



وزارة التعليم العالي والبحث العلمي

جامعة ديالى

كلية العلوم

قسم الكيمياء

استخدام نظرية دوال الكثافة في تقييم كفاءة الصبغات العضوية كمتحسسات للخلايا الشمسية

رسالة ماجستير مقدمة الى مجلس كلية العلوم في جامعة ديالى

وهي جزء من متطلبات نيل درجة الماجستير علوم في الكيمياء

من قبل

نبأ برهان علي

بكالوريوس علوم كيمياء/ جامعة ديالى 2011

بإشراف

أ.د. عامر فاضل داود النعيمي

أ.م.د. صلاح الدين جاسم حمادي

الفصل الأول

المقدمة

الفصل الأول

المقدمة

Introduction

1-1 المقدمة

تُعدّ الطاقة ضرورية لجميع مظاهر الحياة الإنسانية، فمنذ بداية القرن الماضي ارتفع مطلب الطاقة بسرعة وذلك يعود إلى تزايد أعداد السكان في العالم مما أدى إلى نضوب الوقود المستخرج [1]. إنّ استعمال الوقود المستخرج له العديد من الآثار السلبية أيضاً على البيئة والتركيز المتزايد لغازات الاحتباس الحراري بسبب احتراق الوقود المستخرج له أثر مهم في التغيرات التي تطرأ على المناخ، من المتوقع أن الاستهلاك العالمي للطاقة سوف يزداد في المستقبل القريب لذلك أصبحت مصادر الطاقة المتجددة النظيفة بيئياً مطلباً عالمياً مهماً ويعود ذلك إلى العوامل الاقتصادية والمخاوف البيئية ووفرته في الطبيعة [2].

إنّ الطاقة المتجددة لها مسميات عديدة ك: (الطاقة البديلة، المستدامة، النظيفة، الآمنة، الهادئة، الصديقة للبيئة) وكلها (مسميات تعكس صفاتها) ومصادرها لا تنضب ولا تنفذ على العكس تماماً من مصادر الطاقة التقليدية (البترو، الفحم والغاز الطبيعي) ومن بين مصادر الطاقة المتجددة: (الرياح، الماء، الشمس، طاقة الكتلة الحيوية، الطاقة الجوفية لحرارة باطن الأرض، طاقة المد والجزر) [3].

Solar energy

1-2 الطاقة الشمسية

إنّ الطاقة الشمسية مصدراً مهماً للطاقة المتجددة مستقبلياً إذ إنّ الطاقة المزودة من الشمس في ساعة واحدة أكبر من استهلاك الطاقة عالمياً في سنة كاملة على أي حال، إمتصاص الطاقة الشمسية وتحويلها إلى الطاقة الكيميائية أو الكهربائية بشكل كفوء بالكلفة المنخفضة ما زالت تحدي كبيراً [4].

الخلايا الفولتاضوئية photovoltaic إحدى الأدوات المستعملة لامتصاص الطاقة الشمسية. إنّ الخلايا الفولتاضوئية التي أساسها السليكون البلوري المستعملة على نحو واسع في الوقت الحاضر ذات كفاءات تحويل كهرباء تقريبا 25%، إنّها الآن تبلغ حالة التطوير التقني ولكن الكلفة العالية للتصنيع تحدد منافستها مع مصادر الطاقة التقليدية لذا تلاقي الخلايا الفولتاضوئية المربحة اهتماماً هائلاً [5].

لقد تمت دراسة مواد لاعضوية مختلفة مثل السليكون البلوري , Ga As , Cd Te ؛ وظهر أنها تعطي كفاءات (10-32)% لكن سميّة و ندرة هذه المواد تؤدي الى تحديد استعمالها على نطاق واسع[6].

وفي العام 1990 دُرس على نطاق واسع تأثير الخلايا الفولتاضوئية ذات أساس عضوي لحصاد الضوء او نقل حامل الشحنة. بما إن المواد العضوية متوافرة جدا فإن هذا قد يؤدي إلى كلفة منخفضة نسبيا لصناعتها، إن كفاءتها في الوقت الحاضر أوطأ من تلك المستندة على المواد اللاعضوية[7,8].

3-1 الخلية الشمسية المتحسسة الصبغة (DSSC)

Dye Sensitized Solar Cell

إخترع البروفيسور جرازيل Grätzel الخلايا الشمسية ذات الأصباغ المتحسسة عام 1991 ، وهي تعود إلى الخلايا الفولتا ضوئية التي أساسها عضوي (الجيل الثالث)، وتستعمل جزيئات لامتصاص الفوتونات[9]. وقد قام الباحث مع مجموعته بتصميم خلايا مستندة على معقد الروثينيوم ورقيقة TiO_2 النانومسامي والمحفزة بأشبه الموصلات نوع (n-type DSSCs) مثل TiO_2 ، ZnO وبكفاءة تحويل أكثر من 11% [10]. تتكون (n-type DSSCs) من أنود فعال ضوئي وكاثود غير فعال إذ يحقن الإلكترون من الصبغة المثارة إلى حزمة التوصيل لشبه الموصل n. وبالعكس إنّ أساس عمل p-type شبه الموصل بالإمكان تحفيزه أيضاً بوصفه كاثوداً ضوئياً وبالإمكان تجميعها (p-type DSSCs) ومثال عليها NiO [11].

وهذا النوع من الخلايا ممكن صنعها من مواد رخيصة متوافرة على خلاف الخلايا الشمسية التقليدية إذ تتألف من خمسة عناصر [12] :

1- الزجاج الموصل الشفاف ITO,FTO

تم ترتيب قطبين من الأقطاب الموصلة الشفافة الزجاجية بهيأة سندويتش وكل طبقة لها وظيفة معينة في الخلية تظلي إحداها طبقة رقيقة من الدقائق النانوية لأوكسيد التيتانيوم (الأنود الضوئي) والأخرى تظلي مثلا بالبلاطين أو الكربون (القطب المساعد).

2- الدقائق النانوية لـ TiO_2 .

3- جزيئات الصبغة (معقدات الروثينيوم ، الأصباغ الصناعية ، الأصباغ الطبيعية).

4- الألكتروليت I^-/I_3^- .

5- القطب المساعد إما بلاطين أو كربون.

1-3-1 آلية عمل الخلية الشمسية المتحسسة للصبغة [13,14]

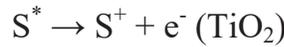
Mechanism of dye-sensitized solar cell

إن آلية عمل الخلايا الشمسية مشابهة لعملية التركيب الضوئي في النباتات إذ إن الضوء يتحول إلى طاقة كيميائية. الفوتونات التي تمتلك طاقات مختلفة في ضوء الشمس تصطدم بالخلية وتنفذ إلى طبقة الصبغة الممتزة على المادة الزجاجية ITO والمادة النانوية TiO_2 فإذا كانت طاقة الفوتون الساقط قريبة من فجوة الطاقة لجزيئة الصبغة فذلك يعني اختلاف الطاقة بين مستويات الاوربيبتالات الجزيئية الأعلى انشغالا HOMO والاوربيبتالات الاوطا انشغالا LUMO والذي يؤدي إلى انتقال إلكترون واحد لجزيئة الصبغة من مستوى HOMO إلى مستوى LUMO. الإلكترون المثار يتم إدخاله إلى حزمة توصيل TiO_2 من خلال ارتباطات الأواصر بين الصبغة و TiO_2 ووفق الخطوات الآتية:

1-المتحسسات الضوئية تثار من الحالة المستقرة (S) إلى الحالة المثارة (S^*)



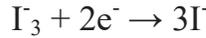
2-الالكترونات المثارة تدخل إلى حزمة التوصيل للقطب TiO_2



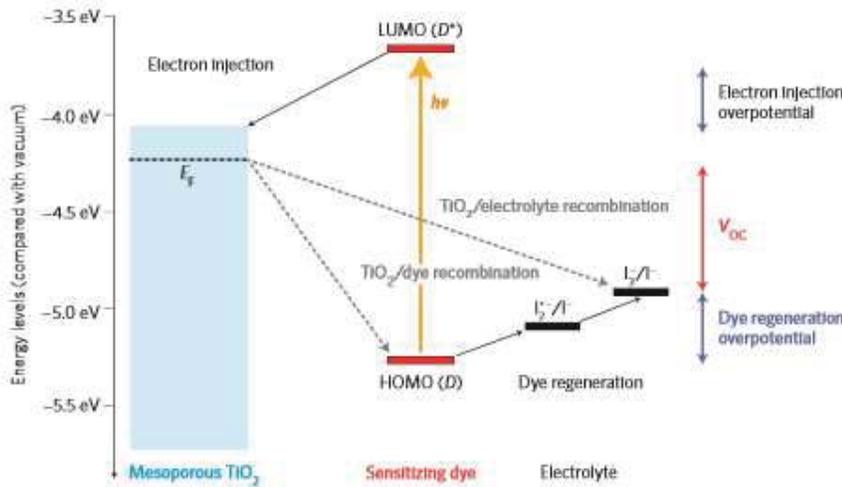
3-الالكترونات التي تم إدخالها تنتقل بين دقائق TiO_2 النانوية والقطب المساعد Auxillary.

