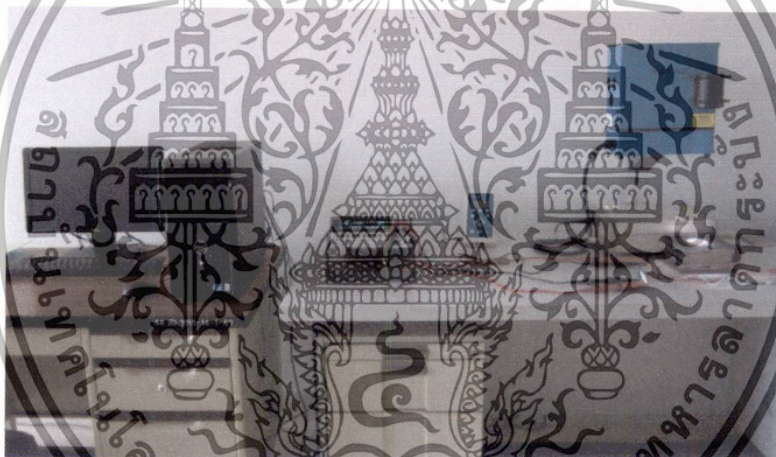


รูปที่ 3.15 เซลล์แสงอาทิตย์ชนิดสีย้อมไวแสงที่ประกอบแล้ว

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่าจะกรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ตัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

### 3.3.5 การสร้างเซลล์แสงอาทิตย์ชนิดสีย้อมไวแสง และการวัดประสิทธิภาพของเซลล์แสงอาทิตย์

สารละลายสีย้อมของสีย้อมไวแสงชนิดต่างๆ ที่สังเคราะห์ได้ จะนำมาใช้เป็นสีย้อมไวแสงสำหรับสร้างเซลล์แสงอาทิตย์ชนิดสีย้อมไวแสง โดยแช่ฟิล์มไททาเนียมไดออกไซด์ ซึ่งเตรียมโดยวิธีการพิมพ์แบบสกรีนจำนวน 5 ชั้น ลงในสีย้อมเป็นเวลา 24 ชั่วโมง และทำซ้ำทั้งหมด 3 เซลล์ แล้วนำขึ้นมาประกอบกับขั้วแพททินัม ตามขั้นตอนการประกอบ จากนั้นทำการวัดค่าประสิทธิภาพโดยเครื่องโซลาร์ซิมูเลเตอร์ (Solarsimulator Instrument) ของบริษัท SOLAR LIGHT ประเทศสหรัฐอเมริกาที่แหล่งกำเนิดแสงมาตรฐาน A.M. 1.5 ที่ความเข้มแสง 100 มิลลิวัตต์ต่อตารางเซนติเมตร ณ อุณหภูมิ 25 องศาเซลเซียส วัดค่ากระแสและแรงดันไฟฟ้าด้วย Keithley2400 electrometer



รูปที่ 3.16 เครื่องโซลาร์ซิมูเลเตอร์พร้อมระบบวัดกระแสและแรงดันไฟฟ้า

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่าจะกรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ตัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

## บทที่ 4

### ผลการทดลอง

ผลการทดลองในวิทยานิพนธ์นี้แบ่งเป็น 2 ส่วนหลัก ส่วนแรกเป็นงานวิจัยที่เกี่ยวข้องกับการออกแบบโครงสร้างโมเลกุลสีย้อมไวแสงโดยการคำนวณทางเคมีคอมพิวเตอร์ในกลุ่มอนุพันธ์ของไตรฟีนิลแอมมีน ซึ่งการคำนวณ แบ่งเป็น 2 หัวข้อ คือการปรับปรุงโครงสร้างของสีย้อมไวแสงโดยการปรับปรุงในส่วนของหมู่ให้อิเล็กตรอน และการปรับปรุงโครงสร้างของสีย้อมไวแสง โดยการปรับปรุงในส่วนของตัวส่งผ่านอิเล็กตรอนซึ่งผลการคำนวณทางเคมีคอมพิวเตอร์พบว่านิลีนเป็นหมู่ให้อิเล็กตรอนที่ดี แต่อย่างไรก็ตามยังส่งอิทธิพลต่อคุณสมบัติพื้นฐานของสีย้อมไวแสงไม่มากนักจากนั้นได้ทำการทดลองเพิ่มประสิทธิภาพของสีย้อมไวแสงโดยการศึกษาอิทธิพลของหมู่ส่งผ่านอิเล็กตรอน โดยพบว่าวงแหวนไทโอฟิน เป็นตัวส่งผ่านอิเล็กตรอนที่ส่งผลต่อคุณสมบัติพื้นฐานของสีย้อมไวแสงที่ค่อนข้างดี ในขณะที่วงแหวนเบนซีนไม่เหมาะสมในการนำมาใช้เป็นหมู่ส่งผ่านอิเล็กตรอนในสีย้อมไวแสงเนื่องจากส่งผลให้คุณสมบัติพื้นฐานของสีย้อมไวแสงด้อยลง

เมื่อทราบความสำคัญของส่วนประกอบในโครงสร้างสีย้อมไวแสงแล้ว จึงทำการคำนวณเพื่อทำนายคุณสมบัติพื้นฐานของสีย้อมไวแสงที่สามารถสังเคราะห์ได้จริง โดยทำการเปรียบเทียบในส่วนของหมู่ให้อิเล็กตรอนในหัวข้อที่ 4.1.1.2 พบว่าสีย้อมไวแสงที่มีหมู่ให้อิเล็กตรอนเป็นไดเมทิลอนิลีนนั้น สามารถนำมาใช้แทนหมู่ไตรฟีนิลแอมมีนได้ โดยไม่ทำให้คุณสมบัติพื้นฐานของสีย้อมไวแสงลดลงแต่อย่างใดโดยใช้หมู่ส่งผ่านอิเล็กตรอนซึ่งมีความเหมาะสมและส่งผลต่อคุณสมบัติพื้นฐานของสีย้อมไวแสงที่ดี ดังนั้นสีย้อมไวแสงที่คำนวณเพื่อการสังเคราะห์นั้นจึงประกอบไปด้วยหมู่ให้อิเล็กตรอนคือ ไดเมทิลอนิลีน หมู่ส่งผ่านอิเล็กตรอนคือหมู่ไทโอฟินโดยมีเฮยาโนอะคริลิกเป็นหมู่รับอิเล็กตรอน

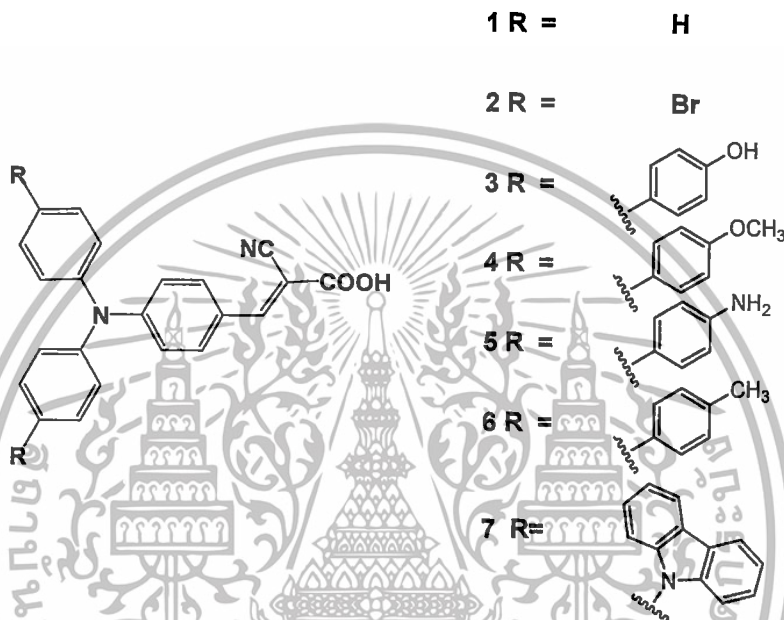
ส่วนที่สองเป็นการสังเคราะห์สีย้อมไวแสงที่ได้ผ่านการออกแบบและคำนวณทางเคมีคอมพิวเตอร์แล้ว สีที่สังเคราะห์เป็นกลุ่มอนุพันธ์ของไดเมทิลอนิลีนซึ่งมีหมู่ไทโอฟินเป็นตัวส่งผ่านอิเล็กตรอนให้กับโครงสร้างสีย้อมไวแสง จากนั้นตรวจสอบความถูกต้องของโครงสร้างที่สังเคราะห์ได้โดยทำการพิสูจน์เอกลักษณ์ด้วยเทคนิคยูวี-วิสิเบิล สเปกโตรสโคปี, นิวเคลียร์แมกเนติกเรโซแนนซ์. แมสสเปกโตรสโคปี และ อินฟราเรดสเปกโตรสโคปี จากนั้นนำไปประกอบเป็นเซลล์แสงอาทิตย์ชนิดสีย้อมไวแสงเพื่อศึกษาหาค่าประสิทธิภาพต่อไป

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่าจะกรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

## 4.1 การคำนวณทางเคมีคอมพิวเตอร์

### 4.1.1 การศึกษาอิทธิพลของหมู่ให้อิเล็กตรอนที่ส่งผลต่อการกระจายอิเล็กตรอนของหมู่ในกลุ่มอนุพันธ์ของไตรฟีนิล (Donor)

#### 4.1.1.1 การศึกษาอิทธิพลของวงแหวนอะโรมาติกที่มีหมู่ฟังก์ชันต่างกัน เมื่อใช้เป็นหมู่ให้อิเล็กตรอนของสีย้อมไวแสง



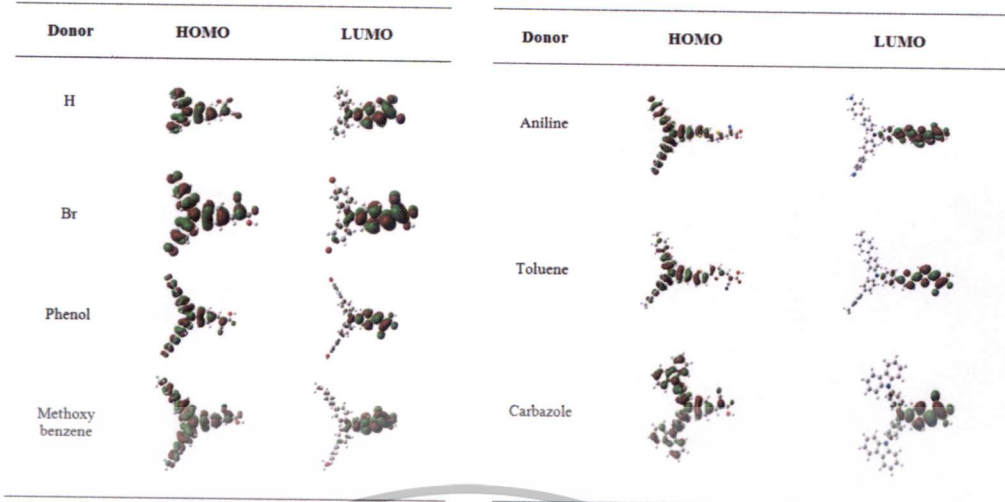
รูปที่ 4.1 โครงสร้างของสีย้อมไวแสงในกลุ่มอนุพันธ์ของไตรฟีนิล

ในการทดลองนี้เป็นการศึกษาการกระจายอิเล็กตรอนที่เปลี่ยนแปลงไปเมื่ออนุพันธ์ของไตรฟีนิลไซยาโนคริลิกเอซิด มีการแทนที่ตำแหน่งพารา โดยหมู่แทนที่ที่ศึกษาได้แก่ ไฮโดรเจน โบรมีน ฟีนอล เมทอกซีเบนซีน โทลูอีน อนิลีน และ คาบาร์โซล ดังแสดงในรูปที่ 4.1

#### 1) โครงสร้างทางอิเล็กทรอนิกส์ (The electron structure)

รูปที่ 4.2 แสดงความหนาแน่นของอิเล็กตรอนของโมเลกุลสีย้อมที่สถานะพื้นและสถานะเร้า โดยที่สถานะพื้นอิเล็กตรอนส่วนใหญ่จะรวมตัวอยู่ในส่วนของหมู่ให้อิเล็กตรอนและกลุ่มอนุพันธ์ของไตรฟีนิลและเมื่อโมเลกุลของสีย้อมไวแสงได้รับการกระตุ้นจากพลังงานแสงอาทิตย์ สีย้อมไวแสงจะถูกกระตุ้นจากสถานะพื้น (ground state) เข้าสู่สถานะเร้า (excited state) โดยอิเล็กตรอนจะเคลื่อนไปยังอีกด้านหนึ่งของโมเลกุลซึ่งเรียกว่าหมู่รับ ซึ่งหมู่รับทำหน้าที่ยึดเกาะอยู่กับไททานเนียมไดออกไซด์ เกิดการเคลื่อนที่ของอิเล็กตรอนเช่นนี้ เป็นลักษณะสำคัญ

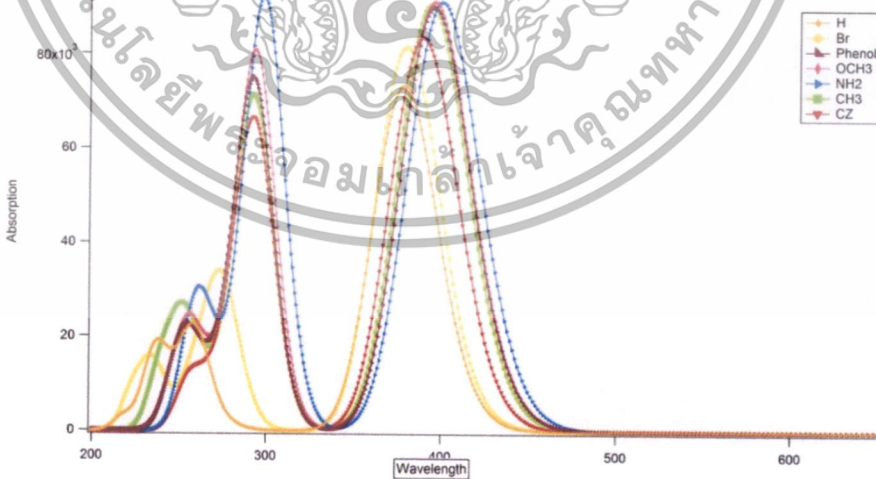
เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่าจะกรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้



รูปที่ 4.2 Frontier Molecular Orbital ของโมเลกุลสีย้อมไวแสงที่สภาวะพื้นและสภาวะเร้าของสีย้อมไวแสงในกลุ่มอนุพันธ์ของไตรฟีนิล

ของสีย้อมที่จะสามารถส่งอิเล็กตรอนไปยังแถบการนำไฟฟ้าของสารกึ่งตัวนำโลหะออกไซด์ และยังเป็นการปรากฏการณ์สำคัญที่ส่งผลต่อประสิทธิภาพของเซลล์แสงอาทิตย์ชนิดสีย้อมไวแสงอีกด้วย

2) ค่าการดูดกลืนพลังงานแสง



รูปที่ 4.3 ค่าการดูดกลืนแสงของสีย้อมไวแสงในกลุ่มอนุพันธ์ของไตรฟีนิล

จากรูปที่ 4.3 พบว่าเมื่อเพิ่มหมู่ให้อิเล็กตรอนเป็นหมู่อะโรมาติกที่มีหมู่ฟังก์ชันต่างกัน

ได้แก่ ฟีนอล เมทอกซีเบนซีน อนิลีน โทลูอิน และคาบารโซล จะทำให้สีย้อมไวแสงมีช่วงการดูดกลืนเป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่นิยมนำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่าจะกรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

ดูดกลืนแสงในช่วงความยาวคลื่นที่มากขึ้นเล็กน้อยทำให้ความสามารถในการดูดกลืนแสงดีขึ้น และในงานวิจัยนี้พบว่าอนิลินเป็นหมู่ให้อิเล็กตรอนที่ให้ค่าการดูดกลืนแสงมีค่ามากที่สุด โดยให้ค่าการดูดกลืนแสงสูงสุด ( $\lambda_{\max}$ ) ที่ความยาวคลื่น 399 นาโนเมตร อีกทั้งยังมีค่าแถบพลังงานต้องห้าม ( $E_{\text{gap}}$ ) ต่ำที่สุดที่ 2.88 อิเล็กตรอนโวลต์ จึงใช้พลังงานในการกระตุ้นน้อยที่สุดในการกระตุ้นอิเล็กตรอนในสีย้อมไวแสง

**ตารางที่ 4.1** ค่าพลังงานกระตุ้น (Excitation energy) ค่าความแรงออสซิลเลเตอร์ (oscillator strengths,  $f$ ) และการทรานซิชันที่ได้จากการคำนวณด้วยระเบียบวิธี TDDFT-B3LYP/6-31G (d,p)

Functional group of aromatic donor	$E_{\text{gap}}$ (eV)	$\lambda_{\max}$ (nm)	$f$	Main contribution
H	3.28	378	1.0130	0.91 (H→L)
Br	3.27	379	1.1268	0.91 (H→L)
OH	3.14	395	1.2431	0.84 (H→L)
OCH <sub>3</sub>	3.14	395	1.2589	0.83 (H→L)
NH <sub>2</sub>	3.10	399	1.2579	0.75 (H→L)
CH <sub>3</sub>	3.15	393	1.2506	0.87 (H→L)
CZ	3.19	388	1.1557	0.71 (H→L)

### 3) ความหนาแน่นสถานะ (Density of state)

จากผลการคำนวณการกระจายตัวของอิเล็กตรอนที่สภาวะพื้นและสภาวะเร้าพบว่า สีย้อมทุกโครงสร้าง มีแนวโน้มการเคลื่อนที่ของอิเล็กตรอนไปในแนวทางเดียวกันหมด นั่นก็คือมีการเคลื่อนที่จากบริเวณส่วนที่เป็นหมู่ให้อิเล็กตรอนไปยังส่วนของหมู่รับอิเล็กตรอนโดยโครงสร้างของโมเลกุลสีย้อมไวแสงที่มีหมู่ให้อิเล็กตรอนเป็นอนิลินและคาบารโซลอิเล็กตรอนจะมีแนวโน้มการเคลื่อนที่มายังบริเวณหมู่รับอิเล็กตรอนมากที่สุด คือความแตกต่างระหว่าง HOMO (Highest Occupied Molecular Orbital) และ LUMO (Lowest Unoccupied Molecular Orbital) เท่ากับ 53 เฟอร์เซ็นต์ และ 56 เฟอร์เซ็นต์ ตามลำดับ และในส่วนของหมู่ให้อิเล็กตรอนมีการเปลี่ยนแปลงของอิเล็กตรอนมากที่สุดเช่นกัน คือ มีการเปลี่ยนแปลงอิเล็กตรอนเท่ากับ 33 เฟอร์เซ็นต์ และ 56 เฟอร์เซ็นต์ ตามลำดับดังนั้นจึงสรุปได้ว่าอนิลินและ

