

有机染料敏化剂JK16和JK17的几何结构、电子结构及相关性质

张材荣; 吴有智; 陈玉红; 陈宏善

兰州理工大学理学院应用物理系, 兰州 730050; 兰州理工大学材料科学与工程学院, 兰州 730050; 西北师范大学物理与电子工程学院, 兰州 730070

摘要:

运用密度泛函理论中的杂化泛函B3LYP研究了高效太阳能电池新型染料敏化剂JK16和JK17的几何结构、电子结构、极化率和超极化率, 并用含时密度泛函理论(TDDFT)研究了电子吸收谱. 基于含时密度泛函理论计算结果和实验结果的定性符合, 指出了在可见和近紫外区的吸收属于 $n \rightarrow n^*$ 跃迁. 计算结果还表明JK16和JK17激发能最低的三个跃迁都与光诱导电荷转移过程有关, 而且二-二甲基苄氨基苯并噻吩基团对光电转换过程的敏化起主要作用, 发生于染料敏化剂JK16、JK17和TiO₂界面之间的电荷转移是由染料分子激发态向半导体导带的电子注入过程. 此外, 通过对JK16和JK17的比较, 分析了亚乙烯基对几何结构、电子结构和谱学特性的影响.

关键词: 染料敏化剂 电子结构 密度泛函理论 吸收谱

收稿日期 2008-07-29 修回日期 2008-10-08 网络版发布日期 2008-11-20

通讯作者: 张材荣 Email: zhcrxy@lut.cn

本刊中的类似文章

Copyright © 物理化学学报

扩展功能

本文信息

PDF(1177KB)

服务与反馈

把本文推荐给朋友

加入我的书架

加入引用管理器

引用本文

Email Alert

文章反馈

浏览反馈信息

本文关键词相关文章

▶ 染料敏化剂

▶ 电子结构

▶ 密度泛函理论

▶ 吸收谱

本文作者相关文章

▶ 张材荣

▶ 吴有智

▶ 陈玉红

▶ 陈宏善