4-المتحسسات الضوئية المؤكسدة (S^+) تستقبل الالكترونات من أيون وسيط الأكسدة والاختزال.

5-ينتشر وسيط الأكسدة والاختزال المؤكسد نحو القطب المساعد ويختزل إلى أيونات I^-



والشكل (1-1) يمثل آلية عمل الخلية الشمسية DSSC



الشكل (1-1) مخطط يبين آلية عمل الخلية الشمسية DSSC [15]

1-4 الأصباغ Dyes

إن الأصباغ المتحسسة للضوء تُعد مكوناً أساسياً لامتصاص الضوء في الخلايا الشمسية المتحسسة للأصباغ؛ إذ تحول الضوء الساقط عليها إلى تيار كهربائي [16].

وأن هذه الأصباغ تحتوي على مجاميع هيدروفيلية hydrophilic ومن هذه المجاميع $-COOH, -SH, -PO_3OH, -OH$ وهذه المجاميع تُعد مهمة جداً للتصميم الثابت للأصباغ المستعملة في الـ DSSC والأصباغ التي تمتلك مجاميع وظيفية تكون إحدى العلامات المميزة بوصفها مؤشراً جيداً للأصباغ التي يتم البحث عنها [17].

1-4-1 أنواع الأصباغ المتحسسة [16] Types of dyes sensitizers

تصنف الأصباغ المتحسسة إلى نوعين من الأصباغ وهي اللاعضوية والعضوية تستعمل الأصباغ اللاعضوية في الخلايا الشمسية بصورة معقد فلز كمعقدات الروثينيوم أما الأصباغ العضوية فتتألف أساساً من الأصباغ الطبيعية المستخلصة.

1-4-1-1 الأصباغ اللاعضوية Inorganic dyes

وتعرف أيضاً بمتحسسات معقدات الفلز وهي تمتلك اثنين من الليكنادات الرابطة والمساعدة وان الليكنادات الرابطة يتم من خلالها امتصاص الليكند على سطح شبه الموصل أما الليكند المساعد وهو الأكثر أهمية إذ يتم ضبط الخصائص الشاملة للمعقد من خلاله وتتضمن المعقدات الآتية:

1-معقدات الروثينيوم والاوزميوم Ruthenium and Osmium

إن معقدات الـ polypyridyl لأصباغ الروثينيوم من الأصباغ الأكثر كفاءة وتتضمن الأصناف الآتية من الأصباغ:

a. Carboxylate polypyridyl ruthenium

b. Phosponate ruthenium

c. Polynuclear bipyridyl ruthenium

وأيضاً معقدات الروثينيوم الثنائية والثلاثية (II) and (III) Ruthenium تستخدم بصفقتها متحسسات كفاءة وذلك يعود بسبب عرض حزم الامتصاص، الاستقرار الكيميائي طويل المدى لكن المشكلة تكون من ناحية غلاء ثمنه فهو من المعادن الأرضية وطرق إنتاجه تكون معقدة وكمياته قليلة [18].

أما معقدات الاوزميوم Osmium فوجدت كفاءتها أقل بـ 50% من معقدات الروثينيوم لكنها تمتاز بامتلاكها استقرارية كيميائية ضوئية كبيرة مشابهة للصبغة السوداء [19].

2-معقدات الفلزات الأخرى

من معقدات الفلزات الأخرى التي تستخدم متحسسات في الخلايا الشمسية هي النحاس، الحديد، الأريديوم الثلاثي، والروديوم.

2-1-4-1-2 الأصباغ العضوية Organic dyes

وتعرف أيضا بالأصباغ الطبيعية وتستخدم متحسسات في الخلايا الشمسية المتحسسة للأصباغ كالسينين [20] والكاروتين [21] والتانين [22] والكلوروفيل [23] ويمكن الحصول على الأصباغ الطبيعية من الفواكه، الأزهار، أو الأوراق. وهذه الأصباغ هي أصباغ صديقة للبيئة وتم أنتاجها منذ زمن بعيد للخلايا الشمسية المتحسسة للأصباغ.

1-مصادرها

تُعدّ النباتات المصدر الرئيس للأصباغ الطبيعية؛ وتستخلص هذه الأصباغ منها لكن عملية الاستخلاص تواجه العديد من التحديات من أبرزها هو كون معظم مصادر الأصباغ هي نباتات موسمية وهناك مشكلة أخرى تتمثل في كيفية المحافظة على الصبغة بعد استخلاصها [24].

2-أنواعها [16]

تقسم الأصباغ الطبيعية إلى أربع مجاميع رئيسة هي:

Betalains, Flavonoids, Chlorophylls, Carotenoids

1-البيتالائينات Betalains

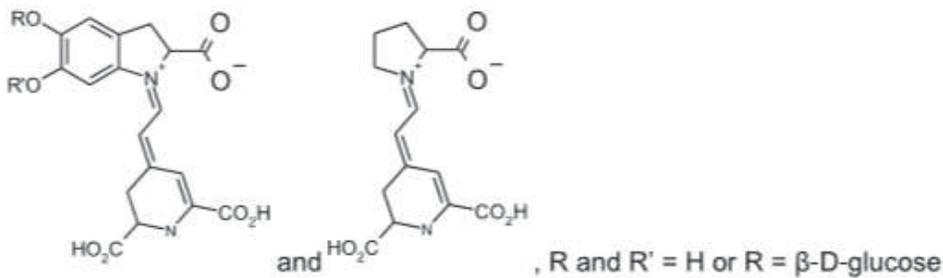
إن صبغات البيتالائين اشتقت من حامض البيتالاميك وتقسم إلى مجموعتين هما

Red betacyanins, Yellow betaxanthins

ويُعدّ البيتاسيانين ذو اللون الأحمر المركب الأكثر أهمية للبيتالائين وهو موجود في الجذور، الزهور، الثمار والأنسجة للنباتات .

وان البيتالائين قابل للذوبان في الماء والمركبات الحاوية على نترات وحمضات المشتقة من أمينو أسيد تايروسين وهذه الصبغة تظهر امتصاص قوي للضوء مما يجعلها تستخدم في الخلايا الشمسية.

الشكل (1-2) يبين التركيب الكيميائي للبيتالائين [25]



الشكل (1-2) التركيب الكيميائي للبيتالائين

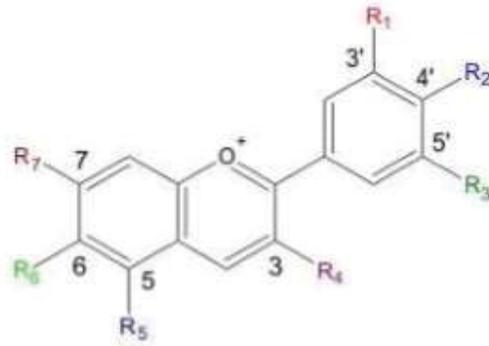
2- الفلافونويدات Flavonoids

تشكل هذه المجموعة من الأصباغ مجموعة مهمة تم استخدامها في صناعة المواد الغذائية بسبب الألوان المتنوعة التي تمتلكها؛ إذ أن هذه المركبات مسؤولة عن اللون الجذاب في العديد من الثمار والخضار وتدرج ألوانها من الأبيض، إلى الأبيض المائل إلى الصفرة، إلى الأحمر، إلى الأرجواني ثم الأزرق ثم الأصفر.

يُعد الانثوسيانين هو المكون الأكثر شيوعاً في هذه المجموعة وهو مسؤول عن اللون الأحمر، البرتقالي والبنفسجي والذي يظهر في العديد من الزهور والثمار.

وتحتوي الانثوسيانينات على مجاميع الكربونيل والهيدروكسيل فعند استخدامها في الخلايا الشمسية فإن هذه المجاميع تتجه إلى السطح المسامي لطبقة TiO_2 مسببة انتقال الإلكترون من جزيئة الانثوسيانين إلى حزمة توصيل الـ TiO_2 [26].