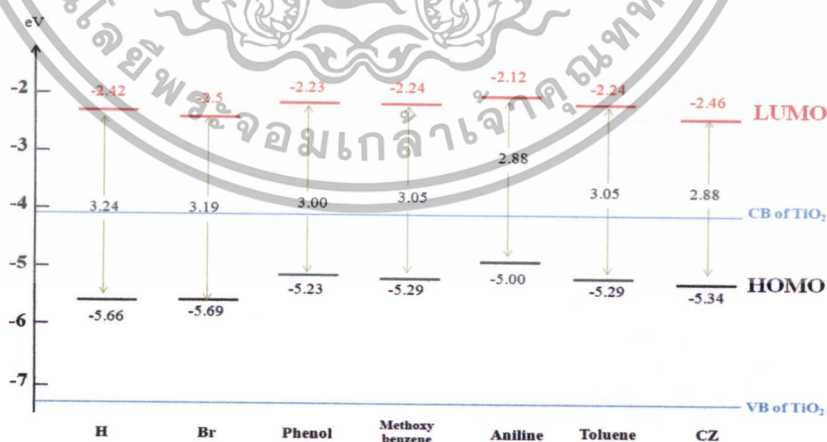
เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่าจะกรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

คาบารโซลเป็นหมู่ให้อิเล็กตรอนที่สามารถส่งผ่านอิเล็กตรอนไปสู่โลหะไททาเนียมไดออกไซด์ได้มากที่สุด

ตารางที่ 4.2 ตารางแสดงเปอร์เซ็นต์ความหนาแน่นของอิเล็กตรอนแต่ละส่วนของโมเลกุลสีย้อมไวแสงในกลุ่มอนุพันธ์ของไตรฟีนิล

Functional group of aromatic donor	State	Donor	Triphenyl	Linker	Acceptor
H	HOMO	-	89	-	11
	LUMO	-	37	-	63
Br	HOMO	6	83	-	12
	LUMO	0	40	-	60
OH	HOMO	19	72	-	9
	LUMO	1	39	-	60
OCH <sub>3</sub>	HOMO	12	78	-	10
	LUMO	1	39	-	60
NH <sub>2</sub>	HOMO	34	59	-	7
	LUMO	1	39	-	60
CH <sub>3</sub>	HOMO	12	78	-	10
	LUMO	1	39	-	60
CZ	HOMO	56	40	-	4
	LUMO	0	39	-	60

4) แถบพลังงานต้องห้าม



รูปที่ 4.4 แถบพลังงานต้องห้ามของสีย้อมไวแสงในกลุ่มอนุพันธ์ของไตรฟีนิล

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้าไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

จากความแตกต่างระหว่างระดับพลังงาน HOMO และ LUMO แสดงให้เห็นแถบพลังงานต้องห้าม ซึ่งเป็นค่าพลังงานที่ใช้ในการกระตุ้นอิเล็กตรอนจากสถานะพื้นขึ้นไปสู่สถานะเร้า ซึ่งจากกราฟ พบว่าเมื่อโมเลกุลที่มีอนิลินและคาบารโซลเป็นหมู่ให้อิเล็กตรอนจะทำให้ค่าพลังงานที่ใช้ในการกระตุ้นอิเล็กตรอนขึ้นไปสู่สถานะเร้ามีค่าน้อยที่สุด คือ 2.88 อิเล็กตรอนโวลต์ จึงเป็นเหตุผลอีกข้อหนึ่งที่ทำให้สามารถทำนายได้ว่าอนิลินและคาบารโซลเป็นหนึ่งในหมู่ให้อิเล็กตรอนที่เหมาะสมในการสังเคราะห์สีย้อมไวแสง

หลังจากการศึกษาอิทธิพลของหมู่ให้อิเล็กตรอนในหัวข้อที่ผ่านมาแล้ว จึงนำข้อมูลที่ได้จากการทดลองข้างต้นมาศึกษาอิทธิพลของตัวส่งผ่านอิเล็กตรอนระบบพายคอนจูเกต ( $\pi$ -conjugate) โดยใช้หมู่ให้อิเล็กตรอนเป็นอนิลิน

#### 4.1.1.2 การศึกษาอิทธิพลของหมู่ให้อิเล็กตรอนในกลุ่มของไดฟีนิลอนิลินและไดเมทิลอนิลิน

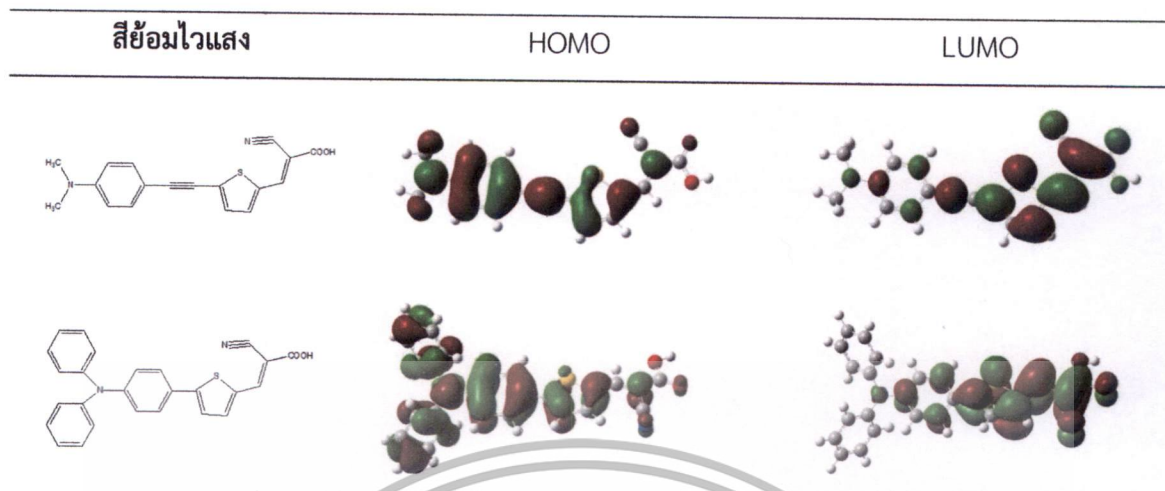


รูปที่ 4.5 โครงสร้างของสีย้อมไวแสงในกลุ่มของไดฟีนิลอนิลินและไดเมทิลอนิลินที่ใช้ศึกษาอิทธิพลของหมู่ให้อิเล็กตรอน

#### 1) โครงสร้างทางอิเล็กทรอนิกส์ (The electron structure)

รูปที่ 4.6 แสดงความหนาแน่นของอิเล็กตรอนของโมเลกุลสีย้อมที่สถานะพื้นและสถานะเร้า โดยที่สถานะพื้นอิเล็กตรอนส่วนใหญ่จะรวมตัวอยู่ในส่วนของหมู่ให้อิเล็กตรอนนั่นคือไดฟีนิลอนิลินและไดเมทิลอนิลิน และเมื่อโมเลกุลได้รับพลังงาน อิเล็กตรอนจะถูกกระตุ้นจากสถานะพื้นไปสู่สถานะเร้า โดยอิเล็กตรอนจะเคลื่อนที่ไปยังหมู่รับอิเล็กตรอนซึ่งอยู่อีกด้านหนึ่งของโมเลกุลซึ่งทำหน้าที่ยึดติดกับฟิล์มบางของสารกึ่งตัวนำโลหะออกไซด์ไททาเนียมไดออกไซด์

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่าจะกรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ตัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้



รูปที่ 4.6 Frontier Molecular Orbital ของโมเลกุลในกลุ่มของไดฟีนิลอนิซีนและไดเมทิลอนิซีน

## 2) ค่าการดูดกลืนพลังงานแสง



รูปที่ 4.7 ค่าการดูดกลืนแสงของสีย้อมไวแสงที่ใช้ศึกษาอิทธิพลของหมู่ให้อิเล็กตรอนในกลุ่มของไดฟีนิลอนิซีนและไดเมทิลอนิซีน

จากรูปที่ 4.7 พบว่าเมื่อสีย้อมทั้งสองโมเลกุลมีตัวส่งผ่านอิเล็กตรอนที่เหมือนกันคือไทโอฟีนแต่ในส่วนของหมู่ให้อิเล็กตรอนต่างกันนั้น ค่าการดูดกลืนแสงของสีย้อมที่มีหมู่ให้อิเล็กตรอนเป็นไดเมทิลอนิซีนมีช่วงการดูดกลืนแสงในช่วงความยาวคลื่นที่มากกว่าไดฟีนิลอนิซีน ทั้งนี้เนื่องมาจากพันธะพายคอนจูเกตที่ยาวกว่า

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่าจะกรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ตัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

ตารางที่ 4.3 ค่าพลังงานกระตุ้น (Excitation energy) ค่าความแรงออสซิลเลเตอร์ (oscillator strengths,  $f$ ) และการทรานซิชันที่ได้จากการคำนวณด้วยระเบียบวิธี TDDFT-B3LYP/6-31G (d,p)

สีย้อมไวแสง	พลังงานกระตุ้น (eV)	$\lambda_{\max}$ (nm)	$f$	Main contribution
โดเมทิลอนิลีน	2.63	453	1.4750	0.86 (H→L)
ไดฟีนิลอนิลีน	2.65	431	1.4077	0.80 (H→L)

### 3) ความหนาแน่นสถานะ (Density of state)

ตารางที่ 4.4 เปอร์เซ็นต์ความหนาแน่นของออร์บิทัลของแต่ละส่วนของโมเลกุลในกลุ่มของไดฟีนิลอนิลีนและโดเมทิลอนิลีน

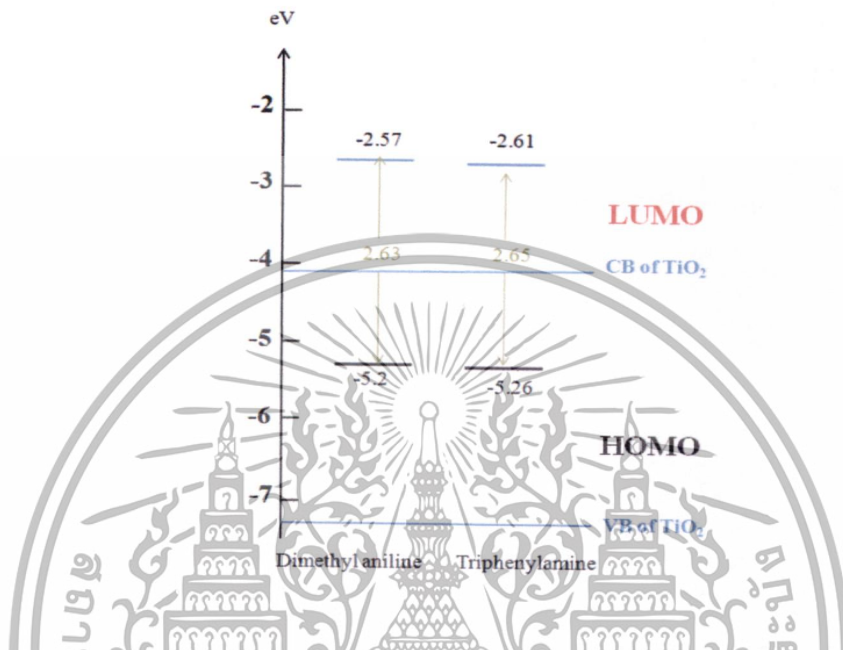
สีย้อมไวแสง	State	Donor	Linker	Acceptor
โดเมทิลอนิลีน	HOMO	58	32	10
	LUMO	9	46	46
ไดฟีนิลอนิลีน	HOMO	81	12	7
	LUMO	14	37	50

จากผลการคำนวณการกระจายตัวของออร์บิทัลที่สภาวะพื้นและสภาวะเร้าพบว่า สีย้อมทั้งสองโครงสร้าง มีแนวโน้มการเคลื่อนที่ของออร์บิทัลไปในแนวทางเดียวกัน นั่นก็คือมีการเคลื่อนที่จากบริเวณส่วนที่เป็น หมู่ให้อิเล็กตรอนไปยังส่วนของหมู่รับอิเล็กตรอนโดยพบว่าโครงสร้างของโมเลกุลสีย้อมไวแสงที่มีหมู่ให้อิเล็กตรอนเป็นไดฟีนิลอนิลีนมีการเปลี่ยนแปลงความหนาแน่นของออร์บิทัลมากกว่าทั้งบริเวณ หมู่ให้อิเล็กตรอนมีการเปลี่ยนแปลงที่ 67 เปอร์เซ็นต์ และหมู่รับอิเล็กตรอนมีการเปลี่ยนแปลงที่ 43 เปอร์เซ็นต์ ส่วนโมเลกุลสีย้อมไวแสงที่มีหมู่ให้อิเล็กตรอนเป็นโดเมทิลอนิลีน มีการเปลี่ยนแปลงความหนาแน่นออร์บิทัลน้อยกว่าคือที่บริเวณหมู่ให้อิเล็กตรอนมีการเปลี่ยนแปลง 49 เปอร์เซ็นต์ และบริเวณหมู่รับอิเล็กตรอนมีการเปลี่ยนแปลง 36 เปอร์เซ็นต์ ถึงแม้ว่าการเคลื่อนที่ของออร์บิทัลในโมเลกุลสีย้อมไวแสงที่มีหมู่ให้อิเล็กตรอนเป็นไดฟีนิลอนิลีนนั้น จะมีความเหมาะสมมากกว่า แต่อย่างไรก็ตามสีย้อมไวแสงโมเลกุลนี้ มีค่าการดูดกลืนแสงในช่วงที่น้อยกว่า ทำให้ไม่สามารถบอกประสิทธิภาพของสี

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ตัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

ย้อมทั้งสองโมเลกุลนี้ได้เป็นอย่างดี แต่โมเลกุลสีย้อมไวแสงทั้งสอง สามารถใช้เป็นสีย้อมไวแสงในเซลล์แสงอาทิตย์ชนิดสีย้อมไวแสงได้

#### 4) แถบพลังงานต้องห้าม



รูปที่ 4.8 แถบพลังงานต้องห้ามของโมเลกุลในกลุ่มของไดฟีนีลอะมีนและไตรเมทิลอะมีน

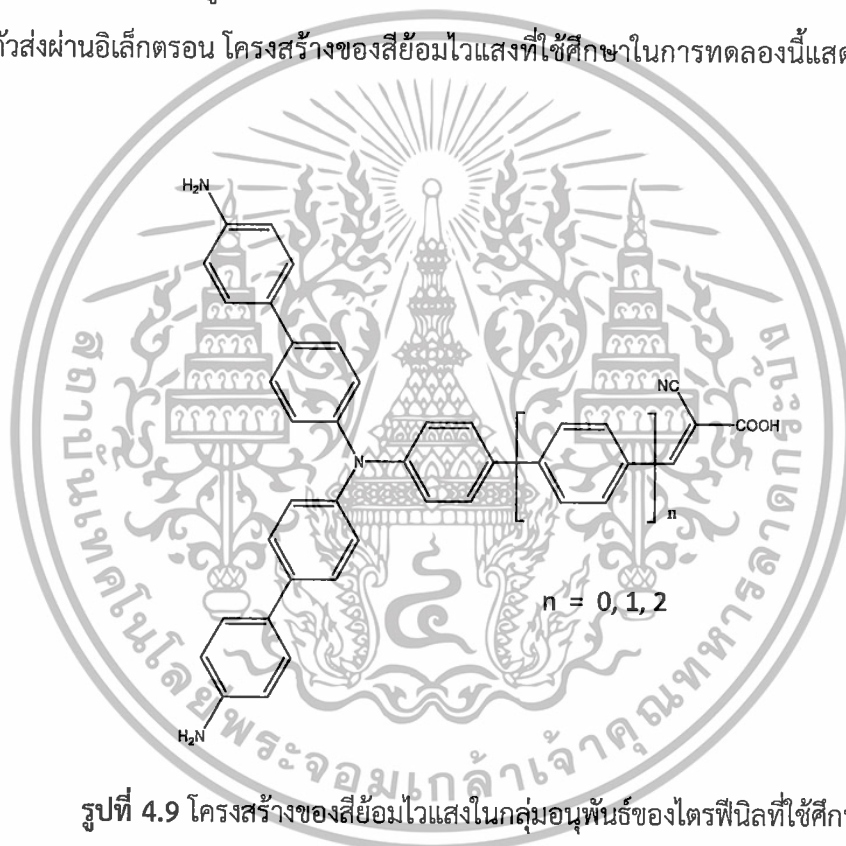
จากความแตกต่างระหว่างระดับพลังงาน HOMO และ LUMO แสดงให้เห็น แถบพลังงานต้องห้าม ซึ่งเป็นค่าพลังงานที่ใช้ในการกระตุ้นอิเล็กตรอนจากสถานะพื้นขึ้นไปสู่สถานะเร้า ซึ่งจากกราฟ พบว่าโครงสร้างของโมเลกุลสีย้อมไวแสงทั้งสองโมเลกุลมีค่าพลังงานที่ใช้ในการกระตุ้นอิเล็กตรอนขึ้นไปสู่สถานะเร้า มีค่าไม่ต่างกันมากนัก โดยโมเลกุลสีย้อมไวแสงที่มี หมู่ให้อิเล็กตรอนเป็นไตรเมทิลอะมีน มีค่าพลังงานที่ใช้ในการกระตุ้นน้อยกว่าจากการดูดกลืนแสง การกระจายตัวของอิเล็กตรอน และค่าพลังงานที่ใช้ในการกระตุ้นของสีย้อมไวแสงทั้งสองชนิด สามารถทำนายได้คร่าวๆ ว่า โมเลกุลสีย้อมไวแสงที่มีหมู่ให้อิเล็กตรอนเป็นไตรเมทิลอะมีนมีความเหมาะสมที่จะใช้เป็นสีย้อมไวแสงในเซลล์แสงอาทิตย์ชนิดสีย้อมไวแสงมากกว่า เนื่องจากค่าการดูดกลืนแสงในช่วงความยาวคลื่นที่มากกว่า และค่าพลังงานที่ใช้ในการกระตุ้นมีค่าน้อยกว่า อีกทั้งยังมีการเคลื่อนที่ของอิเล็กตรอนในลักษณะที่เหมาะสมคือจากหมู่ให้อิเล็กตรอนไปยังบริเวณหมู่รับอิเล็กตรอนอีกด้วย

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้าไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ตัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

#### 4.1.2 การศึกษาอิทธิพลของตัวส่งผ่านอิเล็กตรอนที่ส่งผลต่อการกระจายอิเล็กตรอน ในกลุ่มอนุพันธ์ของไตรฟีนิล (Linker)

##### 4.1.2.1 การศึกษาอิทธิพลของจำนวนวงแหวนเบนซีนเมื่อใช้เป็นตัวส่งผ่านอิเล็กตรอน ในกลุ่มอนุพันธ์ของไตรฟีนิล

จากการทดลองตอนที่ 4.1.1 เมื่อทราบหมู่ให้อิเล็กตรอนที่มีความเหมาะสมมากที่สุดในสีย้อมไวแสง นั่นก็คืออนิลิน การทดลองในตอนนี้จึงได้เลือกใช้สีย้อมไวแสงในกลุ่มอนุพันธ์ของไตรฟีนิลที่มีอนิลินเป็นหมู่ให้อิเล็กตรอน มาใช้ในการศึกษาอิทธิพลของวงแหวนเบนซีนเมื่อใช้เป็นตัวส่งผ่านอิเล็กตรอน โครงสร้างของสีย้อมไวแสงที่ใช้ศึกษาในการทดลองนี้แสดงในรูปที่ 4.9



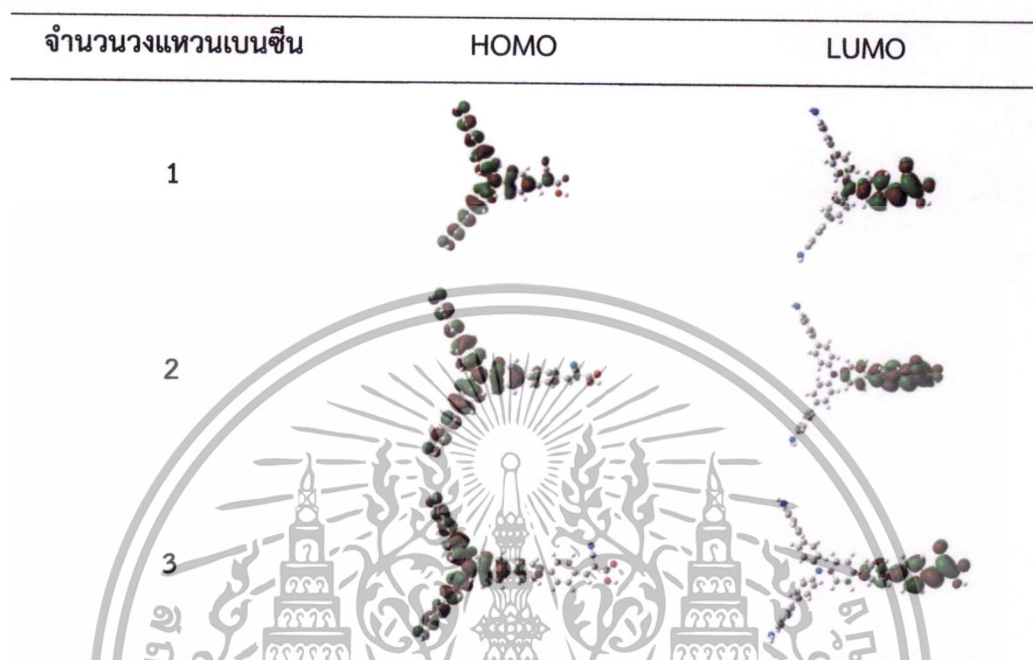
รูปที่ 4.9 โครงสร้างของสีย้อมไวแสงในกลุ่มอนุพันธ์ของไตรฟีนิลที่ใช้ศึกษาอิทธิพลของหมู่ส่งผ่านอิเล็กตรอน

#### 1) โครงสร้างทางอิเล็กตรอนิกส์ (The electron structure)

รูปที่ 4.10 แสดงความหนาแน่นของอิเล็กตรอนของโมเลกุลสีย้อมที่สภาวะพื้นและสภาวะเร้า โดยที่สภาวะพื้นอิเล็กตรอนส่วนใหญ่จะรวมตัวอยู่ในส่วนของหมู่ให้อิเล็กตรอนอนิลิน และกลุ่มอนุพันธ์ของไตรฟีนิลและเมื่อโมเลกุลของสีย้อมไวแสงได้รับการกระตุ้นอิเล็กตรอนจะเคลื่อนที่จากสภาวะพื้นไปสู่สภาวะเร้า โดยอิเล็กตรอนจะเคลื่อนไปยังอีกด้านหนึ่งของโมเลกุลซึ่งเรียกว่าหมู่รับอิเล็กตรอนเกิดการเคลื่อนที่ของอิเล็กตรอนเช่นนี้ เป็น

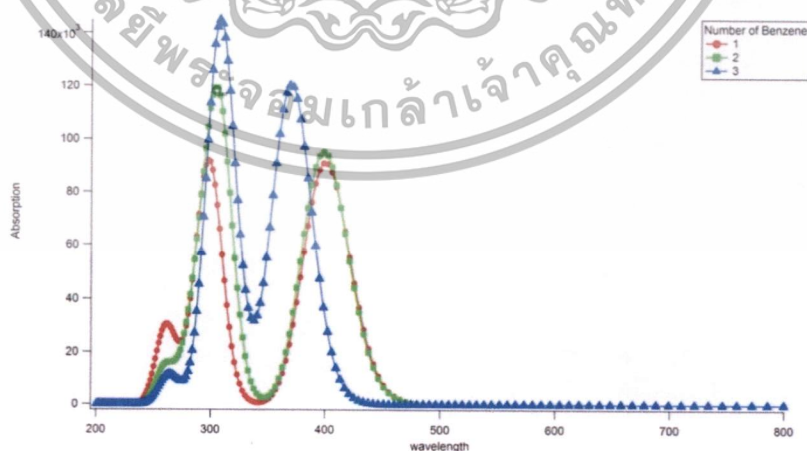
เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่าจะกรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ตัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

ลักษณะสำคัญของสีย้อมที่จะสามารถส่งอิเล็กตรอนไปยังแถบการนำไฟฟ้าของสารกึ่งตัวนำโลหะออกไซด์ และยังเป็นปรากฏการณ์สำคัญที่ส่งผลต่อประสิทธิภาพของเซลล์แสงอาทิตย์ชนิดสีย้อมไวแสง



รูปที่ 4.10. Frontier Molecular Orbital ของโมเลกุลสีย้อมไวแสงที่สถานะพื้นและสถานะเร้าของสีย้อมไวแสงในกลุ่มอนุพันธ์ของไตรฟีนิลที่มีวงแหวนเบนซีนเป็นตัวส่งผ่านอิเล็กตรอน

## 2) ค่าการดูดกลืนพลังงานแสง



รูปที่ 4.11 ค่าการดูดกลืนแสงของสีย้อมไวแสงในกลุ่มอนุพันธ์ของไตรฟีนิลที่มีวงแหวนเบนซีนเป็นตัวส่งผ่านอิเล็กตรอน

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่าจะกรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ตัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

จากรูปที่ 4.11 เมื่อสีย้อมไวแสงมีตัวส่งผ่านอิเล็กทรอนิกส์เป็นวงแหวนเบนซีน เมื่อเพิ่มวงแหวนเบนซีน 1 หมู่ในส่วนหมู่ส่งผ่านอิเล็กทรอนิกส์ ส่งผลให้กราฟค่าการดูดกลืนแสง ดูดกลืนในช่วงความยาวคลื่นลดลงเล็กน้อยคือจาก  $\lambda_{\max} = 399$  นาโนเมตร เป็น 398 นาโนเมตร และเมื่อเพิ่มวงแหวนเบนซีนเป็น 2 หมู่ พบว่าสีย้อมมีความเข้มในการดูดกลืนแสงมากขึ้นในขณะที่มีช่วงความยาวคลื่นในการดูดกลืนแสงลดลงค่อนข้างมากที่  $\lambda_{\max} = 369$  นาโนเมตร จึงมีแนวโน้มส่งผลให้ประสิทธิภาพของเซลล์แสงอาทิตย์ลดลง วงแหวนเบนซีนจำนวนมากกว่า 1 หมู่ นั้น จึงไม่เหมาะสมเป็นตัวส่งผ่านอิเล็กทรอนิกส์ในโครงสร้างสีย้อมไวแสง เนื่องจากการวางตัวของวงแหวนเบนซีนแต่ละวงนั้น บิดตัวในแนวต่างระนาบกัน ทำให้การเคลื่อนที่ของอิเล็กตรอนภายในโครงสร้างสีย้อมไวแสงไปยังบริเวณหมู่รับเกิดได้ไม่ดีการวางตัวของวงแหวนเบนซีนแสดงดังรูปที่ 4.12



รูปที่ 4.12 โครงสร้างของสีย้อมไวแสงแสดงการวางตัวของวงแหวนเบนซีน

ตารางที่ 4.5 ค่าพลังงานกระตุ้น (Excitation energy) ค่าความแรงออสซิลเลเตอร์ (oscillator strengths,  $f$ ) และการทรานซิชันที่ได้จากการคำนวณด้วยระเบียบวิธี TDDFT-B3LYP/6-31G (d,p)

จำนวนวงแหวนเบนซีน	พลังงานกระตุ้น (eV)	$\lambda_{\max}$ (nm)	$f$	Main contribution
1	3.10	399	1.2579	0.75 (H --> L)
2	3.11	398	1.3148	0.70 (H --> L)
3	3.36	369	1.6628	0.51 (H --> L)

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่าจะกรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ตัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

### 3) ความหนาแน่นสถานะ (Density of state)

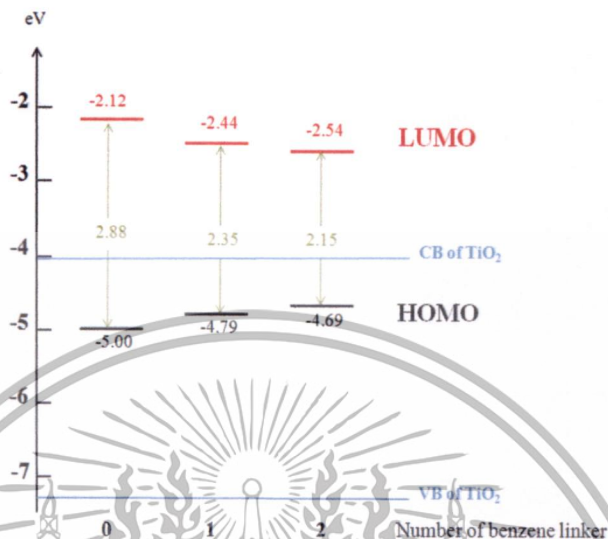
จากผลการคำนวณการกระจายตัวของอิเล็กตรอนที่สภาวะพื้นและสภาวะเร้าพบว่า สีย้อมทั้งสามโครงสร้าง มีแนวโน้มการเคลื่อนที่ของอิเล็กตรอนไปในแนวทางเดียวกัน นั่นก็คือมีการเคลื่อนที่จากบริเวณส่วนที่เป็น หมู่ให้อิเล็กตรอน (อนิลีน) ผ่านตัวส่งผ่านอิเล็กตรอน (เบนซีน) ไปยังส่วนของหมู่รับอิเล็กตรอนโดยพบว่าโครงสร้างของโมเลกุลสีย้อมไวแสงที่มีจำนวนวงแหวนเบนซีนเป็นหมู่ส่งผ่านอิเล็กตรอนเพิ่มขึ้น จะส่งผลให้อิเล็กตรอนมีการเคลื่อนที่ของมายังบริเวณหมู่รับอิเล็กตรอนมีค่ามากขึ้นเล็กน้อย นั่นคือ เมื่อมีเบนซีน 1, 2 และ 3 หมู่ การเปลี่ยนแปลงความหนาแน่นของอิเล็กตรอนที่บริเวณหมู่รับอิเล็กตรอนมีค่าการเปลี่ยนแปลงที่ 53, 58 และ 59 เปอร์เซ็นต์ตามลำดับซึ่งส่งผลดีต่อค่าประสิทธิภาพของสีย้อมไวแสง

ตารางที่ 4.6 เปอร์เซ็นต์ความหนาแน่นของอิเล็กตรอนแต่ละส่วนของโมเลกุลสีย้อมไวแสงในกลุ่มอนุพันธ์ของไตรฟีนิล

จำนวนวงแหวนเบนซีน	State	Donor	Triphenyl	Linker	Acceptor
1	HOMO	34	59	-	7
	LUMO	1	39	-	60
2	HOMO	28	68	3	1
	LUMO	0	9	32	59
3	HOMO	25	70	4	0
	LUMO	0	2	40	59

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่าจะกรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ตัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

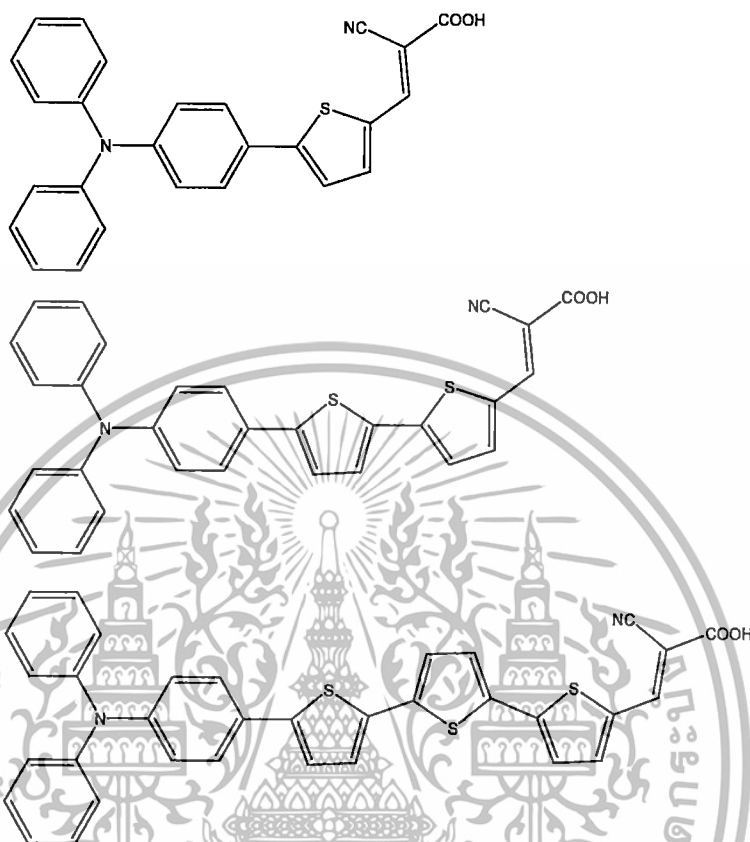
## 4) แถบพลังงานต้องห้าม



รูปที่ 4.13 แถบพลังงานต้องห้ามของสีย้อมไวแสงในกลุ่มอนุพันธ์ของไตรฟีนิล

จากรูปที่ 4.13 ความแตกต่างระหว่างระดับพลังงาน HOMO และ LUMO แสดงให้เห็น แถบพลังงานต้องห้าม ซึ่งเป็นค่าพลังงานที่ใช้ในการกระตุ้นอิเล็กตรอนจากสถานะพื้นขึ้นไปสู่สถานะเร้า พบว่าเมื่อสีย้อมมีความยาวของวงแหวนเบนซีนเพิ่มขึ้น จะทำให้ค่าพลังงานที่ใช้ในการกระตุ้นอิเล็กตรอนขึ้นไปสู่สถานะเร้ามีค่าน้อยลง แต่เนื่องด้วยการเคลื่อนที่ของอิเล็กตรอนไปยังหมู่รับ มีแนวโน้มเพิ่มขึ้นเพียงเล็กน้อยประกอบกับค่าการดูดกลืนแสงของสีย้อม ดูดกลืนแสงในช่วงที่มีความยาวคลื่นมีค่าน้อยลงมาก จึงสามารถสรุปได้ว่าสีย้อมที่มี ตัวส่งผ่านอิเล็กตรอนเป็นวงแหวนเบนซีนนั้น ไม่สามารถส่งผลให้ค่าประสิทธิภาพของสีย้อมไวแสงเพิ่มขึ้นอย่างชัดเจน

#### 4.1.2.2 การศึกษาอิทธิพลของจำนวนหมู่ไทโอพีนเมื่อใช้เป็นตัวส่งผ่านอิเล็กตรอน ในกลุ่มอนุพันธ์ของไตรฟีนิล


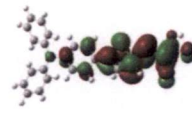






รูปที่ 4.14 โครงสร้างของสีย้อมไวแสงที่ใช้ศึกษาอิทธิพลของจำนวนหมู่ไทโอพีนเมื่อใช้เป็นตัวส่งผ่านอิเล็กตรอน ในกลุ่มอนุพันธ์ของไตรฟีนิล

##### 1) โครงสร้างทางอิเล็กทรอนิกส์ (The electron structure)

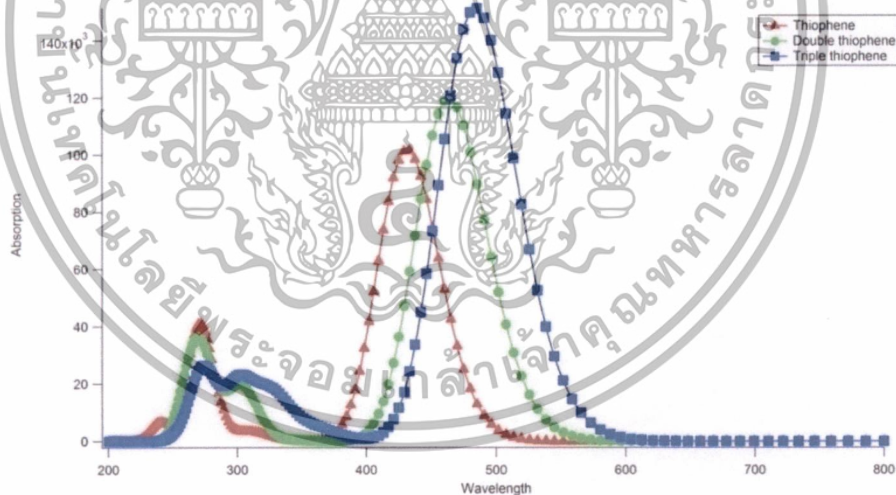
รูปที่ 4.15 แสดงความหนาแน่นของอิเล็กตรอนของโมเลกุลสีย้อมที่สภาวะพื้นและสภาวะเร้า โดยที่สภาวะพื้นอิเล็กตรอนส่วนใหญ่จะรวมตัวอยู่ในส่วนของ หมู่ไตรฟีนิลและเมื่อโมเลกุลของสีย้อมไวแสงได้รับการกระตุ้น อิเล็กตรอนจะเคลื่อนที่จากสภาวะพื้นไปสู่สภาวะเร้า โดยอิเล็กตรอนจะเคลื่อนที่ผ่านหมู่ไทโอพีนซึ่งเป็นตัวส่งผ่านอิเล็กตรอน ไปยังอีกด้านหนึ่งของโมเลกุลซึ่งเรียกว่าหมู่รับอิเล็กตรอนเกิดการเคลื่อนที่ของอิเล็กตรอนเช่นนี้ เป็นลักษณะสำคัญของสีย้อมที่จะสามารถส่งอิเล็กตรอนไปยังแถบการนำไฟฟ้าของสารกึ่งตัวนำโลหะออกไซด์ และยังเป็นปรากฏการณ์สำคัญที่ส่งผลต่อประสิทธิภาพของเซลล์แสงอาทิตย์ชนิดสีย้อมไวแสง

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่าจะกรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ตัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