الجدول (1-1) يبين مجموعة الانثوسيانينات والتركيب الكيميائي لها [27]



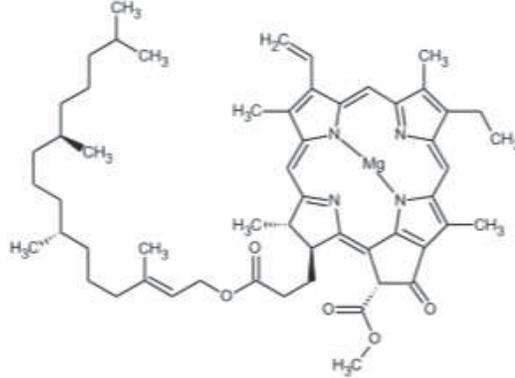
الشكل (1-3) التركيب الكيميائي للانثوسيانينات

الجدول (1-1) مجموعة الانثوسيانينات والمجاميع المرتبطة بها

Anthocyanidin	R ₁	R ₂	R ₃	R ₄	R ₅	R ₆	R ₇	main colour	E-number
Apigeninidin	-H	-OH	-H	-H	-OH	-H	-OH	orange	
Aurantidin	-H	-OH	-H	-OH	-OH	-OH	-OH	orange	
Capensinidin	-OCH ₃	-OH	-OCH ₃	-OH	-OCH ₃	-H	-OH	bluish-red	
Cyanidin	-OH	-OH	-H	-OH	-OH	-H	-OH	magenta	E163a
Delphinidin	-OH	-OH	-OH	-OH	-OH	-H	-OH	purple, blue	E163b
Europinidin	-OCH ₃	-OH	-OH	-OH	-OCH ₃	-H	-OH	bluish red	
Hirsutidin	-OCH ₃	-OH	-OCH ₃	-OH	-OH	-H	-OCH ₃	bluish-red	
Luteolinidin	-OH	-OH	-H	-H	-OH	-H	-OH	orange	
Pelargonidin	-H	-OH	-H	-OH	-OH	-H	-OH	orange, salmon	E163d
Malvidin	-OCH ₃	-OH	-OCH ₃	-OH	-OH	-H	-OH	purple	E163c
Peonidin	-OCH ₃	-OH	-H	-OH	-OH	-H	-OH	magenta	E163e
Petunidin	-OH	-OH	-OCH ₃	-OH	-OH	-H	-OH	purple	E163f
Pulchellidin	-OH	-OH	-OH	-OH	-OCH ₃	-H	-OH	bluish-red	
Rosinidin	-OCH ₃	-OH	-H	-OH	-OH	-H	-OCH ₃	red	
Triacetidin	-OH	-OH	-OH	-H	-OH	-H	-OH	red	

3- الكلوروفيلات Chlorophylls

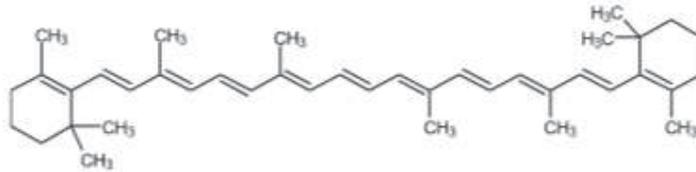
يمثل الكلوروفيل متحسس ضوئي فعال في عملية التركيب الضوئي في النباتات الخضراء وهو مركب فعال يمتاز بلونه الأخضر ويستخدم في الخلايا الشمسية المتحسسة للأصباغ [28]. والشكل (1-4) يبين التركيب الكيميائي للكلوروفيل [25].



الشكل (1-4) التركيب الكيميائي للكلوروفيل

4- الكاروتينويدات Carotenoids

صبغات عضوية توجد في كروموبلاست النباتات والكائنات الحية الدقيقة كالتحالب وبعض أنواع الفطر والبكتيريا [29] وهذه الصبغات مسؤولة عن اللون الأصفر، البرتقالي والأحمر للعديد من الأزهار، الفواكه، الخضراوات، الجذور والأوراق الخريفية [30]. والشكل (1-5) يبين التركيب الكيميائي للكاروتينويد [25].



الشكل (1-5) التركيب الكيميائي للكاروتينويد

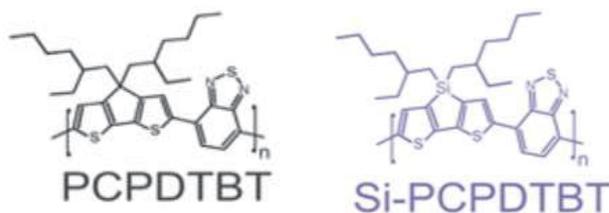
1-5 مواد فجوة الحزمة المنخفضة Low Band Gap Materials

يتم تصميم خلايا الطاقة الشمسية ذات الكفاءة العالية من مجموعة من المركبات الكيميائية ذات مواصفات خاصة تستلزم قلة الفرق الطاقي بين HOMO-LUMO وتستخدم عادة البوليمرات الحاوية على وحدات متعاقبة من مجموعات مانحة للإلكترونات ومجموعات ساحبة للإلكترونات فقد حضر الباحث Havinga ومجموعته بوليمرات من حامض squaric وحامض croconic كمواد مستقبلية (ساحبة للإلكترونات) وصبغات cyanine كمواد مانحة (دافعة للإلكترونات) وبنمط بوليمري متعاقب تمكن من خلاله الحصول على قيمة واطئه للفرق الطاقي بلغت

polythiophenes من بوليمرات Zhang ومجموعته بوليمرات من (1.2-0.5) eV وقد استخدم الباحث بصفتها وحدات متعاقبة من المجاميع الواهبة من الثايوفين الحاوية على الأمين أو المثوكسي وأخرى مستقبلية تحتوي على مجاميع الكيتون أو النايترول [31].

أما الباحث Chan وزملاؤه نشروا في سنة 2008 بوليمرات مستقرة تحتوي على مجاميع phenyl متبادلة مع أنصاف Thienopyrazine والذي له حزمة فجوة ضيقة مقدارها 1.47eV وتم الحصول على كفاءات لخلايا شمسية تزيد عن 0.63% [32].

إذ يتم الحصول على كفاءة عالية للخلية الشمسية من خلال صنع مواد ذات فجوة حزمة منخفضة ففي بداية سنة 2010 استخدمت PCPDTBT, Si_PCPDTBT بصفتها بوليمرات مزدوجة ذات فجوة حزمة منخفضة وهي مواد شائعة الاستخدام وملائمة لخصائص الامتصاص في منطقة تحت الحمراء القريبة والموضحة في الشكل (1-6) [33].



الشكل (1-6) التركيب الكيميائي لكل من PCPDTBT, Si_PCPDTBT

1-6 الكيمياء النظرية [34] Theoretical Chemistry

الكيمياء النظرية تعرف على أنها الترابط بين الطرق الرياضية والقوانين الأساسية للفيزياء لدراسة الخواص الكيميائية. فالجزيئات تحتوي على ذرات. وهذه بدورها تحتوي على بروتونات والكترونات ونواة. وهناك قوى كولومب تربط بين كل هذه المكونات وتختلف الجزيئات بالترتيب الهندسي لذراتها (geometrical positions) وكذلك إشكالها الفراغية (conformations)

وتتبنى الكيمياء النظرية دراسة ما يلي:

1- الأشكال الهندسية للجزيئة الأكثر استقرارا.

2- الطاقات النسبية.

3- مجموعة من الصفات مثل القطبية وعزم ثنائي القطب وأخرى.

4- كيفية تفاعلات الجزيئات المختلفة.

5- صفات وتراكيب الجزيئات مثل أبعاد الاوصر وقيم الزوايا.

6- الخصائص الطيفية مثل NMR و IR و UV-Visible.

1-6-1 النمذجة الجزيئية [35]Molecular Modeling

وتستخدم بشكل واسع لمعالجة الأنظمة الكيماوية والبيولوجية لفهم ودراسة سلوكها وصفاتها ولها تطبيقات كثيرة في حقول الكيمياء وعلوم المواد والعلوم الهندسية وخصوصا الهندسة الكيميائية والعلوم الطبية وغيرها .

هناك العديد من الطرق الحسابية التي تقع ضمن تصنيف Molecular Modeling وبالإمكان تناول المهم والشائع منها وكما يأتي:

1-طريقة هارترى فوك (HF) Hartree Fock

في هذه الطريقة وعلى الرغم من عنصر السرعة في تنفيذ حساباتها إلا أن من مساوئها هو إهمال تناثرات إلكترون - إلكترون مما يجعل الطاقات المحسوبة وفق هذه الطريقة أحيانا تكون أعلى من القيم الفعلية.

2-الطرق شبه التجريبية Semi-empirical

وتتطلب قيم تجريبية وتمتاز بسرعة تنفيذ حساباتها ولكن بدقة اقل وهي صالحة للجزيئات والأنظمة الكبيرة ومن هذه الطرق AM1 و MNDO و PM3.

3-طريقة Density Functional theory (DFT)

إن طريقة DFT تمتاز بأنها ذات دقة عالية في تنفيذ الحسابات وبالإمكان استخدامها في وصف حالة ground state للفلزات وشبه الموصلات والعوازل والأنظمة الكبيرة مثل البروتينات والكربون نوع nanotubes ونظرا لأهميتها فإن هناك العديد من القواعد المقترنة بها (basis set) والتي تحدد صلاحيتها لكل منظومة قيد الدراسة وأدناه موجز لتلك القواعد:

$$\{3-21G, 3-21G^*, 3-21+G, 3-21+G^*, 4-21G, 4-31G, 6-21G, \\ 6-31G, 6-31G^*, 6-31+G^*, 6-311G, 6-311G^*, 6-311+G^*\}$$

ويعتمد اختيار هذه القواعد على عدة عوامل منها دالة الاستقطاب ودالة الانتشار ونوع الذرة وغلافها التكافؤي وإمكانية تكوين أوامر هيدروجينية [36-38]، وكلما تصاعدت الأرقام في القواعد أعلاه اتجهت الحسابات الى الدقة والدقة المتناهية وهذا على حساب الوقت المستغرق لتنفيذ الحسابات وخصوصا الحواسيب الشخصية PC وقد تستغرق حساب جزيئة معينة عدة اسابيع.

1-7 الدراسات السابقة

1-7-1 البحوث السابقة الخاصة بتطبيق برامجيات Molecular Modeling في دراسة الخلايا الشمسية

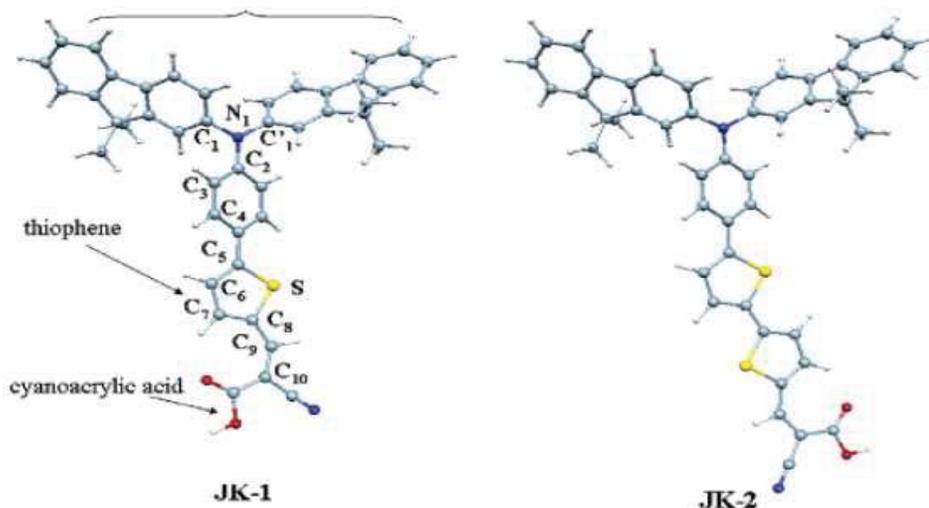
قام الباحث Sanghoon , L. وجماعته [39][2006] بتحضير مجموعة جديدة من المتحسسات العضوية من خلال ربط جسور بين المجموعة المانحة والمجموعة المستقبلية وذلك بإضافة مجموعة Thiophene جسراً في هذا البناء وتأثير ذلك على صفة molar extinction coefficient للصبغات قيد البحث .

الصبغات المدروسة هي:

[3-{5- [N,N-bis(9,9-dimethylfluorene-2-yl)phenyl]-thiophene-2-yl}-2-cyano-acrylic acid (JK-1)]

[3-{5'-[N,N-bis- (9,9-dimethylfluorene-2-yl)phenyl]-2,2'-bisthiophene-5-yl}-2-cyano-acrylic acid (JK-2)]

والمبينة في الشكل(1-7)



الشكل(1-7) الصبغات المدروسة بشكل ثلاثي الأبعاد

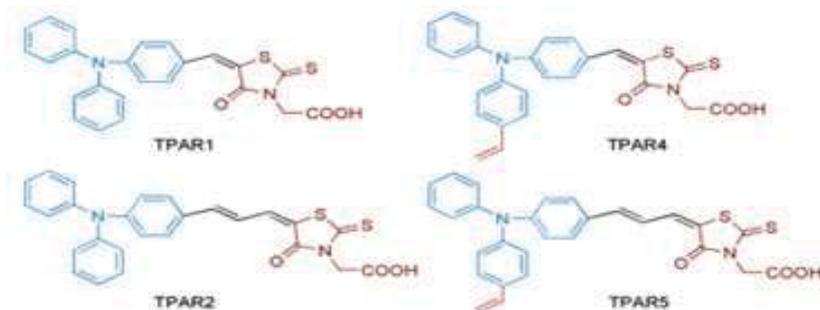
حصيلة هذه الجسور هي زيادة كفاءة المواصفات البصرية لهاتين المادتين؛ فقد تم الحصول على مواصفة عالية وأن IPCE بلغت 91% .

(IPCE وهي تمثل مقياس للفوتون الساقط الى كفاءة تحويل التيار)

في حين بلغت نسبة التحويل (power conversion efficiency) 8.01%

إذ استخدم الباحث طريقة TD-DFT/B3LYP/6-31G* في حسابات الحالة المثارة والمواصفات الطيفية للصبغات المستخدمة تعزيزاً للنتائج العملية المستحصلة.

قام الباحث Mao, L. وجماعته [40][2007] بتحضير سلسلة من مشتقات (TPA-triphenylamine) ومعرفة خصائصها الكهروكيميائية والضوئية. الأصباغ العضوية المحضرة والمستندة على TPA هي كل من (TPAR1,TPAR2,TPAR4 and TPAR5) والمبينة في الشكل(1-8)

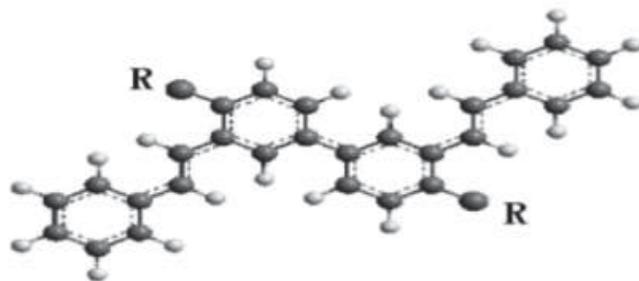


الشكل (1-8) أشكال الأصباغ العضوية المحضرة

وقد استخدمت في تطبيقات الخلايا الشمسية المتحسسة والتي تستخدم مادة شبه الموصل TiO_2 من نوع الدقائق النانوية.

إذ تحسن أداء هذه الصبغات وكفاءتها بإضافة مجموعة $CH_2=CH-$ الى الوحدة المانحة مما يؤدي الى زيادة الكثافة الالكترونية لهذه الوحدة وبالتالي زيادة كفاءتها الضوئية (photovoltaic performance) إضافة الى محاولة الباحث توسيع مدى الأواصر المتعاقبة π -conjugated بزيادة أطوال مجموعة وحدة الميثين (methine unit). نتائج هذا البحث تمخضت بالحصول على أعلى مواصفة ممكنة في صبغة TPAR4 لاستخدامها في الخلايا الشمسية حيث بلغت IPCE 81%، استخدم الباحث طريقة DFT/B3LYP/6-31+G(d) في حسابات HOMO-LUMO لتعزيز نتائجه العملية.

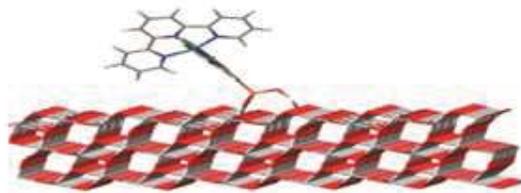
قام الباحث Liang, D. وجماعته [41][2007] بتطبيق نظرية دالة الكثافة والطريقة شبه التجريبية AM1 لدراسة التراكيب الالكترونية والخصائص الطيفية للمادة: PPV(paraphenylenevinylene) وتأثير المجاميع المعوضة Substituents (والمقصود بها R) في الشكل(1-9) على تغيير الصفة الرئيسية للصبغات المستخدمة في الخلايا الشمسية وهي LUMO-HOMO energy gaps إن كانت مجاميع دافعة مثل الالكيل أو تخضع لتأثير التعاقب أو الإعاقة الفراغية conjugated effect and steric effect.



الشكل (1-9) المركب PPV بشكل ثلاثي الأبعاد

قامت الباحثة Elena, J. وجماعته [2009][42] بإجراء دراسات انتقال الإلكترونات السطحية (IET) في سطوح TiO_2 الفعالة مع معقدات جزيئات الباييريدين الشكل (1-10)

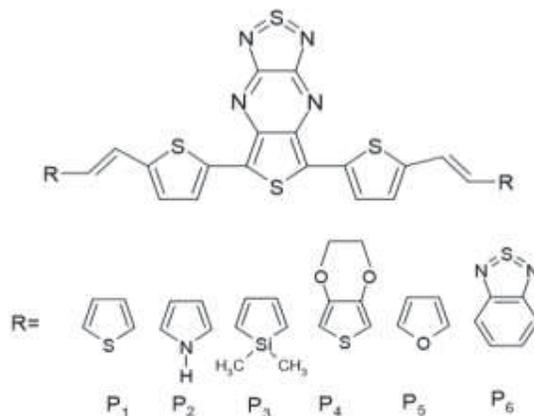
- (1) pyridine-4-phosphonic acid
 - (2) $[Ru(tpy)(tpy(PO_3H_2))]^{2+}$
 - (3) $[Ru(tpy)(bpy)(H_2O)-Ru(tpy)(tpy(PO_3H_2))]^{4+}$
- إذ إن: (tpy) = 2, 2':6,2''terpyridine; (bpy) = 2, 2'-bipyridine



الشكل (1-10) ارتباط المعقد بسطح TiO_2

وهي تُعدّ متحسسات ضوئية حيث قامت الباحثة بدراسة انتقال الإلكترون السطحي لسلسلة جزيئات الباييريدين المذكورة أعلاه والممتزة على سطح TiO_2 من خلال استخدام phosphonic acid بوصفها مجموعة رابطة ومن خلال إجراء الحسابات النظرية TD-DFT اقترح المعقد $Ru[(tpy)(tpy(PO_3H_2))]^{+2}$ كمعقد يمتلك حالات إثارة أحادية الاكثر شدة والتي تذهب (IET:interfacial electron transfer) أي إن الإلكترون سيستغرق فترة زمنية تقدر 1-10 ps لكي يدخل الى سطح شبه الموصل TiO_2 .