จำนวนหมู่ไทโอฟิน	HOMO	LUMO
1		
2		
3		

รูปที่ 4.15 Frontier Molecular Orbital ของโมเลกุลสีย้อมไวแสงที่สภาวะพื้นและสภาวะเร้าของสีย้อมไวแสงในกลุ่มอนุพันธ์ของไตรฟินิลที่มีหมู่ไทโอฟินเป็นตัวส่งผ่านอิเล็กตรอน

## 2) ค่าการดูดกลืนพลังงานแสง

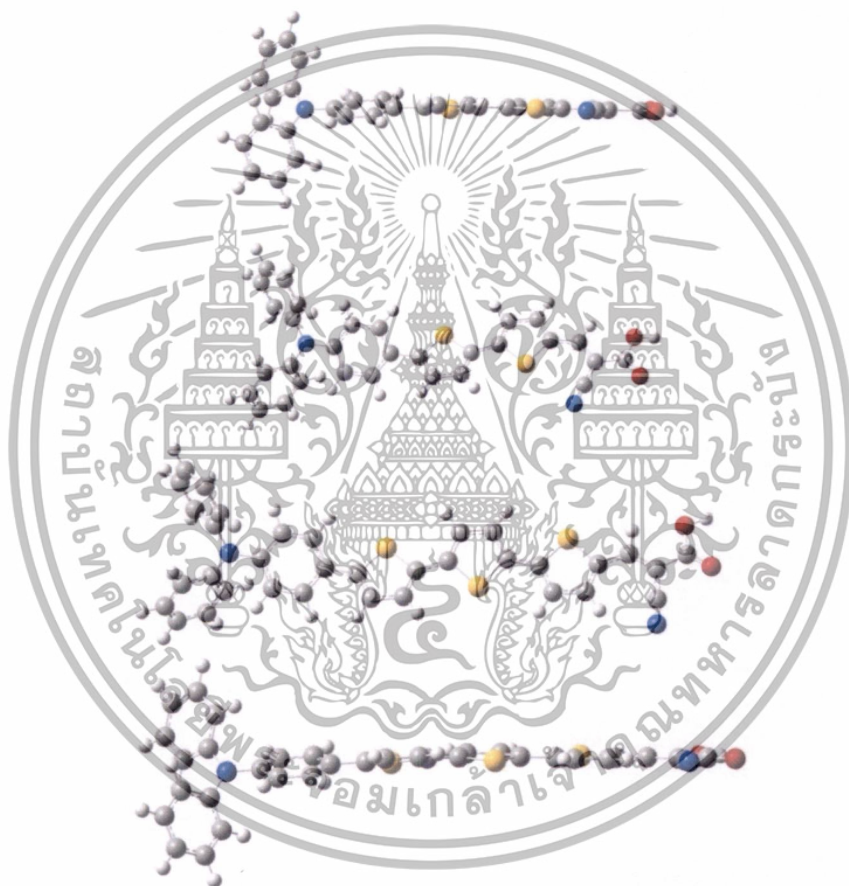


รูปที่ 4.16 ค่าการดูดกลืนแสงของสีย้อมไวแสงในกลุ่มอนุพันธ์ของไตรฟินิลที่ใช้ศึกษาอิทธิพลของการเพิ่มหมู่ไทโอฟินเป็นตัวส่งผ่านอิเล็กตรอน

จากรูปที่ 4.16 เมื่อสีย้อมไวแสงมีตัวส่งผ่านอิเล็กตรอนเป็นหมู่ไทโอฟิน การเพิ่มขึ้นของจำนวนหมู่ไทโอฟิน ส่งผลให้กราฟค่าการดูดกลืนแสง ดูดกลืนในช่วงความยาวคลื่นมากขึ้นอย่างมาก โดยเมื่อเพิ่มวงแหวนไทโอฟิน 1 หมู่, 2 หมู่ และ 3 หมู่ ในส่วนหมู่ส่งผ่านอิเล็กตรอน

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ตัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

เนื่องจากการวางตัวของวงแหวนไทโอพีนแต่ละวงนั้น บิดตัวในแนวระนาบเดียวกัน ทำให้การเคลื่อนที่ของอิเล็กตรอนภายในโครงสร้างสีย้อมไวแสงเกิดได้ดีขึ้น มีโครงสร้างที่เสถียรขึ้น จึงทำให้พลังงานภายในโครงสร้างต่ำลงและมีความยาวคลื่นในการดูดกลืนพลังงานมากขึ้นการวางตัวของวงแหวนไทโอพีนแสดงดังรูปที่ 4.17



รูปที่ 4.17 การวางตัวของวงแหวนไทโอพีนในโครงสร้างสีย้อมไวแสง

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ตัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

ตารางที่ 4.7 ค่าพลังงานกระตุ้น (Excitation energy) ค่าความแรงออสซิลเลเตอร์ (oscillator strengths,  $f$ ) และการทรานซิชันที่ได้จากการคำนวณด้วยระเบียบวิธี TDDFT-B3LYP/6-31G (d,p)

จำนวนหมู่ไทโอเฟน	พลังงานกระตุ้น (eV)	$\lambda_{\max}$ (nm)	$f$	Main contribution
1	2.65	431	1.4077	0.80 (H→L)
2	2.40	463	1.6557	0.67 (H→L)
3	2.21	484	2.0903	0.56 (H→L)

### 3) ความหนาแน่นสถานะ (Density of state)

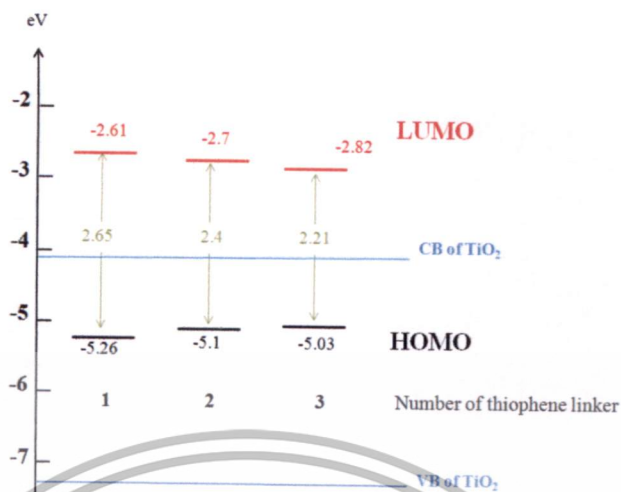
ตารางที่ 4.8 เปอร์เซนต์ความหนาแน่นของอิเล็กตรอนแต่ละส่วนของโมเลกุลสี่อ้อมไวแสงในกลุ่มอนุพันธ์ของไตรฟีนิลที่มีหมู่ไทโอเฟนเป็นตัวส่งผ่านอิเล็กตรอน

จำนวนหมู่ไทโอเฟน	State	Triphenyl	Linker	Acceptor
1	HOMO	81	12	7
	LUMO	14	37	50
2	HOMO	72	24	4
	LUMO	6	53	41
3	HOMO	64	34	3
	LUMO	2	59	39

จากผลการคำนวณการกระจายตัวของอิเล็กตรอนที่สถานะพื้นและสถานะเร้าในตารางที่ 4.8 พบว่า สี่อ้อมทั้งสามโครงสร้าง มีแนวโน้มการเคลื่อนที่ของอิเล็กตรอนไปในแนวทางเดียวกัน นั่นก็คือมีการเคลื่อนที่จากบริเวณส่วนที่เป็น หมู่ให้อิเล็กตรอนไปยังส่วนของหมู่รับอิเล็กตรอนโดยพบว่าโครงสร้างของโมเลกุลสี่อ้อมไวแสงที่มีจำนวนไทโอเฟนเป็นหมู่ส่งผ่านอิเล็กตรอนเพิ่มขึ้น จะส่งผลให้การเคลื่อนที่ของอิเล็กตรอนมายังบริเวณหมู่รับอิเล็กตรอนมีค่าน้อยลง นั่นคือ เมื่อมีหมู่ไทโอเฟน 1, 2 และ 3 หมู่ การเปลี่ยนแปลงความหนาแน่นของอิเล็กตรอนที่บริเวณหมู่ให้อิเล็กตรอนมีค่าการเปลี่ยนแปลงที่ 43, 37 และ 36 เปอร์เซนต์ตามลำดับ

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่าจะกรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

## 4) แถบพลังงานต้องห้าม

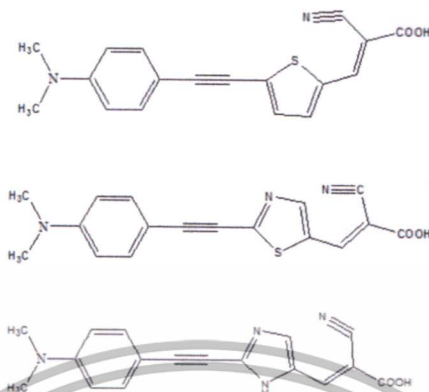


รูปที่ 4.18 แถบพลังงานต้องห้ามของสีย้อมไวแสงในกลุ่มอนุพันธ์ของไตรฟีนิลที่มีหมู่ไทโอฟีนเป็นตัวส่งผ่านอิเล็กตรอน

จากรูปที่ 4.18 ความแตกต่างระหว่างระดับพลังงาน HOMO และ LUMO แสดงให้เห็นแถบพลังงานต้องห้าม ซึ่งเป็นค่าพลังงานที่ใช้ในการกระตุ้นอิเล็กตรอนจากสถานะพื้นขึ้นไปสู่สถานะเร้า พบว่าเมื่อสีย้อมไวแสงมีความยาวของวงแหวนไทโอฟีนเพิ่มขึ้น จะทำให้ค่าพลังงานที่ใช้ในการกระตุ้นอิเล็กตรอนขึ้นไปสู่สถานะเร้ามีค่าน้อยลง นั่นคืออิเล็กตรอนถูกกระตุ้นไปที่แถบการนำไฟฟ้าของไททาเนียมไดออกไซด์ได้ดีขึ้น

ถึงแม้ว่าการเคลื่อนที่ของอิเล็กตรอนในโมเลกุลสีย้อมไวแสงที่มีหมู่ไทโอฟีนเป็นหมู่ส่งผ่านอิเล็กตรอน เพิ่มขึ้นนั้นจะส่งผลให้อิเล็กตรอนมีการเคลื่อนที่มายังหมู่รับน้อยลง แต่จากค่าการดูดกลืนพลังงานแสง จะเห็นว่าการเพิ่มหมู่ไทโอฟีนขึ้นส่งผลให้ค่าการดูดกลืนแสงมีค่าเพิ่มขึ้นมาก อีกทั้งพลังงานต้องห้ามมีค่าลดลง จึงสามารถสรุปได้ว่าการเพิ่มหมู่ไทโอฟีนเป็นตัวส่งผ่านอิเล็กตรอนในสีย้อมไวแสงนั้น ส่งผลให้ค่าประสิทธิภาพของสีย้อมไวแสงเพิ่มขึ้น

#### 4.1.2.3 การศึกษาอิทธิพลของหมู่ไทโอพีน ไทอะโซลและอิมิดาโซลเมื่อใช้เป็นตัวส่งผ่านอิเล็กตรอน ในกลุ่มอนุพันธ์ของไตรฟีนิล



รูปที่ 4.19 โครงสร้างของสีย้อมไวแสงในกลุ่มอนุพันธ์ของไตรฟีนิลที่มีหมู่ไทโอพีน ไทอะโซล และอิมิดาโซลเป็นตัวส่งผ่านอิเล็กตรอน

##### 1) โครงสร้างทางอิเล็กทรอนิกส์ (The electron structure)

ตัวส่งผ่านอิเล็กตรอน

HOMO

LUMO

ไทโอพีน

ไทอะโซล

อิมิดาโซล

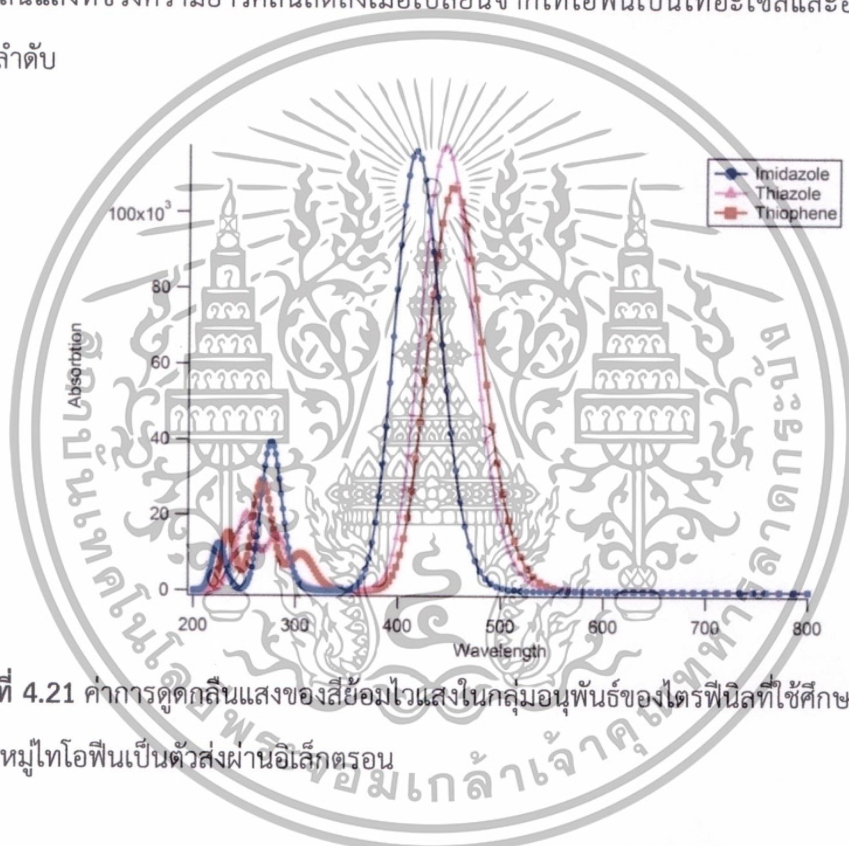
รูปที่ 4.20 Frontier Molecular Orbital ของโมเลกุลสีย้อมไวแสงที่สภาวะพื้นและ สภาวะเร้าของสีย้อมไวแสงในกลุ่มอนุพันธ์ของไตรฟีนิลที่มีหมู่ไทโอพีน ไทอะโซลและอิมิดาโซล เป็นตัวส่งผ่านอิเล็กตรอน

รูปที่ 4.20 แสดงความหนาแน่นของอิเล็กตรอนของโมเลกุลสีย้อมไวแสงที่สภาวะพื้นและสภาวะเร้า โดยที่สภาวะพื้นอิเล็กตรอนส่วนใหญ่จะรวมตัวอยู่ในส่วนของ หมู่ไตรฟีนิลและเมื่อโมเลกุลของสีย้อมไวแสงได้รับการกระตุ้น อิเล็กตรอนจะเคลื่อนที่จากสภาวะพื้นไปสู่สภาวะเร้า โดยอิเล็กตรอนจะเคลื่อนที่ผ่านหมู่ไทโอพีน ไทอะโซลและอิมิดาโซล ซึ่งเป็นตัวส่งผ่านอิเล็กตรอน ไปยังอีกด้านหนึ่งของโมเลกุลซึ่งเรียกว่า หมู่รับอิเล็กตรอน การเกิดการเคลื่อนที่เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปเผยแพร่ขึ้นด้านการค้าไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ตัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

ของอิเล็กทรอนิกส์เช่นนี้ เป็นลักษณะสำคัญของสีย้อมที่จะสามารถส่งอิเล็กตรอนไปยังแถบการนำไฟฟ้าของสารกึ่งตัวนำโลหะออกไซด์ไททาเนียมไดออกไซด์ และยังเป็นปรากฏการณ์สำคัญที่ส่งผลต่อประสิทธิภาพของเซลล์แสงอาทิตย์ชนิดสีย้อมไวแสง

## 2) ค่าการดูดกลืนพลังงานแสง

จากรูปที่ 4.21 เมื่อสีย้อมไวแสงมีตัวส่งผ่านอิเล็กทรอนิกส์เป็นหมู่ไทโอพีน ส่งผลให้กราฟค่าการดูดกลืนแสงมีค่าการดูดกลืนในช่วงความยาวคลื่นมากที่สุด และค่าการดูดกลืนแสงมีการดูดกลืนแสงที่ช่วงความยาวคลื่นลดลงเมื่อเปลี่ยนจากไทโอพีนเป็นไทอะโซลและอิมิดาโซลตามลำดับ



รูปที่ 4.21 ค่าการดูดกลืนแสงของสีย้อมไวแสงในกลุ่มอนุพันธ์ของไตรฟีนิลที่ใช้ศึกษาอิทธิพลของการเพิ่มหมู่ไทโอพีนเป็นตัวส่งผ่านอิเล็กทรอนิกส์

ตารางที่ 4.9 ค่าพลังงานกระตุ้น (Excitation energy) ค่าความแรงออสซิลเลเตอร์ (oscillator strengths,  $f$ ) และการทรานซิชันที่ได้จากการคำนวณด้วยระเบียบวิธี TDDFT-B3LYP/6-31G (d,p)

Functional group of aromatic donor	พลังงานกระตุ้น (eV)	$\lambda_{\max}$ (nm)	$f$	Main contribution
ไทโอพีน	2.63	452	1.4750	0.86 (H $\rightarrow$ L)
ไทอะโซล	2.65	445	1.6242	0.83 (H $\rightarrow$ L)
อิมิดาโซล	2.78	416	1.6061	0.82 (H $\rightarrow$ L)

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่าจะกรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ตัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

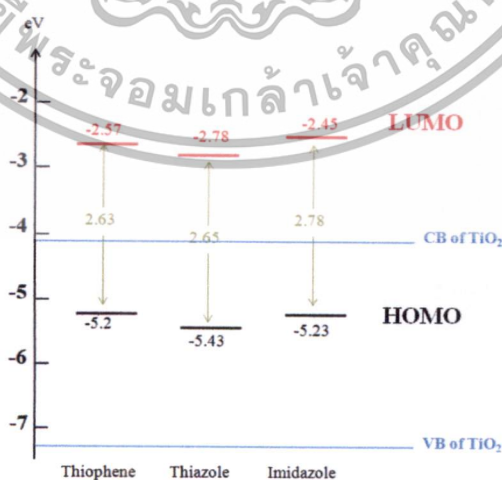
### 3) ความหนาแน่นสถานะ (Density of state)

ตารางที่ 4.10 เปรอ์เซ็นต์ความหนาแน่นของอิเล็กตรอนแต่ละส่วนของโมเลกุลสี้อมไวแสงในกลุ่มอนุพันธ์ของไตรฟีนิลที่มีหมู่ไทโอฟีนเป็นตัวส่งผ่านอิเล็กตรอน

Linker	State	Donor	Linker	Acceptor
ไทโอฟีน	LUMO	9	46	46
	HOMO	58	32	10
ไทอะโซล	LUMO	16	38	46
	HOMO	66	26	6
อิมิดาโซล	LUMO	11	27	62
	HOMO	62	29	9

จากผลการคำนวณการกระจายตัวของอิเล็กตรอนที่สภาวะพื้นและสภาวะเร้าในตารางที่ 4.10 พบว่า สี้อมทั้งสามโครงสร้าง มีแนวโน้มการเคลื่อนที่ของอิเล็กตรอนไปในแนวทางเดียวกัน นั่นก็คือมีการเคลื่อนที่จากบริเวณส่วนที่เป็น หมู่ให้อิเล็กตรอนไปยังส่วนของหมู่รับอิเล็กตรอนโดยพบว่าโครงสร้างของโมเลกุลสี้อมไวแสงที่มีไทโอฟีน ไทอะโซลและอิมิดาโซลเป็นหมู่ส่งผ่านอิเล็กตรอน การเปลี่ยนแปลงความหนาแน่นของอิเล็กตรอนที่บริเวณหมู่รับอิเล็กตรอน มีค่าการเปลี่ยนแปลงที่ 36, 40 และ 53 เปรอ์เซ็นต์ตามลำดับ นั่นคือเมื่อเปลี่ยนตัวส่งผ่านอิเล็กตรอนจากไทโอฟีนเป็นไทอะโซลและอิมิดาโซล ทำให้เกิดการเคลื่อนที่ของอิเล็กตรอนไปยังหมู่รับได้ดีขึ้น

### 4) แถบพลังงานต้องห้าม



รูปที่ 4.22 แถบพลังงานต้องห้ามของสี้อมไวแสงในกลุ่มอนุพันธ์ของไตรฟีนิลที่มีหมู่ไทโอฟีนเป็นตัวส่งผ่านอิเล็กตรอน

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่าจะกรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

จากรูปที่ 4.22 ความแตกต่างระหว่างระดับพลังงาน HOMO และ LUMO แสดงให้เห็นแถบพลังงานต้องห้าม ซึ่งเป็นค่าพลังงานที่ใช้ในการกระตุ้นอิเล็กตรอนจากสถานะพื้นขึ้นไปสู่สถานะเร้า โดยพบว่าเมื่อเปลี่ยนตัวส่งผ่านอิเล็กตรอนจาก ไทโอเฟน เป็นไทอะโซลและอิมิดาโซลจะทำให้ค่าพลังงานที่ใช้ในการกระตุ้นอิเล็กตรอนขึ้นไปสู่สถานะเร้ามีค่ามากขึ้น ทำให้อิเล็กตรอนถูกกระตุ้นขึ้นไปสู่สถานะกระตุ้นได้ยากขึ้น

จากผลการทดลองสรุปได้ว่า ไทโอเฟนเป็นตัวส่งผ่านอิเล็กตรอนที่ดีที่สุดในการทดลองนี้ เนื่องจากให้ค่าการดูดกลืนแสงในช่วงที่มีค่าความยาวคลื่นมากที่สุด มีการเคลื่อนที่ของอิเล็กตรอนมายังหมู่รับที่ดี และยังมีพลังงานในการกระตุ้นต่ำที่สุดอีกด้วย

ถึงแม้ว่าการเปลี่ยนตัวส่งผ่านอิเล็กตรอนจากไทโอเฟนเป็นไทอะโซลและอิมิดาโซลจะทำให้การเคลื่อนที่ของอิเล็กตรอนภายในโมเลกุลเป็นไปได้ดีขึ้นแต่เนื่องด้วยค่าการดูดกลืนแสงและพลังงานในการกระตุ้น จึงทำให้พบว่าไทอะโซลและอิมิดาโซลใช้เป็นตัวส่งผ่านอิเล็กตรอนได้ แต่ไม่ดีเท่าสีย้อมที่มีตัวส่งผ่านอิเล็กตรอนเป็นไทโอเฟน

#### 4.1.3 การคำนวณทางเคมีควอนตัมเพื่อศึกษาสมบัติต่างๆ ของสีย้อมไวแสง ก่อนทำการสังเคราะห์

โดยสีย้อมที่ศึกษา เป็นสีย้อมไวแสงในกลุ่มอนุพันธ์ของไตรฟีนิลมีน ที่มีหมู่ไทโอเฟนเป็นตัวส่งผ่านอิเล็กตรอน ซึ่งมีโครงสร้างดังรูปที่ 4.23

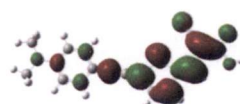


รูปที่ 4.23 โครงสร้างของสีย้อมไวแสงในกลุ่มอนุพันธ์ของไตรฟีนิลที่มีหมู่ไทโอเฟน เป็นตัวส่งผ่านอิเล็กตรอน

##### 1) โครงสร้างทางอิเล็กทรอนิกส์ (The electron structure)

HOMO

LUMO



##### รูปที่ 4.24 Frontier Molecular Orbital ของโมเลกุลสีย้อมไวแสงที่สถานะพื้นและสถานะเร้า

ของสีย้อมไวแสงในกลุ่มอนุพันธ์ของไตรฟีนิลมีน ที่มีหมู่ไทโอเฟนเป็นตัวส่งผ่านอิเล็กตรอน

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่าจะกรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

รูปที่ 4.24 แสดงความหนาแน่นของอิเล็กตรอนของโมเลกุลสีย้อมที่สภาวะพื้นและสภาวะเร้า โดยที่สภาวะพื้นอิเล็กตรอนส่วนใหญ่จะรวมตัวอยู่ในส่วนของหมู่ไคเมทิล และเมื่อโมเลกุลของสีย้อมไวแสงได้รับการกระตุ้น อิเล็กตรอนจะเคลื่อนที่จากสภาวะพื้นไปสู่สภาวะเร้า โดยอิเล็กตรอนจะเคลื่อนที่ผ่านหมู่ไทโอเฟน ซึ่งเป็นตัวส่งผ่านอิเล็กตรอนไปยังอีกด้านหนึ่งของโมเลกุล ซึ่งเรียกว่าหมู่รับอิเล็กตรอน การเกิดการเคลื่อนที่ของอิเล็กตรอนเช่นนี้ เป็นลักษณะสำคัญของสีย้อมที่จะสามารถส่งอิเล็กตรอนไปยังแถบการนำไฟฟ้าของสารกึ่งตัวนำโลหะออกไซด์ที่ทาเหนียวได้ออกไซด์ และยังเป็นปรากฏการณ์สำคัญที่ส่งผลต่อประสิทธิภาพของเซลล์แสงอาทิตย์ชนิดสีย้อมไวแสง

## 2) ค่าการดูดกลืนพลังงานแสง

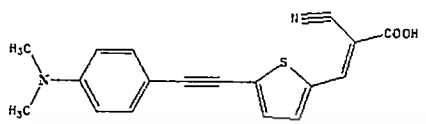
จากรูปที่ 4.25 แสดงค่าการดูดกลืนพลังงานแสงของโมเลกุลของสีย้อมไวแสงในกลุ่มอนุพันธ์ของไคเมทิลอนิลีนที่มีตัวส่งผ่านอิเล็กตรอนเป็นหมู่ไทโอเฟน พบว่าให้ค่าการดูดกลืนแสงสูงสุด ( $\lambda_{max}$ ) ที่ความยาวคลื่น 453 นาโนเมตร



รูปที่ 4.25 ค่าการดูดกลืนแสงของสีย้อมไวแสงในกลุ่มอนุพันธ์ของไคเมทิลอนิลีนที่มีตัวส่งผ่านอิเล็กตรอนเป็นหมู่ไทโอเฟน

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่าจะกรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

ตารางที่ 4.11 ค่าพลังงานกระตุ้น (Excitation energy) ค่าความแรงออสซิลเลเตอร์ (oscillator strengths,  $f$ ) และการทราบซึ้นที่ได้จากการคำนวณด้วยระเบียบวิธี TDDFT-B3LYP/6-31G (d,p)

สีย้อมไวแสง	พลังงานกระตุ้น (eV)	$\lambda_{max}$ (nm)	$f$	Main contribution
	2.63	453	1.4750	0.86 (H→L)

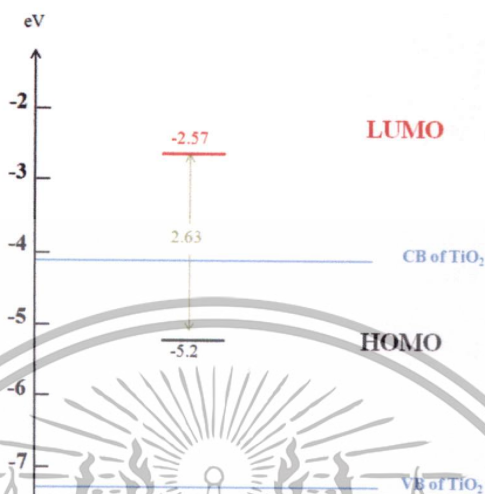
### 3) ความหนาแน่นสถานะ (Density of state)

ตารางที่ 4.12 เปรอ์เซ็นต์ความหนาแน่นของอเล็กตรอนแต่ละส่วนของโมเลกุลสีย้อมไวแสงในกลุ่มอนุพันธ์ของไตรฟีนิลที่มีหมู่ไทโอฟีนเป็นตัวส่งผ่านอเล็กตรอน

State	Donor	Linker	Acceptor
LUMO	9	46	46
HOMO	58	32	10

จากตารางที่ 4.12 แสดงผลการคำนวณการกระจายตัวของอเล็กตรอนที่สภาวะพื้นและสภาวะเร้าพบว่า สีย้อมไวแสง มีแนวโน้มการเคลื่อนที่ของอเล็กตรอน จากบริเวณส่วนที่เป็นหมู่ให้อเล็กตรอนไปยังส่วนของหมู่รับอเล็กตรอน โดยการเปลี่ยนแปลงความหนาแน่นของอเล็กตรอนที่บริเวณหมู่รับอเล็กตรอนมีค่าการเปลี่ยนแปลงที่ 36 เปรอ์เซ็นต์ซึ่งเป็นสัญลักษณ์ที่สำคัญแสดงให้เห็นว่าอเล็กตรอนมีการเคลื่อนที่ไปยังบริเวณหมู่รับได้ดี ทำให้มีแนวโน้มในการเคลื่อนที่ของอเล็กตรอนไปยังสารกึ่งตัวนำโลหะออกไซด์โททานเนียมไดออกไซด์ที่สีย้อมไวแสงยึดเกาะอยู่ ซึ่งทำให้เกิดการไหลของกระแสไฟฟ้า

## 4) แถบพลังงานต้องห้าม

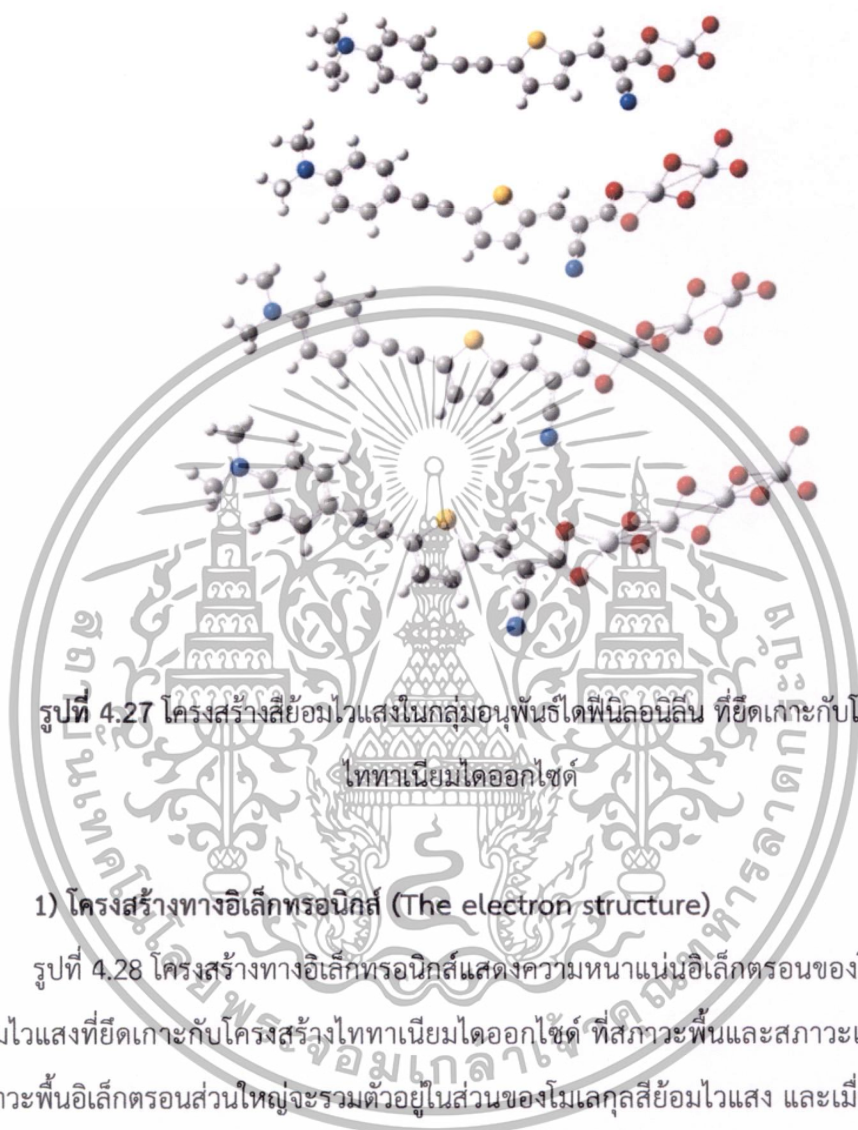


รูปที่ 4.26 แถบพลังงานต้องห้ามของสีย้อมไวแสงในกลุ่มอนุพันธ์ของไดเมทิลอนิซีนที่มีหมู่ไทโอฟีนเป็นตัวส่งผ่านอิเล็กตรอน

จากความแตกต่างระหว่างระดับพลังงาน HOMO และ LUMO แสดงให้เห็นแถบพลังงานต้องห้าม ซึ่งเป็นค่าพลังงานที่ใช้ในการกระตุ้นอิเล็กตรอนจากสถานะพื้นขึ้นไปสู่สถานะเร้า โดยพบว่าสีย้อมไวแสงในกลุ่มอนุพันธ์ของไดเมทิลเอมีนนั้น มีค่าพลังงานกระตุ้นที่ 2.63 อิเล็กตรอนโวลต์

จากผลการทดลองสรุปได้ว่า สีย้อมไวแสงในกลุ่มอนุพันธ์ของไดเมทิลเอมีนนั้นที่มีหมู่ไทโอฟีนเป็นตัวส่งผ่านอิเล็กตรอนนั้น สามารถใช้เป็นสีย้อมไวแสงที่ดีในเซลล์แสงอาทิตย์ชนิดสีย้อมไวแสงได้ เนื่องจากให้ค่าการดูดกลืนแสงในช่วงที่มีค่าความยาวคลื่นค่อนข้างมาก เมื่อเปรียบเทียบกับสีย้อมอินทรีย์ทั่วไป อีกทั้งยังมีการเคลื่อนที่ของอิเล็กตรอนมายังหมู่รับที่ดี และยังมีพลังงานในการกระตุ้นที่ค่อนข้างต่ำอีกด้วย

#### 4.1.4 การศึกษาการกระจายตัวของอิเล็กตรอนในสีย้อมกลุ่มอนุพันธ์ไคฟีนิลเมื่อสีย้อมไวแสงยึดเกาะกับโครงสร้างไททาเนียมไดออกไซด์

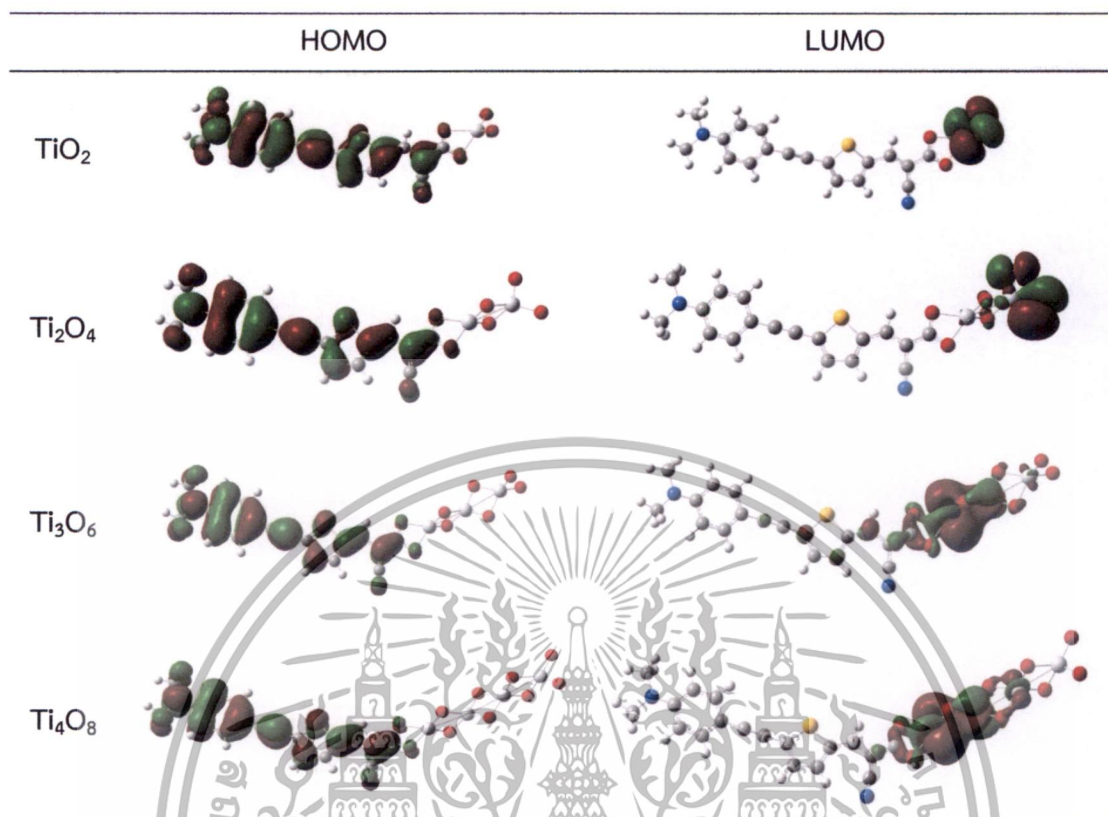


รูปที่ 4.27 โครงสร้างสีย้อมไวแสงในกลุ่มอนุพันธ์ไคฟีนิลอนินีน ที่ยึดเกาะกับโครงสร้างไททาเนียมไดออกไซด์