قام الباحث Bouachrin, M. وجماعته [2010][43] بتحضير ستة معقدات معتمدة على thiadiazolothienopyrazine وإجراء الحسابات النظرية لها بتطبيق نظرية DFT وهذه المعقدات في الشكل (1-11)



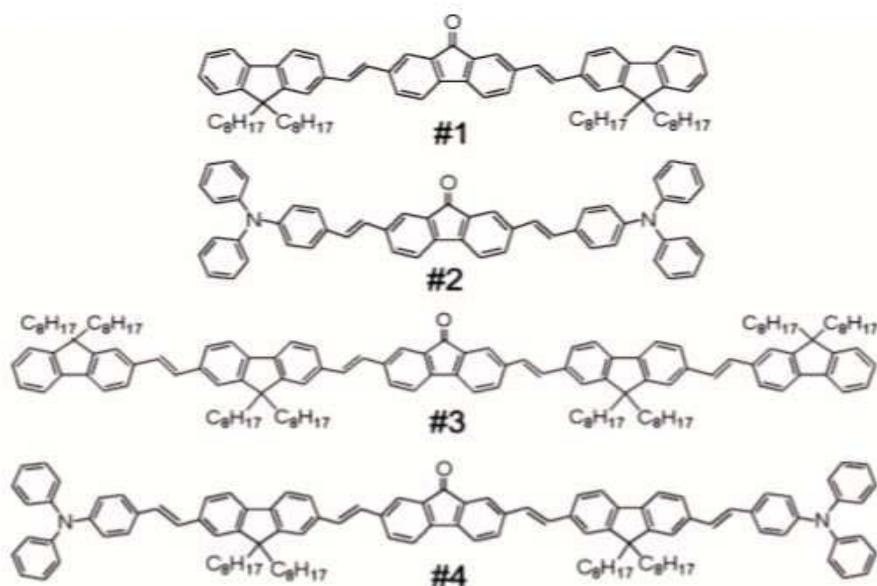
الشكل (1-11) التركيب العام للمعقدات المحضرة

ومن خلال الحسابات النظرية التي أجريت على هذه المعقدات تم الحصول على طاقة مستويات HOMO و LUMO إذ بينت النتائج المستحصلة إمكانية استخدام هذه المواد كمتحسسات ضوئية جيدة في الخلايا الشمسية بسبب إمكانية نقل الإلكترون من الجزيئة المثارة الى حزمة توصيل PCEM.

قام الباحث Belghiti , N. وجماعته [44][2012] بإجراء الحسابات الكيميائية الكمية بطريقة DFT/B3LYP على مجموعة مركبات مستندة على الانثراسين وان تأثير المجاميع المعوضة على المركبات وعلى الخصائص الالكترونية -الضوئية لهذه المواد هي HOMO, LUMO, Egap وكذلك Voc فولتية الدائرة المفتوحة جعلتها مرشحات جيدة بوصفها متحسسات ضوئية للخلايا الشمسية.

قام الباحث Jesús, B. وجماعته [45][2012] بإجراء دراسة نظرية على معقد النحاس polypyridine (Cu(I) biquinoline) حسابات DFT,TD-DFT تم إجراؤها على المعقد وتم الحصول على أعلى قمم الأطوال الموجية للامتصاص ومقارنتها مع النتائج العملية إذ وجد الباحث إن مستوى حسابات M06/LANL2DZ + DZVP يعطي أفضل نتيجة تقريبية.

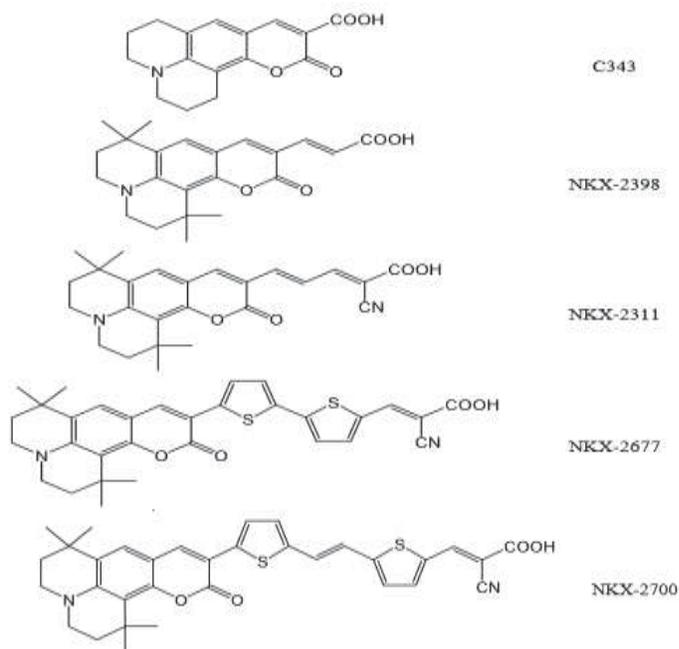
قام الباحث Tian-hao, H. وجماعته [46][2013] بدراسة تأثير π -spacer والمجاميع الواهبة للإلكترون على السلوك الفيزيائي الضوئي لـ Oligomers المتعاقبة الخطية لـ fluorenone-based الموضحة في الشكل (1-12)



الشكل (1-12) التركيب الكيميائي لمجموعة مركبات Fluorenone-based

إذ بينت النتائج التي حصل عليها الباحث إن fluorenone-based التي تمتلك the triphenylamine كمادة واهبة لها القابلية على وهب الإلكترون بصورة أقوى من المركبات الأخرى للقاعدة وإن الحسابات النظرية قد أنجزت من خلال طريقة TD-DFT/6-31G(d).

قام الباحث Corneliu, I. وجماعته [2013][47] بإجراء دراسة نظرية على أصباغ Coumarin-based والتي تمتلك التراكيب الجزيئية في الشكل (1-13)

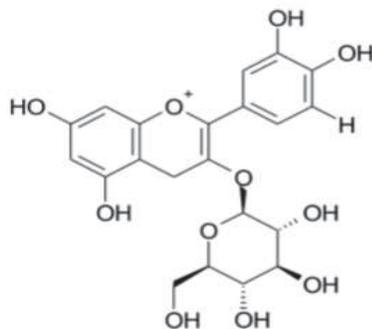


الشكل (1-13) التركيب الكيميائي لمجموعة أصباغ Coumarin-based

إذ بينت النتائج المستحصلة لصبغة NKX-2311 تأثير الجسور المتعاقبة وكذلك وجود cyanoacetic acid على زيادة سرعة انتقال الإلكترون وبالتالي زيادة كفاءة التحويل والتي تساوي 5.2% وهي أعلى من بقية الأصباغ الأخرى, الحسابات النظرية أجريت باستخدام طريقة DFT,TD-DFT فمنها تم معرفة التراكيب الالكترونية وأطياف UV-Vis للأصباغ المدروسة.

قام الباحث Muhammad, R. وجماعته [2014][48] بدراسة نظرية من خلال استخدام DFT,TD-DFT على مجموعة من الأصباغ القديمة وهي brazilin, brazilein, haematoxylin, haematein إذ تبين انه مجاميع الهيدروكسيل لها القابلية على الارتباط مع شبه الموصل إضافة الى الغيمة الالكترونية للأصباغ الأربعة وعند مستوى LUMO وجدت في مواقع قريبة مما يجعل سهولة إدخال الإلكترون الى شبه موصل الاوكسيد المعدني مما يجعل هذه الأصباغ ذات إمكانية جيدة في تطبيقات الخلايا الشمسية المتحسسة للأصباغ.

قام الباحث Rody, S. وجماعته [2014][49] بإجراء مقارنة بين العديد من الأنظمة للتنبؤ الحسابي للحصول على أعلى قمة امتصاص لصبغة Chrysanthemine وهي صبغة طبيعية تستخدم في الخلايا الشمسية المتحسسة للأصباغ وتركيبها في الشكل(1-14)

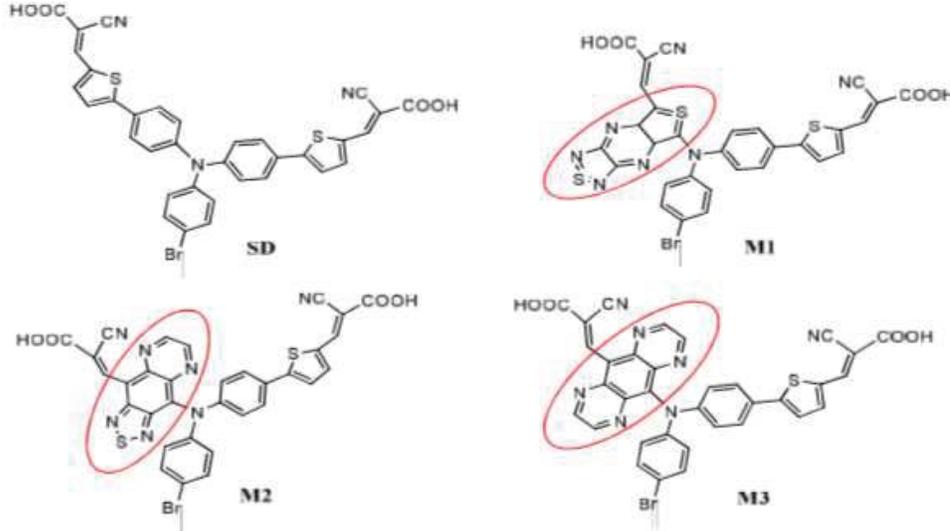


الشكل(1-14) التركيب الكيميائي لصبغة Chrysanthemine

الباحث هنا قام بدراسة أربعة أنظمة مختلفة للحصول على أفضل قيمة تقريبية لـ (λ_{max}) مع النتائج العملية والنتائج المستحصلة بينت إن مجموعة قواعد B3LYP, M06, PBE0 أعطت أفضل قيم تقريبية لأعلى قمة امتصاص للصبغة.

قام الباحث Amine, M. وجماعته [2014][50] بتحضير جزيئات صغيرة متعاقبة مستندة على وحدات Thiophene , Diphenylamine تم حساب طاقة فجوة الحزمة لها وتمثل الفرق بين

مستويات HOMO و LUMO إذ تبين انها واطئة وكذلك دراستها بطريقة الكيمياء الكمية من خلال DFT لمعرفة إمكانية استخدامها في الخلايا الشمسية وتمتلك التركيب في الشكل (1-15)



الشكل (1-15) التركيب الكيميائي لجزيئات مستندة على وحدات

Thiophene, Diphenylamine

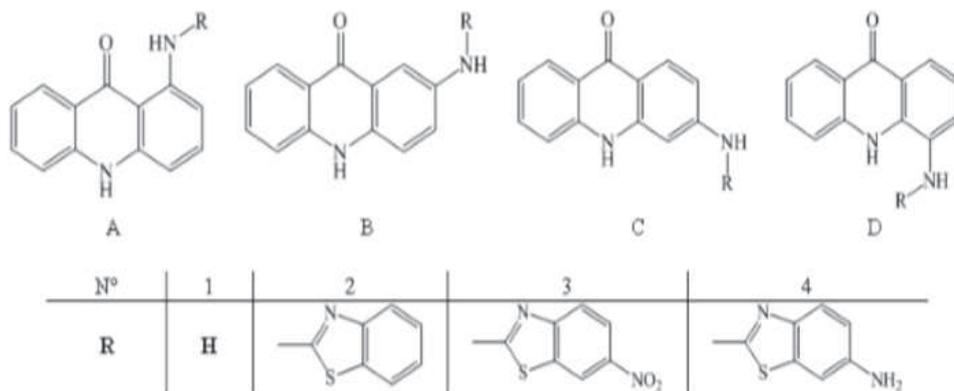
والجزيئات المؤشر عليها في الشكل أعلاه هي:-

- ThiadiazoloThienoPyrazine (TTP)
- BenzoThiadiazole-Pyrazine (BTP)
- BenzoPyrazine-Pyrazine (BPP)

تحتوي على مجاميع π -conjugated إذ تعمل على نقل الشحنة من إحدى المجاميع الرابطة الى سطح شبه الموصل و لها تأثير على الخصائص الالكترونية والضوئية للجزيئات فأظهرت النتائج أن المجموعتين (BTP, BPP) هما الأفضل في عملية نقلهما للشحنة لأحد المجاميع المرتبطة بسطح شبه الموصل.

قام الباحث Abram, T. وجماعته [51][2014] بإجراء دراسة نظرية باستخدام DFT على مجموعة جزيئات Pi-Conjugated والمعتمدة على Pyrimidine Derivative وكان للمجاميع المعوضة تأثير واضح على التركيب وعلى الخصائص الالكترونية والضوئية للمركبات ونتيجة لهذا التأثير فان جميع هذه الجزيئات ممكن استخدامها في الخلايا الشمسية بسبب إمكان انتقال الإلكترون من الجزيئات الى حزمة توصيل PCBM.

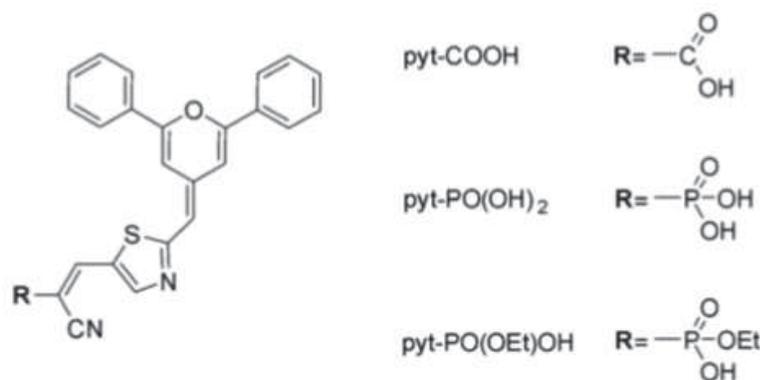
قامت الباحثة Hayat, S. وجماعتها [52][2014] بإجراء دراسة نظرية عن التركيب والخصائص photovoltaic لستة عشر مركباً متعاقباً معتمدة على الـ Acridine الشكل(1-16)



الشكل(1-16) التركيب الكيميائي للمركبات A,B,C,D

وإن حسابات الكيمياء الكمي اعتمدت على نظرية DFT بطريقة B3LYP وبقاعدة 6-31G(d) لكل الذرات المستخدمة وتم مناقشة تأثير المجاميع المعوضة المرتبطة الى حلقة الاكردين على الخصائص الهندسية والالكترونية للمركبات وقد بينت النتائج التأثير الواضح لهذه المجاميع على الخصائص التركيبية والضوئية لهذه المواد لذا تم اقتراحها في تطبيقات الخلايا الشمسية.

قام الباحث Antonio, A. وجماعته [53][2015] بتحضير مجموعة أصباغ هي Thiazole derivatives (pyt),4H-pyran-4-ylidene والمبينة في الشكل(1-17) ودراسة خواصها الالكترونية والضوئية نظريا



الشكل(1-17) التركيب الكيميائي لمجموعة أصباغ

Thiazole derivatives (pyt),4H-pyran-4-ylidene

إن صبغة pyt تحتوي على مجموعتين رابطتين هما carboxylic acid, phosphonic acid وتعمل هذه المجموع على جعل Voc للخلية عالي مما يجعلها كفوءة الاستخدام في الخلايا الشمسية.

قام الباحث Joseph, M. وجماعته [54][2015] بدراسة نظرية على مجموعة من الأصباغ الطبيعية التالية والمبينة في الشكل (1-18)

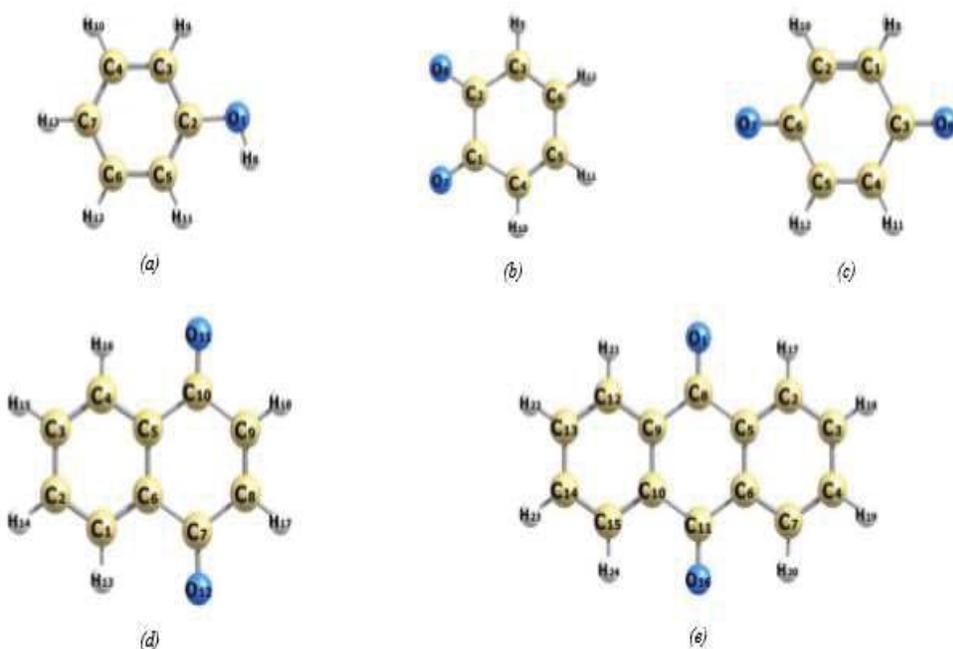
A- (Phenol)

B- (1,2-benzoquinone)

C- (1,4-benzoquinone)

D- (1,4-naphthoquinone)

E- (9,10-anthraquinone)