##### 1) โครงสร้างทางอิเล็กทรอนิกส์ (The electron structure)

รูปที่ 4.28 โครงสร้างทางอิเล็กทรอนิกส์แสดงความหนาแน่นอิเล็กตรอนของโมเลกุลสีย้อมไวแสงที่ยึดเกาะกับโครงสร้างไททาเนียมไดออกไซด์ ที่สภาวะพื้นและสภาวะเร้า โดยที่สภาวะพื้นอิเล็กตรอนส่วนใหญ่จะรวมตัวอยู่ในส่วนของโมเลกุลสีย้อมไวแสง และเมื่อโมเลกุลของสีย้อมไวแสงได้รับการกระตุ้นจากพลังงานแสงอาทิตย์ อิเล็กตรอนจะถูกกระตุ้นจากสภาวะพื้นไปสู่สภาวะเร้า โดยอิเล็กตรอนจะเคลื่อนไปยังอีกด้านหนึ่งของโมเลกุลซึ่งเรียกว่าหมู่รับอิเล็กตรอนซึ่งทำหน้าที่ยึดเกาะกับโมเลกุลของสารกึ่งตัวนำโลหะออกไซด์ ซึ่งในการทดลองนี้ศึกษาการเคลื่อนที่ของอิเล็กตรอนจากสีย้อมไวแสงไปยังไททาเนียมไดออกไซด์ทั้งหมด 4 รูปแบบ โดยเพิ่มความยาวของไททาเนียมไดออกไซด์ชั้นเรื่อยๆ เพื่อให้การคำนวณเข้าใกล้สภาพจริงโดยการทดลองทั้งหมดศึกษาการเคลื่อนที่ของอิเล็กตรอนในแนวเส้นตรงตั้งฉากกับพื้นผิวของไททาเนียมไดออกไซด์ นั่นคือ  $TiO_2$ ,  $Ti_2O_4$ ,  $Ti_3O_6$  และ  $Ti_4O_8$  ตามลำดับ

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่าจะกรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ตัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

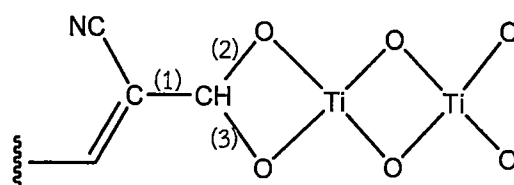


รูปที่ 4.28 Frontier Molecular Orbital ของโมเลกุลสีย้อมไวแสงที่สถานะพื้นและ สถานะเร้าของ สีย้อมไวแสงในกลุ่มอนุพันธ์ของไดเมทิลอนิลีน ที่ยึดเกาะกับโครงสร้างไททาเนียมไดออกไซด์

ผลการทดลอง พบว่าอิเล็กตรอนของสีย้อมไวแสงมีการส่งต่อไปยังไททาเนียมไดออกไซด์ โดยมีค่าความยาวพันธะเปลี่ยนแปลงเล็กน้อยเมื่อเพิ่มจำนวนโมเลกุลของไททาเนียมไดออกไซด์ ดังตารางที่ 4.13

การเคลื่อนที่ของอิเล็กตรอนเช่นนี้เป็นลักษณะพฤติกรรมที่สำคัญของสีย้อมไวแสงที่ทำให้เกิดการไหลของกระแสไฟฟ้าขึ้นในวงจรเซลล์แสงอาทิตย์ชนิดสีย้อมไวแสงและยังเป็นปรากฏการณ์สำคัญที่ส่งผลต่อประสิทธิภาพของเซลล์แสงอาทิตย์ชนิดสีย้อมไวแสงอีกด้วย

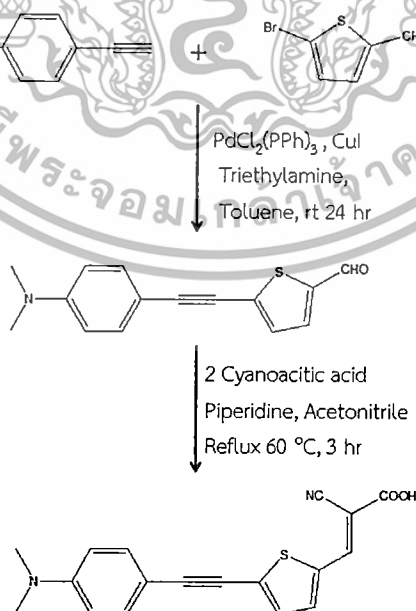
ตารางที่ 4.13 ความยาวพันธะ ( ในหน่วย Å ) ของหมู่รับอิเล็กตรอน



โครงสร้าง	C-C (1)	C-O (2)	C-O (3)
Dye	1.4810	1.2134	1.3610
Dye-TiO <sub>2</sub>	1.4937	1.2715	1.2740
Dye-Ti <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	1.4435	1.2985	1.2980
Dye-Ti <sub>3</sub> O <sub>6</sub>	1.4338	1.3029	1.3047
Dye-Ti <sub>4</sub> O <sub>8</sub>	1.4338	1.3030	1.3047

## 4.2 การสังเคราะห์สีย้อมไวแสง

4.2.1 การสังเคราะห์สีย้อมไวแสงที่มีหมู่ให้อิเล็กตรอน (Electron donor) เป็นโดเมทิลอนิน และหมู่ไทโอพีนเป็นตัวส่งผ่านอิเล็กตรอน



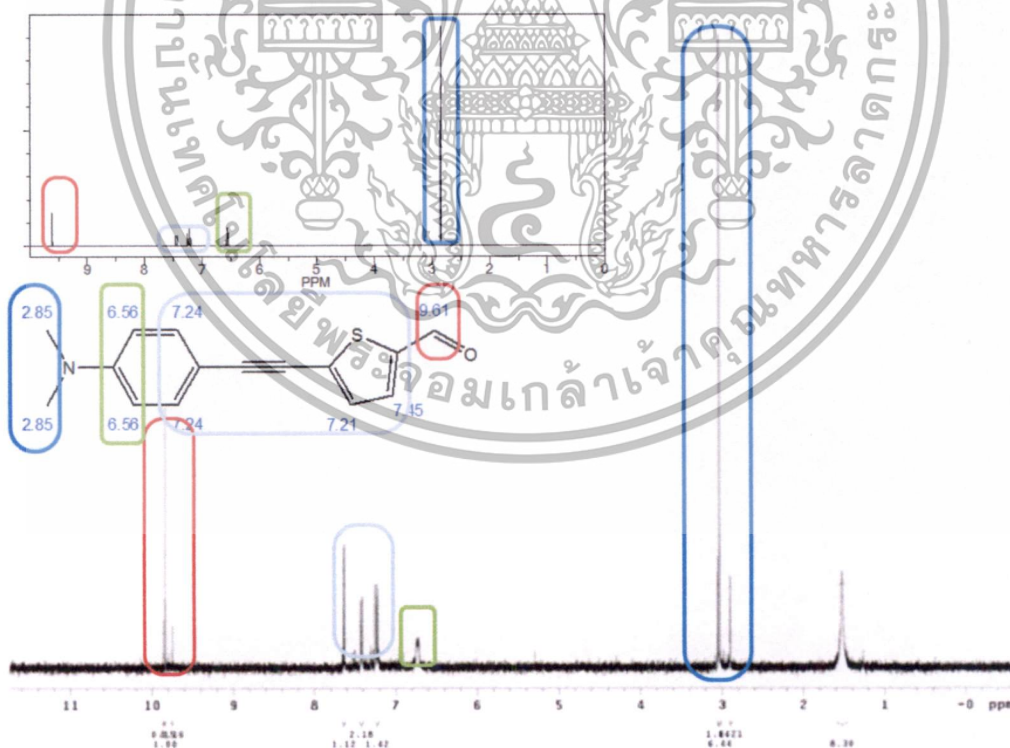
รูปที่ 4.29 ขั้นตอนการสังเคราะห์สีย้อมไวแสง

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่าจะกรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ตัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

เริ่มต้นการสังเคราะห์โดยทำปฏิกิริยารวมตัว Sonogashira Coupling Reaction ระหว่าง 4-ethynyl-N,N-dimethylaniline และ 5-bromo-2-thiophenecarboxaldehyde โดยใช้ Bis (triphenylphosphine) palladium (II) dichloride และ Copper Iodide เป็นตัวเร่งปฏิกิริยา มีตัวทำละลายเป็นโทลูอีนทำปฏิกิริยาภายใต้สภาวะเบสโดยการใช้ไตรเอทิลแอมมีน ทำปฏิกิริยาภายใต้สภาวะไนโตรเจนที่อุณหภูมิห้องเป็นเวลา 24 ชั่วโมง ติดตามปฏิกิริยาโดยใช้ทินเลเยอร์โครมาโตกราฟี (Thin layer Chromatography) หลังจากปฏิกิริยาสมบูรณ์ทำให้บริสุทธิ์ด้วยวิธีทางโครมาโตกราฟีจะได้โมเลกุลของสีย้อมไวแสงที่มีหมู่ฟังก์ชันเป็นแอลดีไฮด์ที่ผลผลิต (% yield) เท่ากับ 29 เปอร์เซ็นต์ จากนั้นทำปฏิกิริยาเปลี่ยนหมู่ฟังก์ชันโดยใช้ 2-cyanoacetic acid, Piperidine โดยมี Acetonitrile เป็นสารละลายในการทำปฏิกิริยาได้ผลผลิตเท่ากับ 25 เปอร์เซ็นต์

#### 4.2.1.1 การวิเคราะห์โครงสร้างโมเลกุลสีย้อมไวแสง

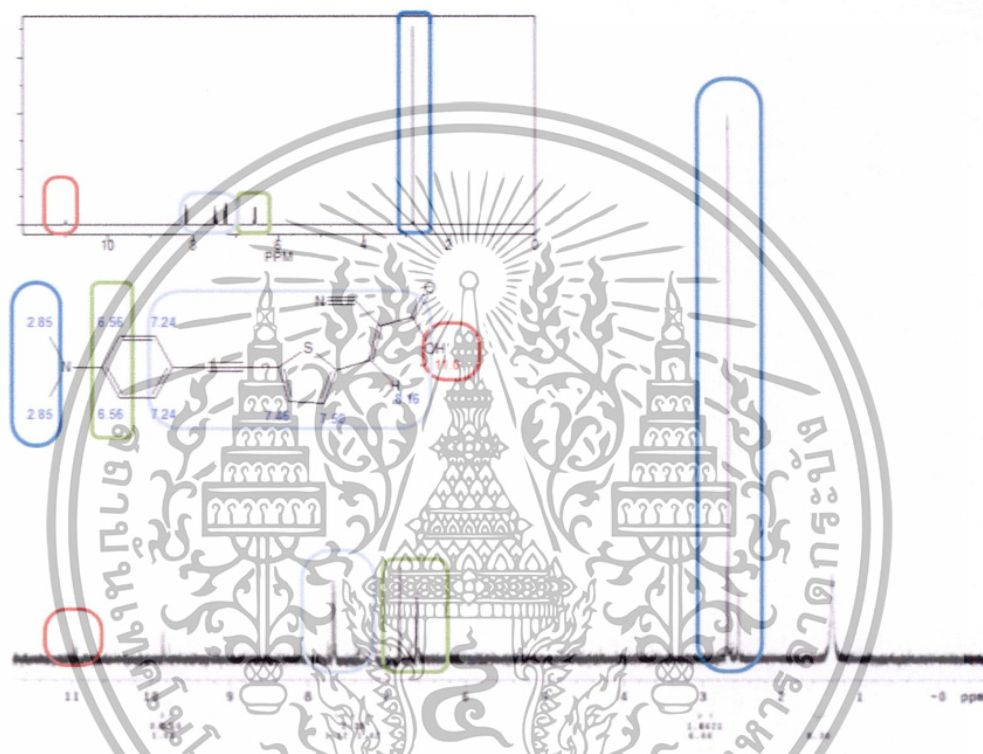
##### 1) การวิเคราะห์ด้วยเทคนิคนิวเคลียร์แมกเนติกเรโซแนนซ์



รูปที่ 4.30 การวิเคราะห์โมเลกุลสีย้อมไวแสง ด้วยเทคนิคนิวเคลียร์แมกเนติกเรโซแนนซ์

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่าจะกรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ตัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

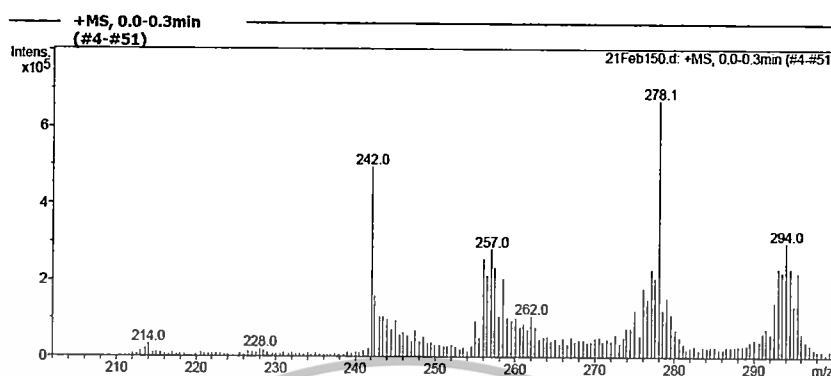
การพิสูจน์เอกลักษณ์โครงสร้างของสีย้อมไวแสงในกลุ่มอนุพันธ์ของโดเมทิลอนินในชั้นที่ 1 แสดงในรูปที่ 4.30 โดยทำการการพิสูจน์เอกลักษณ์โครงสร้างที่มีหมู่ฟังก์ชันเป็นแอลดีไฮด์ (-CHO) พบว่า  $^1\text{H NMR}$  ของสีย้อมไวแสงมีความสอดคล้องกับสีย้อมที่ได้จากการสังเคราะห์ดังนี้ ( $\text{CDCl}_3$ ): $\delta$  9.61 (s, 1H, -aromatic-C=CHO), 7.45 (s, 1H, -Thiophene-CH=CHO), 7.24 (s, 1H, -Benzene-CH-C), 7.21 (s, 1H, -Thiophene-CH=C), 6.56 (s, 2H, -Benzene-CH-N), 2.85 (s, 6H,  $\text{CH}_3$ -N)



รูปที่ 4.31 การวิเคราะห์โมเลกุลสีย้อมไวแสง ด้วยเทคนิคนิวเคลียร์แมกเนติกเรโซแนนซ์

การพิสูจน์เอกลักษณ์โครงสร้างของสีย้อมไวแสงในกลุ่มอนุพันธ์ของโดเมทิลอนิน แสดงในรูปที่ 4.31 โดยทำการการพิสูจน์เอกลักษณ์โครงสร้างที่มีหมู่ฟังก์ชันเป็นไซยาโนอะคริลิก ( $-\text{C}\equiv\text{N}$ ,  $\text{COOH}$ ) พบว่า  $^1\text{H NMR}$  ของสีย้อมไวแสงมีความสอดคล้องกับสีย้อมที่ได้จากการสังเคราะห์ดังนี้ ( $\text{CDCl}_3$ ): $\delta$  11.0 (s, 1H, OH), 7.50 (s, 1H, -Thiophene-CH=CHO), 7.46 (s, 1H, -Thiophene-CH=CHO), 7.24 (s, 1H, -Benzene-CH-C), 6.56 (s, 2H, -Benzene-CH-N), 2.85 (s, 6H,  $\text{CH}_3$ -N)

## 2) การวิเคราะห์ด้วยเทคนิคแมสสเปกโทรสโคปี



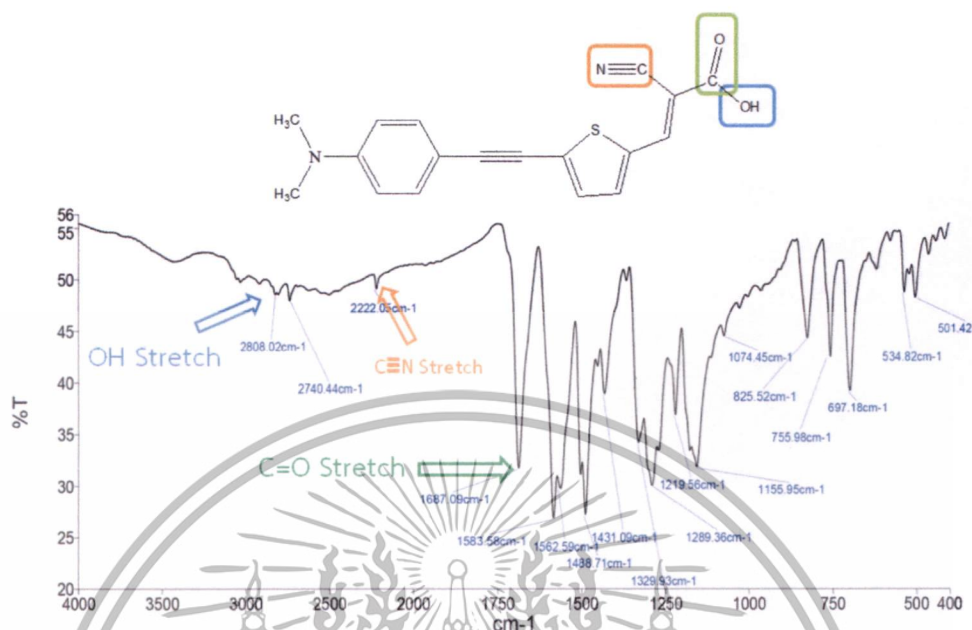
รูปที่ 4.32 ผลการวิเคราะห์ด้วยเทคนิคแมสสเปกโทรสโคปี

การสังเคราะห์เริ่มต้นจากสารตั้งต้น 2 ชนิดคือ 4-ethynyl-N,N-dimethylaniline ซึ่งมีน้ำหนักโมเลกุลเท่ากับ 145.2 และ 5-bromo-2-thiophenecarboxaldehyde น้ำหนักโมเลกุลเท่ากับ 191.05 กรัมต่อโมล มาทำปฏิกิริยารวมตัวกันแบบ Sonogashira Coupling ได้โมเลกุลของสีย้อมไวแสงที่มีหมู่ฟังก์ชันเป็นแอลดีไฮด์ ซึ่งมีน้ำหนักโมเลกุลทางทฤษฎีรวมเท่ากับ 255.35 กรัมต่อโมล เทคนิคนี้เป็นการตรวจสอบน้ำหนักโมเลกุลของโครงสร้างที่เราสังเคราะห์ว่าเกิดปฏิกิริยารวมตัวกันหรือไม่ โดยจากผลการวิเคราะห์พบว่าโครงสร้างหลักที่มีน้ำหนักโมเลกุลอยู่ที่ 257 กรัมต่อโมล ซึ่งใกล้เคียงกับสารผลิตภัณฑ์ จึงเป็นการยืนยันได้ว่า โครงสร้างที่ได้สังเคราะห์มานั้นมีปฏิกิริยารวมตัวกันเกิดขึ้น ส่วนพีคอื่นๆ ที่เกิดขึ้น อาจเป็นของเสียที่เกิดขึ้นระหว่างการทำปฏิกิริยา หรืออาจเกิดจากการรวมตัวของสีย้อมไวแสงและสารละลายขณะทำการวิเคราะห์

การเปลี่ยนหมู่ฟังก์ชันของแอลดีไฮด์ (CHO) เป็นไซยาโนอคริลิก (C≡N และ COOH) จะมีการพิสูจน์เอกลักษณ์ด้วยเทคนิคอินฟราเรดสเปกโทรสโคปี (FTIR) ซึ่งแสดงในหัวข้อถัดไป

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่าจะกรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ตัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