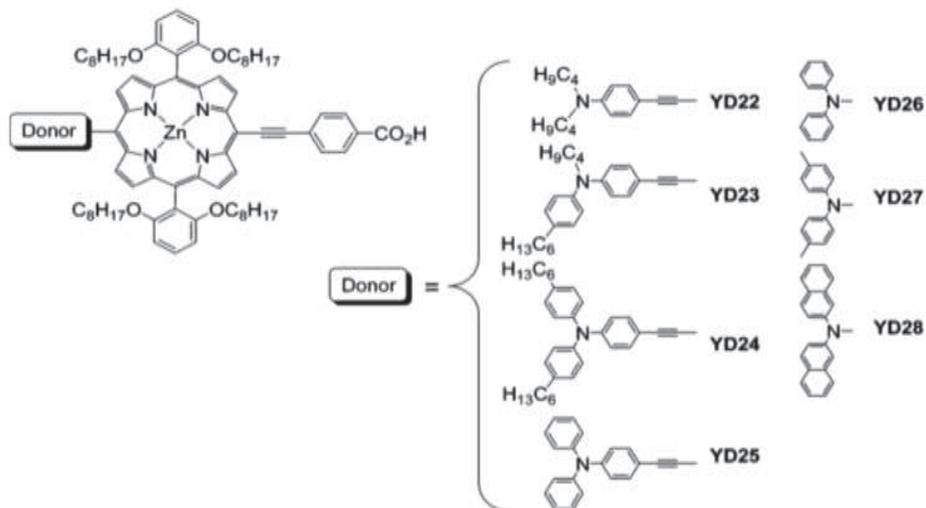


Optimized geometrical structures of the species: (a) phenol; (b) 1,2-benzoquinone; (c) 1,4-benzoquinone; (d) 1,4-naphthoquinone; (e) 9,10-anthraquinone.

الشكل (1-18) التركيب الكيميائي للمركبات (a-e)

الحسابات أجريت باستخدام DFT, TD-DFT وان الأطياف الاهتزازية والالكترونية حسبت من خلال استخدام مجموعة قواعد 6-311++G(d,p) والنتائج المستحصلة لحزم الامتصاص للجزيئات بينت إن صبغة 1,2-benzoquinone هي مرشح أفضل من بقية الأصباغ للاستخدام في الخلايا الشمسية لامتلاكها امتصاصية جيدة للضوء في المنطقة المرئية .

قام الباحث Hsien-Hsin, C. وجماعته [2016][55] بتحضير سلسلة أصباغ Zinc Porphyrin YD22–YD28 المبينة في الشكل (1-19) ودراستها نظريا باستخدام TD-DFT



الشكل (1-19) التركيب الكيميائي لأصباغ Porphyrin YD22–YD28

إذ بينت النتائج التي حصل عليها الباحث إن الأصباغ YD22–YD25 تمتلك كفاءة تحويل أعلى من بقية الأصباغ وذلك يعود الى وجود مجموعة PhenylEthyne (PE) الجسرية؛ إذ إن لها تأثيرات على الخواص الالكترونية والضوئية لهذه الجزيئات مما رفع من كفاءتها كمتحسسات في الخلايا الشمسية.

الباحث P. Kyung-Hee [56] من خلال دراسته بعض الأزهار [gardenia and cochineal] بين إن كفاءة صبغات هذه الأزهار كانت نتيجة للمدى الواسع للأطوال الموجية التي سجلت.

الباحث A. Hernández وجماعته [57] ومن خلال النتائج التي تم الحصول عليها وجدوا بان الخلية يكون لها القابلية الأوسع لامتصاص الفوتونات التي تمتلك طاقات مختلفة نتيجة الاختلاف في الأطوال الموجية.

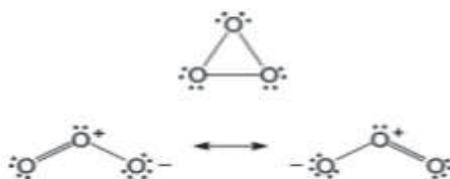
الباحث I. Mohammed وجماعته [58] ومن خلال دراسته مجموعة من الصبغات الطبيعية وهي Pawpaw Leaf and Flame Tree Flower اكتشف إن الامتصاصية الضعيفة للصبغات

الطبيعية في المنطقة red region تؤثر سلبا على كفاءة الصبغات كمتحسسات في الخلايا الشمسية، والمنطقة الحمراء تقع ضمن المدى 620-750 nm.

الباحث Bourass, M. وجماعته [59] وجدوا فيما يخص العلاقة بين الأطوال الموجية والتعاقب conjugated إن الامتصاصية تزداد بزيادة طول النظام المتعاقب conjugated length.

1-7-2 البحوث السابقة الخاصة بتطبيق برامجيات Molecular Modeling في دراسة تفاعلات المعقدات الكيميائية

قام الباحث Beate, F. وجماعته [60][2004] بدراسة نظرية لمعقدات العناصر الانتقالية التي تحتوي على الأوزون والثايوزون الحلقي والمفتوح كليكند والشكل (1-20) يبين التركيب الحلقي والمفتوح للأوزون

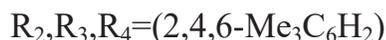


الشكل (1-20) التركيب الحلقي والمفتوح للأوزون

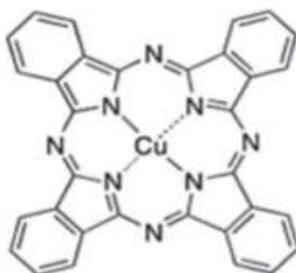
إذ بينت الدراسة النظرية التي أجراها الباحث إن الشكل الحلقي للأوزون أكثر استقرارا بقليل من الشكل المفتوح من خلال معرفة الخصائص والتراكيب الإلكترونية بطريقة DFT /6-31G من خلال برنامج Gaussian 03.

قام الباحث Mihaylov, T. وجماعته [61][2006] بدراسة نظرية باستخدام DFT ودراسة طيفية لتأصر فلز-ليكند بين (HCCA)coumarin-3-carboxylic acid وLa(III) إذ إن النتائج العملية اقترحت صيغة للمعقد هي $La(CCA)_2(NO_3)(H_2O)_2$ وان التحليل الاهتزازي المفصل للفلز والليكند والمعتمد على الترددات العملية والمحسوبة يؤكد نمط تأصر فلز-ليكند الذي تم اقتراحه.

قام الباحث Michael, G. وجماعته [2010][62] باستخدام مجموعة أصباغ Porphyrins و phthalocyanines لبيان مدى كفاءتهما في تطبيقات الخلايا الشمسية المتحسسة للأصباغ حيث تمتلك صبغة Porphyrins التركيب العام الشكل (1-21)



الشكل (1-21) التركيب الكيميائي لصبغة Porphyrin



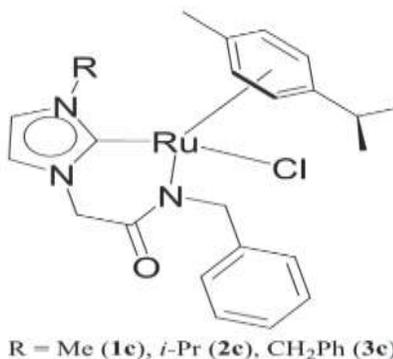
الشكل (1-22) التركيب الكيميائي لصبغة Copper Phthalocyanine

إذ بينت النتائج المستحصلة من صبغة Porphyrins الحصول على كفاءة تحويل 11% مما يعني كفاءتها في استخدامات الخلايا الشمسية.

قام الباحث Sachin, K. وجماعته [2011][63] بتحضير سلسلة معقدات جديدة لـ Ruthenium هي



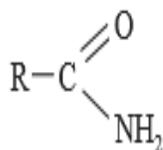
مبينة في الشكل (1-23)



الشكل (1-23) التركيب العام لمعقدات Ruthenium

وإجراء دراسة نظرية من خلال استخدام سلسلة برامج GAUSSIAN 03 وبطريقة DFT على هذه المعقدات وقد وضحت النتائج قوة التآصر بين ليكندات N-heterocyclic carbene (NHC) الى مركز الفلز وكذلك اقترح الباحث تمدد قليل للأوربيبتالات الجزيئية الملائمة لنقطة تداخل σ NHC-Ru تذهب باتجاه استقرارية اكبر لتآصر NHC-Ru في هذه المعقدات.

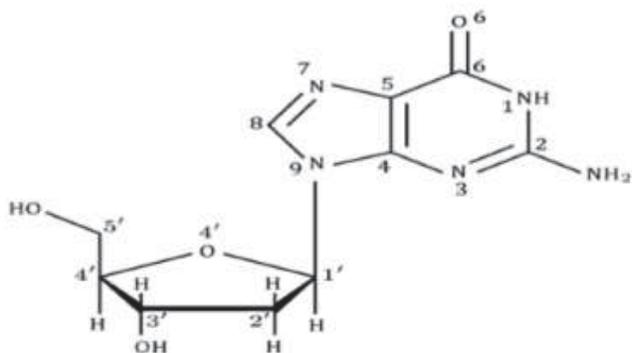
قام الباحث Singh, R. وجماعته [64][2011] بدراسة نظرية مستندة على DFT لدراسة التفاعل بين هاليدات Halides العناصر الانتقالية و Thioamides والتي تمتلك التركيب في الشكل (1-24)



الشكل (1-24) التركيب العام لـThioamides

إذ إن طاقات مستويات HOMO, LUMO بينت Thiazolidinethione يمتلك أعلى قابلية للوهب من بين Thioamides وكذلك إن الحديد هو أقوى مستقبل من بين العناصر الانتقالية المذكورة.