### 3) การวิเคราะห์ด้วยเทคนิคอินฟราเรดสเปกโทรสโคปี (FTIR)

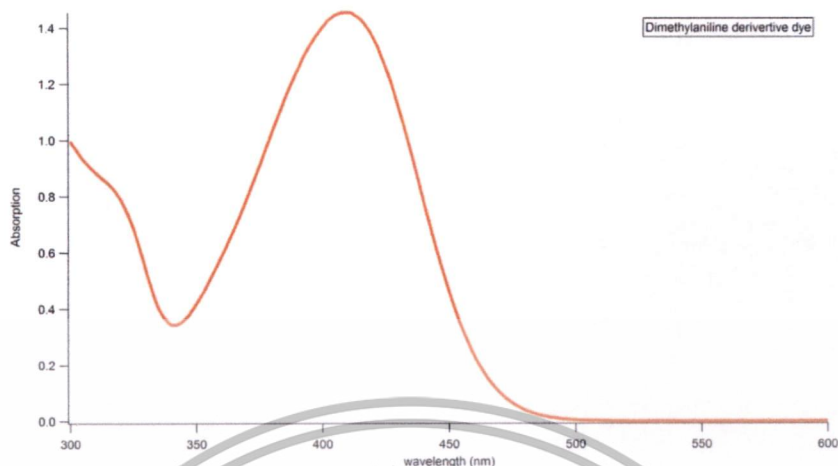


รูปที่ 4.33 ผลการวิเคราะห์ด้วยเทคนิคอินฟราเรดสเปกโทรสโคปี

การวิเคราะห์หมู่ฟังก์ชันของโมเลกุลสี้อมไวแสง ด้วยเทคนิคอินฟราเรดสเปกโทรสโคปี แสดงดังรูปที่ 4.33 เป็นการหาค่าประกอบของโครงสร้างจากการเปลี่ยนแปลงทรานซิชันของการสั่นและการหมุนของโมเลกุล เพื่อยืนยันโครงสร้างและพิสูจน์เอกลักษณ์หมู่ฟังก์ชันของโมเลกุลสี้อมไวแสงจากหมู่แอลดีไฮด์เป็นไฮยาโนอะครีลิกแอซิด ( $C\equiv N$  และ  $COOH$ ) สามารถบอกองค์ประกอบของโครงสร้างได้ดังนี้  $2808.02\text{ cm}^{-1}$  (OH stretch),  $2222.05\text{ cm}^{-1}$  ( $C\equiv N$  stretch),  $1687.09\text{ cm}^{-1}$  ( $C=O$  stretch) การวิเคราะห์หมู่ฟังก์ชันด้วยเทคนิคอินฟราเรดสเปกโทรสโคปีมีลักษณะที่สอดคล้องกับหมู่ฟังก์ชันของโมเลกุลสี้อมไวแสงที่สังเคราะห์ได้

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่าจะกรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ตัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

#### 4) การวิเคราะห์ด้วยเทคนิคยูวีวิสิเบิล สเปกโตรสโคปี



รูปที่ 4.34 ค่าการดูดกลืนพลังงานแสงของสีย้อมไวแสงที่ได้จากการสังเคราะห์

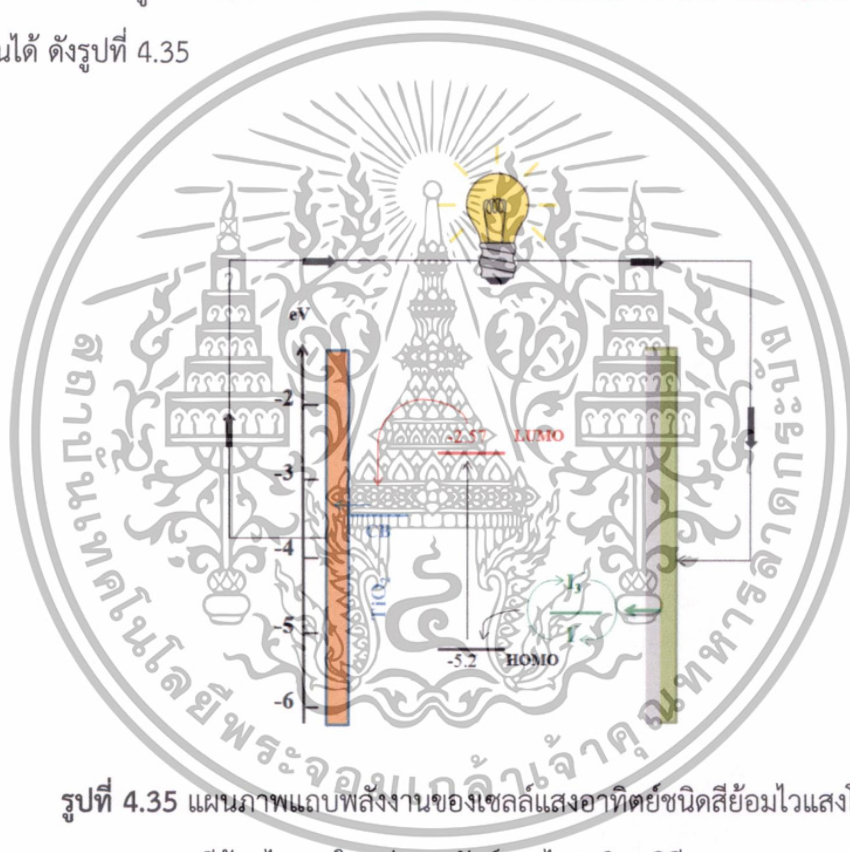
จากการวัดค่าพลังงานการดูดกลืนแสงด้วยเทคนิคยูวีวิสิเบิล สเปกโตรสโคปีพบว่าสีย้อมไวแสงมีค่าการดูดกลืนในช่วงความยาวคลื่นตั้งแต่ 300 นาโนเมตร ไปจนถึง 450 นาโนเมตร โดยให้ค่าการดูดกลืนพลังงานแสงสูงสุด ( $\lambda_{max}$ ) ที่ความยาวคลื่น 411 นาโนเมตร ซึ่งแสดงให้เห็นว่า สีย้อมไวแสงที่เราสังเคราะห์ได้นั้นมีความสามารถในการดูดกลืนแสงอาทิตย์ได้ในช่วงกว้าง เมื่อเทียบกับ N719 ซึ่งเป็นสีย้อมมาตรฐานซึ่งมีค่าการดูดกลืนพลังงานแสงสูงสุด ( $\lambda_{max}$ ) ที่ความยาวคลื่น 534 นาโนเมตร สีย้อมไวแสงที่สังเคราะห์ได้มีความสามารถในการดูดกลืนพลังงานแสงอาทิตย์น้อยกว่าสีย้อมมาตรฐาน ซึ่งทำให้ค่าประสิทธิภาพน้อยกว่าสีย้อมมาตรฐาน

การปรับปรุงโครงสร้างสีย้อมไวแสงให้มีค่าการดูดกลืนแสงในช่วงความยาวคลื่นมากขึ้น เพื่อให้ใกล้เคียงกับช่วงพลังงานแสงอาทิตย์ที่มีค่าพลังงานมากที่สุดในช่วงความยาวคลื่น 500-600 นาโนเมตรนั้น จะทำให้ประสิทธิภาพของสีย้อมไวแสงมากขึ้นด้วย ซึ่งการปรับปรุงประสิทธิภาพของสีย้อมไวแสงควรมีค่าเข้าใกล้สีย้อมมาตรฐาน

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่าจะกรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ตัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

### 5) การทำนายประสิทธิภาพเซลล์แสงอาทิตย์

หลังจากทำการพิสูจน์เอกลักษณ์สีย้อมไวแสงด้วยเทคนิคต่างๆ เพื่อทำการยืนยันความถูกต้องของโครงสร้างที่สังเคราะห์ได้ ซึ่งสีย้อมไวแสงที่ได้จากการสังเคราะห์นั้น มีค่าแถบพลังงานต้องห้ามจากการคำนวณโดยเทียบกับแถบการนำไฟฟ้าของสารกึ่งตัวนำไททานเนียมไดออกไซด์ และระดับชั้นพลังงานของสารละลายอิเล็กโทรไลต์คูปฏิกริยารีดอกซ์ ไอโอดี/ไตรไอโอดี ( $I/I_3^-$ ) พบว่าค่าพลังงานของสถานะ LUMO ของสีย้อมไวแสงนั้นมีค่ามากกว่าชั้นพลังงานของแถบการนำไฟฟ้าของไททานเนียมไดออกไซด์ และชั้นพลังงานของสารละลายอิเล็กโทรไลต์มีค่าสูงกว่าชั้นพลังงาน HOMO ของสีย้อมไวแสงทำให้การไหลของอิเล็กตรอนเกิดขึ้นได้ ดังรูปที่ 4.35

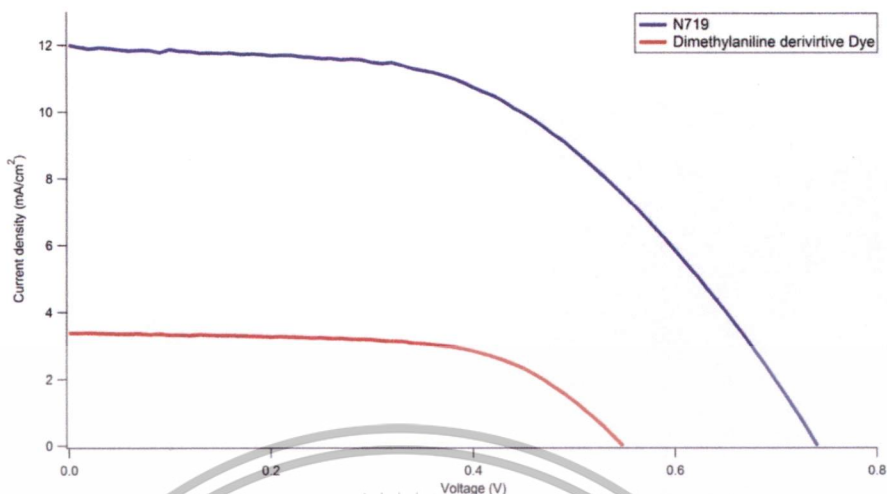


รูปที่ 4.35 แผนภาพแถบพลังงานของเซลล์แสงอาทิตย์ชนิดสีย้อมไวแสงโดยใช้สีย้อมไวแสงในกลุ่มอนุพันธ์ของไดเมทิลอนิซีน

จากนั้นนำไปประกอบเป็นเซลล์แสงอาทิตย์ชนิดสีย้อมไวแสง จากใช้สีย้อมไวแสงในกลุ่มอนุพันธ์ของไดเมทิลอนิซีนที่ได้จากการสังเคราะห์ข้างต้น โดยปริมาณสีย้อมที่ใช้ 0.05 กรัม ละลายในแกมมา-บิวทิลแลคโตน 10 มิลลิลิตร ซึ่งคิดเป็นความเข้มข้นเท่ากับ 15 มิลลิโมลาร์

จากนั้นนำไปวัดค่าประสิทธิภาพโดยเครื่อง เครื่องโซลาร์ซิมูเลเตอร์ ที่แหล่งกำเนิดแสงมาตรฐาน A.M. 1.5 ที่ความเข้มแสง 100 มิลลิวัตต์ต่อตารางเซนติเมตร ณ อุณหภูมิ 25 องศา

เซลเซียส วัดค่ากระแสและแรงดันไฟฟ้าด้วย Keithley 2400 electrometer เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่าจะกรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ตัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้



รูปที่ 4.36 กราฟกระแสและแรงดันไฟฟ้าของเซลล์แสงอาทิตย์ชนิดสีย้อมไวแสง โดยใช้สีย้อมอินทรีย์ไวแสงในกลุ่มอนุพันธ์ไดเมทิลอนิลีนที่ได้จากการสังเคราะห์

ตารางที่ 4.14 ค่าพารามิเตอร์ต่างๆ และประสิทธิภาพของเซลล์แสงอาทิตย์ชนิดสีย้อมไวแสง จากสีย้อมอินทรีย์ไวแสงในกลุ่มอนุพันธ์ไดเมทิลอนิลีนที่ได้จากการสังเคราะห์

สีย้อม	$V_{oc}$ (V)	$J_{sc}$ (mA/cm <sup>2</sup> )	FF	$\eta$ (%)
Dye	0.55	3.39	0.61	1.14
N719	0.74	12.00	0.51	4.49

ผลการทดสอบในภาพที่ 4.36 แสดงกราฟกระแสและแรงดันไฟฟ้าของเซลล์แสงอาทิตย์ชนิดสีย้อมไวแสง และในตารางที่ 4.14 แสดงค่ากระแสไฟฟ้าลัดวงจร ( $J_{sc}$ ) แรงดันไฟฟ้าวงจรถัด ( $V_{oc}$ ) ฟิวด์แฟกเตอร์ (FF) และค่าประสิทธิภาพ ( $\eta$ ) ของเซลล์แสงอาทิตย์ชนิดสีย้อมไวแสงโดยเซลล์แสงอาทิตย์ที่ใช้สีย้อมอินทรีย์ไวแสงในกลุ่มอนุพันธ์ไดเมทิลอนิลีนที่ได้จากการสังเคราะห์เปรียบเทียบกับ N719

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ตัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

## บทที่ 5

### สรุปผลการทดลอง

งานวิจัยนี้เป็นการนำเสนอผลการวิจัยของการสังเคราะห์สีย้อมไวแสง สำหรับใช้ในเซลล์แสงอาทิตย์ชนิดสีย้อมไวแสง โดยการทดลองแบ่งเป็น 2 ส่วนหลักๆ คือ 1) การออกแบบและทำนายคุณสมบัติพื้นฐานของสีย้อมไวแสงโดยการคำนวณทางเคมีควอนตัม ซึ่งแบ่งออกเป็นการทำนายอิทธิพลของหมู่ให้อิเล็กตรอน และการทำนายอิทธิพลของหมู่รับอิเล็กตรอนที่มีต่อการกระจายตัวของอิเล็กตรอนในโครงสร้าง พร้อมทั้งทำนายคุณสมบัติทางแสงและทางไฟฟ้าของโมเลกุลสีย้อมไวแสงเพื่อเป็นการทำนายคุณสมบัติเบื้องต้น ก่อนทำการสังเคราะห์สีย้อมไวแสงเพื่อใช้ในเซลล์แสงอาทิตย์ชนิดสีย้อมไวแสง 2) การสังเคราะห์สีย้อมไวแสงซึ่งได้ผ่านการทำนายโครงสร้างด้วยการคำนวณทางเคมีควอนตัมแล้ว โดยเทคนิคที่ใช้วิเคราะห์ในการสังเคราะห์ ได้แก่ นิวเคลียร์แมกเนติกเรโซแนนซ์ ยูวี-วิสิเบิล สเปกโทรสโคปี, แมสสเปกโทรสโคปี และ อินฟราเรดสเปกโทรสโคปี จากนั้นนำมาประกอบเป็นเซลล์แสงอาทิตย์ชนิดสีย้อมไวแสง เพื่อทำนายประสิทธิภาพ โดยเซลล์แสงอาทิตย์ที่สร้างขึ้น มีฟิล์มนาโนไททาเนียมไดออกไซด์เป็นชั้นสารกึ่งตัวนำแบบแถบพลังงานกว้างในขั้วไฟฟ้าเวดคิง และใช้ฟิล์มโลหะแพลตินัมเป็นชั้นตัวเร่งปฏิกิริยาในขั้วแคโทด และสารละลายอิเล็กโทรไลต์ที่ใช้ในการทดลอง เป็นระบบสารละลายคูรีดอกซ์ของ ไอโอดีน/ไตรไอโอดีน ( $I/I_3^-$ ) จากผลการทดลองสรุปได้ดังนี้

1. จากการศึกษาค่าอิทธิพลของหมู่ให้อิเล็กตรอน (Donor) ที่มีต่อคุณสมบัติพื้นฐานของสีย้อมไวแสง โดยหมู่ให้อิเล็กตรอนที่ศึกษา ได้แก่ โบรมีนและวงแหวนอะโรมาติกที่มีหมู่ฟังก์ชันต่างกันซึ่ง ประกอบด้วย ฟีนอล เมทอกซีเบนซีน โทลูอีน อนิลีน และคาบาริซอล ซึ่งจากผลการทำนายคุณสมบัติพื้นฐานในการทดลองนี้พบว่า อนิลีนเป็นหมู่ให้อิเล็กตรอนที่เหมาะสมที่สุด โดยที่อิเล็กตรอนมีแนวโน้มการเคลื่อนที่จากบริเวณหมู่ให้อิเล็กตรอนผ่านตัวส่งผ่านอิเล็กตรอนไปยังหมู่รับอิเล็กตรอนซึ่งยึดเกาะกับไททาเนียมไดออกไซด์ โดยมีเปอร์เซ็นต์การเปลี่ยนแปลงความหนาแน่นอิเล็กตรอนที่บริเวณหมู่รับอิเล็กตรอนที่ 53 เปอร์เซ็นต์ จากสถานะ HOMO ไป LUMO ซึ่งสีย้อมไวแสงนี้ มีค่าการดูดกลืนแสงสูงสุดในช่วงความยาวคลื่น 472 นาโนเมตร และมีค่าพลังงานกระตุ้นที่ต่ำที่สุดในการทดลองนี้ที่ 2.88 อิเล็กตรอนโวลต์

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่าจะกรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

2. จากการศึกษาเปรียบเทียบอิทธิพลของหมู่ให้อิเล็กตรอนที่มีต่อคุณสมบัติพื้นฐานของ สีย้อมไวแสง โดยหมู่ให้อิเล็กตรอนที่ศึกษา ได้แก่ ไตฟีนิลอนิสีนและไคเมทิลอนิสีน พบว่าค่า การดูดกลืนแสงของสีย้อมที่มีหมู่ให้อิเล็กตรอนเป็นไคเมทิลอนิสีน มีค่าการดูดกลืนแสงสูงสุดในช่วงความยาวคลื่นที่มากกว่าไตฟีนิลอนิสีน นั่นคือ 453 และ 431 นาโนเมตร ตามลำดับ ทั้งนี้เนื่องมาจากพันธะพายคอนจูเกตที่ยาวกว่าของโครงสร้างที่มีไคเมทิลอนิสีนเป็นหมู่ให้อิเล็กตรอน ส่วนค่าพลังงานกระตุ้นของทั้ง 2 โมเลกุลมีค่าใกล้เคียงกันโดยโครงสร้างของสีย้อมไวแสงที่มีไคเมทิลอนิสีนเป็นหมู่ให้อิเล็กตรอนจะมีค่าต่ำกว่าสีย้อมที่มีหมู่ให้อิเล็กตรอนเป็นไตฟีนิลอนิสีนเล็กน้อยนั่นคือ 2.63 และ 2.65 อิเล็กตรอนโวลต์ตามลำดับ

3. จากการศึกษาเปรียบเทียบอิทธิพลของหมู่ส่งผ่านอิเล็กตรอน (Linker) ที่มีต่อคุณสมบัติพื้นฐานของสีย้อมไวแสงพบว่าเมื่อเพิ่มวงแหวนเบนซีนและไทโอพีนเข้าไปที่บริเวณหมู่ส่งผ่านอิเล็กตรอน อิเล็กตรอนยังคงเคลื่อนที่ไปยังบริเวณหมู่รับอิเล็กตรอน โดยวงแหวนเบนซีน เป็นหมู่ส่งผ่านอิเล็กตรอนที่ไม่ดีเนื่องจากโครงสร้างของเบนซีนมีความแข็งแรงทำให้เกิดการบิดตัวของโครงสร้างได้ยากทำให้การเคลื่อนที่ของอิเล็กตรอนเป็นไปได้ไม่ดี ส่งผลให้ค่าการดูดกลืนแสงอยู่ในช่วงความยาวคลื่นที่ต่ำ ส่วนวงแหวนไทโอพีนเหมาะสำหรับใช้เป็นหมู่ส่งผ่านอิเล็กตรอนเนื่องจากทำให้โครงสร้างของสีย้อมไวแสงมีค่าการดูดกลืนแสงในช่วงความยาวคลื่นที่มากขึ้นอย่างมาก อีกทั้งเมื่อเพิ่มหมู่ไทโอพีนมากขึ้น ยิ่งทำให้ค่าการดูดกลืนแสงมีค่าในช่วงความยาวคลื่นมากขึ้นด้วย โดยสีย้อมไวแสงที่มีหมู่ไทโอพีนจำนวน 3 หมู่ มีค่าการดูดกลืนแสงมากที่สุดที่ความยาวคลื่น 484 นาโนเมตร โดยมีพลังงานกระตุ้นเท่ากับ 2.21 อิเล็กตรอนโวลต์

4. จากการศึกษาการกระจายตัวของอิเล็กตรอนในสีย้อมไวแสงที่ยึดติดกับโครงสร้างของไททานเนียมไดออกไซด์ พบว่าอิเล็กตรอนของสีย้อมไวแสง มีแนวโน้มเคลื่อนที่ไปยังอนุภาคนาโนไททานเนียมไดออกไซด์ โดยลักษณะเช่นนี้เป็นลักษณะสำคัญของอิเล็กตรอน ซึ่งมีผลเหนี่ยวนำให้เกิดการไหลของกระแสไฟฟ้าในเซลล์แสงอาทิตย์ชนิดสีย้อมไวแสง

5. สีย้อมไวแสงที่สังเคราะห์หลังจากผ่านการออกแบบและคำนวณทางเคมีคอมพิวเตอร์แล้วเป็นสีย้อมไวแสงในกลุ่มอนุพันธ์ของไคเมทิลอนิสีนซึ่งมีหมู่ไทโอพีนเป็นตัวส่งผ่านอิเล็กตรอนทำการพิสูจน์เอกลักษณ์ด้วยเทคนิคยูวี-วิสิเบิล สเปกโทรสโคปี, นิวเคลียร์แมกเนติกเรโซแนนซ์, แมสสเปกโทรสโคปี และ อินฟราเรดสเปกโทรสโคปี เพื่อตรวจสอบความถูกต้องของโครงสร้างที่สังเคราะห์ได้ จากนั้นนำไปประกอบเป็นเซลล์แสงอาทิตย์ชนิดสีย้อมไวแสง โดยใช้แกมมา-บิวทิลแลคโตน เป็นสารละลายที่ในการแช่สีย้อม จากผลการทดสอบเพื่อ

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่าจะกรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ตัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

ศึกษาหาค่าประสิทธิภาพพบว่า เซลล์แสงอาทิตย์ชนิดสีย้อมไวแสงจากสีย้อมอินทรีย์ไวแสงในกลุ่มอนุพันธ์ไดเมทิลอนิซีนที่ได้จากการสังเคราะห์นั้นมีค่าประสิทธิภาพเท่ากับ 1.14 เปอร์เซ็นต์

#### ข้อเสนอแนะ

การพัฒนาสีย้อมอินทรีย์ไวแสงในกลุ่มไดเนอร์-พาย-ไซยาโนอะคริลิกแอซิดนั้น การพัฒนาที่หมู่ส่งผ่านอิเล็กตรอน นับเป็นส่วนสำคัญ ซึ่งนอกหมู่ไทโอฟิน ไทอะโซล และอิมิดาโซลแล้วยังมีหมู่อะโรมาติกอื่นๆ ซึ่งสามารถช่วยเพิ่มประสิทธิภาพสีย้อมไวแสงได้



เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่าจะกรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ตัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

## เอกสารอ้างอิง

- [1] B. O'Regan and M. Gratzel, "A low-cost, high-efficiency solar cell based on dye-sensitized colloidal TiO<sub>2</sub> films," *Nature*, vol. 353, pp. 737-740, 1991.
- [2] Hagfeldt, A.; Boschloo, G.; Sun, L.; Kloo, L.; Pettersson, H., *Dye-Sensitized Solar Cells*. *Chemical Reviews* 110 (11), 6595-6663, 2010.
- [3] D. Quick, "World record efficiency for organic based photovoltaic solar cells," December 5, 2010.
- [4] M. Grätzel, "Dye-sensitized solar cells" , *Journal of Photochemistry and Photobiology C: Photochemistry Reviews*4, pp. 145-153, 2003
- [5] Y.J. Chang, T.J. Chow, "Triaryl linked donor acceptor dyads for high-performance dye-sensitized solar cells" ,*Tetrahedron*, vol.65, pp. 9626-9632, 2009.
- [6] M. Liang, W. Xu, F. Cai, P. Chen, B. Peng, J. Chen and Z. Li, "New Triphenylamine-Based Organic Dyes for Efficient Dye-Sensitized Solar Cells", *J. Phys. Chem. C* vol. 111, pp.4465-4472, 2007.
- [7] J.K. Lee, S.M. Lee, S.B. Lee, K.H. Kim, S.E. Cho, S.I. Jang, S.H. Park, W.P. Hwang, M.H. Seo, M.R. Kim, "Syntheses of triphenylamine-based organic dyes and effects of their acceptor groups on photovoltaic performances of dye sensitized solar cells" ,*Current Applied Physics* vol.11 pp. 140-146, 2011
- [8] R. Katoh, K. Yaguchi, A. Furube, "Effect of dye concentration on electron injection efficiency in nanocrystalline TiO<sub>2</sub> films sensitized with N719 dye",*Chemical Physics Letters* vol.511 pp. 336-339, 2011
- [9] M. Murai, A. Furube, M. Yanagida, K. Hara, R. Katoh, "Near-IR transient absorption spectra of N3 dye as a probe of aggregation on nanocrystalline semiconductor films" *Chemical Physics Letters* vol.423, pp. 417-421, 2006

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่าจะกรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ตัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

- [10] Z. Ning, Q. Zhang, W. Wu, H. Pei, B. Liu,<sup>†</sup> and H. Tian, “Starburst Triarylamine Based Dyes for Efficient Dye-Sensitized Solar Cells” *J. Org. Chem.*, vol.73, pp. 3791–3797, 2008
- [11] Y.S. Yen, W.T. Chen, C.Y. Hsu, H.H. Chou, J. T. Lin, and M.C.P. Yeh, “Arylamine-Based Dyes for p-Type Dye-Sensitized Solar Cells” *Org. Lett.*, Vol. 13, No. 18, 2011
- [12] H. Tian, X. Yang, R. Chen, R. Zhang, A. Hagfeldt, and L. “Sun Effect of Different Dye Baths and Dye-Structures on the Performance of Dye-Sensitized Solar Cells Based on Triphenylamine”, *Dyes J. Phys. Chem. C*, vol.112, 11023–11033, 2008
- [13] T.H. Kwon, V. Armel, A. Nattestad, D. R. MacFarlane, U. Bach, S. J. Lind, K. C. Gordon, W. Tang, D. J. Jones, and A. B. Holmes Dithienothiophene (DTT)-Based Dyes for Dye-Sensitized Solar Cells: Synthesis of 2,6-Dibromo-DTT”, *J. Org. Chem.*, vol.76, pp. 4088–4093, 2011
- [14] D. P. Hagberg, T. Marinado, K.M. Karlsson, K. Nonomura, P. Qin, G. Boschloo,<sup>‡</sup> T. Brinck, A. Hagfeldt, and L. Sun, “Tuning the HOMO and LUMO Energy Levels of Organic Chromophores for Dye Sensitized Solar Cells” *J. Org. Chem.*, vol. 72, pp. 9550-9556, 2007
- [15] G. Li, K.J. Jiang, Y.F. Li, S.L. Li, and L.M. Yang, “Efficient Structural Modification of Triphenylamine-Based Organic Dyes for Dye-Sensitized Solar Cells” *J. Phys. Chem. C*, vol.112, 11591–11599, 2008
- [16] M. Liang, W. Xu, F. Cai, P. Chen, B. Peng,<sup>†</sup> J. Chen and Z. Li “New Triphenylamine-Based Organic Dyes for Efficient Dye-Sensitized Solar Cells” *J. Phys. Chem. C* vol. 111 ,pp. 4465-4472 2007.
- [17] C. Teng, X. Yang, C. Yang, H. Tian, S. Li, X. Wang, A. Hagfeldt and L. Sun, “Influence of Triple Bonds as  $\pi$ -Spacer Units in Metal-Free Organic Dyes for Dye-Sensitized Solar Cells” *J. Phys. Chem. C*, vol.114, pp. 11305–11313, 2010

- [18] Ardo, S.; Meyer, G. J., Photodriven heterogeneous charge transfer with transition-metal compounds anchored to TiO<sub>2</sub> semiconductor surfaces. *Chemical Society Reviews* 38 (1), 115-164,2009
- [19] Nazeeruddin, M. K.; De Angelis, F.; Fantacci, S.; Selloni, A.; Viscardi, G.; Liska, P.; Ito, S.; Takeru, B.; Grätzel, M., Combined Experimental and DFT-TDDFT Computational Study of Photoelectrochemical Cell Ruthenium Sensitizers. *Journal of the American Chemical Society*, 127 (48), pp.16835-16847,2005
- [20] Li, G.; Jiang, K.-J.; Li, Y.-F.; Li, S.-L.; Yang, L.-M., Efficient Structural Modification of Triphenylamine-Based Organic Dyes for Dye-Sensitized Solar Cells. *The Journal of Physical Chemistry C* 112 (30), pp. 11591-11599, 2008
- [21] Jihy Heo, J.; Oh, J.-W.; Ahn, H.-I.; Lee, S.-B.; Cho, S.-E.; Kim, M.-R.; Lee, J.-K.; Kim, N., Synthesis and characterization of triphenylamine-based organic dyes for dye-sensitized solar cells. *Synthetic Metals*, 160 (19–20), pp. 2143-2150.2010
- [22] Lee, J.-K.; Lee, S.-M.; Lee, S.-B.; Kim, K.-H.; Cho, S.-E.; Jang, S.-I.; Park, S.-H.; Hwang, W.-P.; Seo, M.-H.; Kim, M.-R., Syntheses of triphenylamine-based organic dyes and effects of their acceptor groups on photovoltaic performances of dye sensitized solar cells. *Current Applied Physics*, vol. 11 (1, Supplement), pp.140-S146,2011
- [23] Xu, W.; Peng, B.; Chen, J.; Liang, M.; Cai, F., New Triphenylamine-Based Dyes for Dye-Sensitized Solar Cells. *The Journal of Physical Chemistry C*, 112 (3), pp. 874-880, 2008
- [24] Cheng, Y.-J.; Yang, S.-H.; Hsu, C.-S., Synthesis of Conjugated Polymers for Organic Solar Cell Applications. *Chemical Reviews*, 109 (11), pp. 5868-5923,2009
- [25] K. Srinivasa,b , C.R. Kumara , M.A. Reddya,b , K. Bhanuprakash, V.J. Raob, L. Giribabu, *Synthetic Metals*, 161, pp. 96–105,2011
- [26] K. Srinivas, G. Sivakumar, Ch. R. Kumar, M.A. Reddy, K. Bhanuprakash, V. J. Rao, C.W. Chen, Y.C. Hsu, J. T. Lin, *Synthetic Metals* 161, pp. 1671– 1681,2011

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า  
ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ตัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

- [27] Kay and M. Grätzel, "Low cost photovoltaic modules based on dye sensitized nanocrystalline titanium dioxide and carbon powder," *Solar Energy Materials and Solar Cells*, vol. 44, pp. 99-117, 1996.
- [28] สำนักวิชาการพลังงาน, "เซลล์แสงอาทิตย์," in [Online].Available: [area3.energy.go.th:กระทรวงพลังงาน](http://area3.energy.go.th:กระทรวงพลังงาน).
- [29] วพรมอารักษ์และคณะ ., " เซลล์แสงอาทิตย์ชนิดสีย้อมไวแสง," วารสารวิชาการมหาวิทยาลัยอุบลราชธานี, vol. 9, พฤษภาคม สิงหาคม-2550.
- [30] Wikipedia, "พลังงานแสงอาทิตย์" Sunlight in [Online].Available: <http://th.wikipedia.org/wiki/พลังงานแสงอาทิตย์>
- [31] Wikipedia, Sunlight, in [Online].Available: <http://en.wikipedia.org/wiki/Sunlight>
- [32] พีรภิตดี คมสัน, "เซลล์แสงอาทิตย์กับสีย้อมไวแสงจากพืชในประเทศไทย .มข .วิทย.ว ",35(4) 205-214, 2550
- [33] P. Komson . "Solar cells and dye-sensitizer from Thai plants" *KKU Sci. J.*35(4) 205-214,2007
- [34] R. Tarsang, V. Promarak, T.Sudyoadsuk, S. Namuangruk, S. Jungsuttiwong, "Tuning the electron donating ability in th triphenylamine-base D- $\pi$ -A architecture for highly efficient dye-sensitized solar cells", *journal of photochemistry and photobiography A: Chemistry*, vol 273 pp 8-16, 2014
- [35] M. J. Frisch, G. W. Trucks, H. B. Schlegel, G. E. Scuseria, M. A. Robb, J. R. Cheeseman, G. Scalmani, V. Barone, B. Mennucci, G. A. Petersson, H. Nakatsuji, M. Caricato, X. Li, H. P. Hratchian, A. F. Izmaylov, J. Bloino, G. Zheng, J. L. Sonnenberg, M. Hada, M. Ehara, K. Toyota, R. Fukuda, J. Hasegawa, M. Ishida, T. Nakajima, Y. Honda, O. Kitao, H. Nakai, T. Vreven, J. A. Montgomery, Jr., J. E. Peralta, F. Ogliaro, M. Bearpark, J. J. Heyd, E. Brothers, K. N. Kudin, V. N. Staroverov, R. Kobayashi, J. Normand, K. Raghavachari, A. Rendell, J. C. Burant, S. S. Iyengar, J. Tomasi, M. Cossi, N. Rega, J. M. Millam, M. Klene, J. E. Knox, J. B. Cross, V. Bakken, C. Adamo, J. Jaramillo, R. Gomperts, R. E. Stratmann, O. Yazyev, A. J. Austin, R. Cammi, C. Pomelli, J. W. Ochterski, R. L. Martin, K.

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้าไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ตัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

Morokuma, V. G. Zakrzewski, G. A. Voth, P. Salvador, J. J. Dannenberg, S. Dapprich, A. D. Daniels, Ö. Farkas, J. B. Foresman, J. V. Ortiz, J. Cioslowski, and D. J. Fox, Gaussian, Inc., *Wallingford CT*, 2009.



เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า  
ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ตัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

## ประวัติผู้เขียน

ชื่อ(ภาษาไทย)	นายภควัต จิตตระทาน
ชื่อ(ภาษาอังกฤษ)	Pakawat Chittratan
วัน/เดือน/ปี เกิด	30 มิถุนายน 2531
ที่อยู่	41 หมู่ 2 ตำบลหนองปากโลง อำเภอเมือง จังหวัดนครปฐม 73000
ประวัติการศึกษา	ระดับมัธยมศึกษา : โรงเรียนพระปฐมวิทยาลัย ปีที่สำเร็จการศึกษา : 2548 ระดับปริญญาตรี : คณะวิศวกรรมศาสตร์และเทคโนโลยีอุตสาหกรรม ภาควิชาวิทยาการและวิศวกรรมวัสดุ สาขาวิชาปิโตรเคมีและวัสดุพอลิเมอร์ มหาวิทยาลัยศิลปากร วิทยาเขตพระราชวังสนามจันทร์ ปีที่สำเร็จการศึกษา : 2552 ระดับปริญญาโท : วิทยาลัยนาโนเทคโนโลยีพระจอมเกล้าลาดกระบัง สาขา นาโนวิทยาและนาโนเทคโนโลยี สถาบันเทคโนโลยีพระจอมเกล้าเจ้าคุณ ทหารลาดกระบัง ปีที่สำเร็จการศึกษา : 2556

### ผลงานวิจัยและการตีพิมพ์ในวิทยานานาชาติ

1. เข้าร่วมการประชุมวิชาการระดับนานาชาติที่ Pure and Applied Chemistry International Conference (PACCON2012) วันที่ 11-13 มกราคม 2555 ณ ศูนย์ประชุมนานาชาติ โรงแรมดิเอ็มเพรส จังหวัดเชียงใหม่ จัดโดยภาควิชาเคมี คณะวิทยาศาสตร์ มหาวิทยาลัยเชียงใหม่ ชื่อผลงานที่นำเสนอคือ "Theoretical Investigation of Phenol as An Electron Donor of Dye Sensitizers Using DFT Calculations." นำเสนอแบบ Oral presentation

2. เข้าร่วมการประชุมวิชาการระดับชาติ การประชุมวิชาสมาคมฟิสิกส์ไทย ครั้งที่ 7 ประจำปี 2555 (Siam Physics Congress SPC 2012) วันที่ 9-12 พฤษภาคม 2555 ณ โรงแรมกรุงศรีริเวอร์ จังหวัดพระนครศรีอยุธยา ชื่อผลงานที่นำเสนอคือ "Effects of Donor Moieties of Triphenylamine Based Organic Dyes: Application in Dye-Sensitized Solar Cells"

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่าจะกรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ตัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

นำเสนอแบบ Poster presentation และได้รับการตีพิมพ์ใน Thai journal of physics, Series 8,(2012) หน้า 72-74

3. เข้าร่วมการประชุมวิชาการนานาชาติด้านวิศวกรรมศาสตร์ วิทยาศาสตร์ประยุกต์ และ เทคโนโลยี (International Conference on Engineering, Applied Sciences, and Technology: ICEAST 2007) วันที่ 21-23 พฤศจิกายน 2550 ณ โรงแรม Swissotel Le Concorde กรุงเทพฯ จัดโดย สถาบันเทคโนโลยีพระจอมเกล้าเจ้าคุณทหารลาดกระบัง ชื่อผลงานที่นำเสนอ “Efficeincy Improvement of Triphenylamine-Based Organic Dyes in DSSCs, An Effects of Linker Moiety” นำเสนอแบบ Poster presentation และได้รับการตีพิมพ์ใน Advanced Materials Reseach Vol. 802(2013) หน้า 257-261



เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า  
ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ตัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้