قام الباحث Ahmadi, M. وجماعته [65][2011] بدراسة نظرية لمعرفة مدى تأثير التآصر بين ايونات الفلزات Mg^{2+} , Ca^{2+} , Zn^{2+} , Cu^{+} وجزيئة السكر بالإضافة الى تقدير قوة أصرة N-glycosidic والشكل (1-25) يبين التركيب الكيميائي لـ 2'-deoxyguanosine



الشكل (1-25) التركيب الكيميائي لـ 2'-deoxyguanosine

إذ إن الحسابات النظرية أجريت باستخدام:-

DFT/6-311++G(d,p) لتحديد طبيعة التفاعلات الحاصلة.

قام الباحث Charity, F. وجماعته [66][2012] بدراسة نظرية بطريقة DFT لمعرفة الخصائص الهندسية وكذلك التأصر بين الفلز والليكند في معقدات النيكل المحتوية على

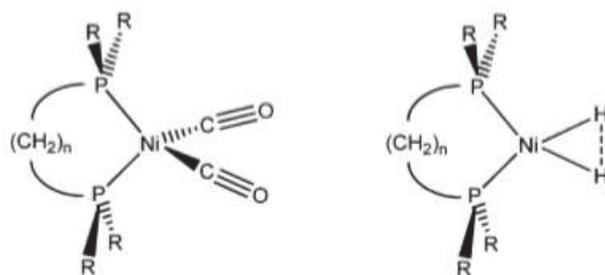
ثنائية السن phosphines



إذ إن:-

X = H, CO, n = 1-3, and R = H, Me, CF₃, Et, i-Pr, t-Bu, Ph, OMe, F

والشكل (1-26) يبين التركيب الكيميائي للمعقد



الشكل (1-26) التركيب الكيميائي لمعقد النيكل

إذ إن: n = 1-3, R = H, Me, CF₃, Et, i-Pr, t-Bu, Ph, OMe, F

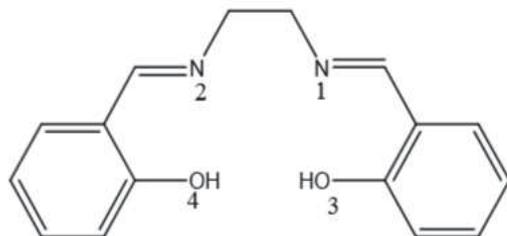
إذ أظهرت النتائج إن شدة ترددات الكربونيل لمعقد Ni(CO)₂(R₂P(CH₂)_nPR₂) تعتمد على

المجاميع المعوضة (R) على phosphorus وهذه المجاميع هي :-

R = H, Me, CF₃, Et, i-Pr, t-Bu, Ph, OMe, F

إذ إن الـ phosphines ثنائي السن تعتبر مجموعة واهبة قوية.

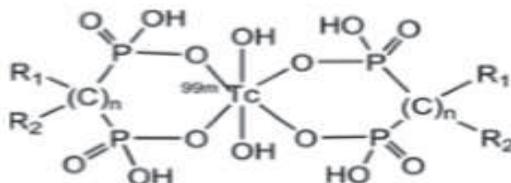
قام الباحث Mahdeyeh, S. وجماعته [67][2012] بتطبيق الحسابات النظرية باستخدام برنامج Gaussian 03 لدراسة الخصائص الهندسية لمعقدات الفلز لأيونات Zn (II), Cd (II), Hg (II) مع قاعدة Salen Schiff وأدناه الشكل (1-27)



الشكل (1-27) التركيب الكيميائي لقاعدة Salen Schiff

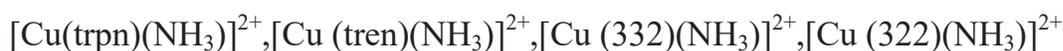
ومن نتائج الحسابات النظرية المتعلقة بالخصائص الجزيئية والالكترونية تبين انه من الممكن استخدام قاعدة Salen Schiff كليكند مناسب للتفاعل مع هذه الايونات.

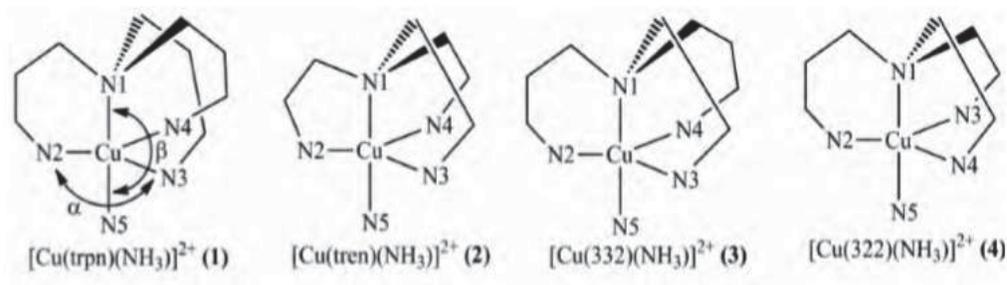
قام الباحث Ling, Q. وجماعته [68][2012] بدراسة نظرية باستخدام نظرية DFT مع قاعدة D95V لدراسة تأثير المجاميع المعوضة على التراكيب الالكترونية والهندسية لمعقدات Technetium-99m-labeled diphosphonate الشكل (1-28)



الشكل (1-28) التركيب الكيميائي لـ Technetium-99m-labeled diphosphonate إذ بينت النتائج نقصان طاقة الفجوة FMO (frontier molecular orbitals) وهي تمثل الفرق بين طاقة مستويات HOMO و LUMO، الحجم الجزيئي والمساحة السطحية للمعقد.

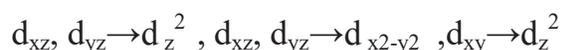
قام الباحث Duran, K. وجماعته [69][2013] بإجراء دراسة نظرية باستخدام طريقة DFT, TD-DFT/6-31G(d,p) على معقدات Copper(II) المحتوية على ليكندات (tripodal tetramin) في الشكل (1-29) وهي:



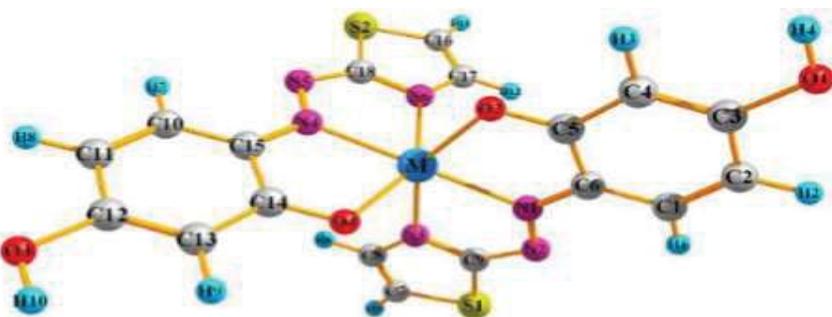


الشكل (1-29) التركيب الكيميائي لمعقدات Copper(II)

طاقات الإثارة الإلكترونية تم حسابها نظريا إذ وجد الباحث من خلال بحثه إن معظم شدة الحزم في الأطياف الإلكترونية للمعقدات تنتج عن الانتقالات التالية:



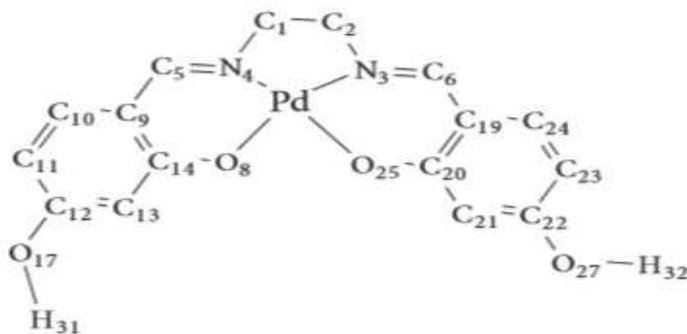
قام الباحث Beyramabadi, S. A. [2013][70] بدراسة خصائص هذه المعقدات نظريا باستخدام DFT /6-31+G(d,p) والمعقدات هي Fe(II), Cu(II), Zn(II) مع ليكند (4-(2-thiazolylazo) resorcinol (TAR)) في الشكل (1-30)



الشكل (1-30) الشكل ثلاثي الأبعاد لمعقدات Fe(II), Cu(II), Zn(II)

إذ أظهرت النتائج التي تم الحصول عليها إن معقد Cu(II) يظهر تأثير Jahn-Teller.

قام الباحث Alireza, A. [2013][71] وجماعته بتحضير معقد Schiff base Pd(II) والشكل (1-31) ودراسة خواصه.

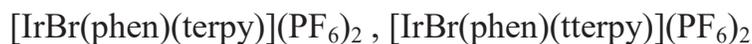


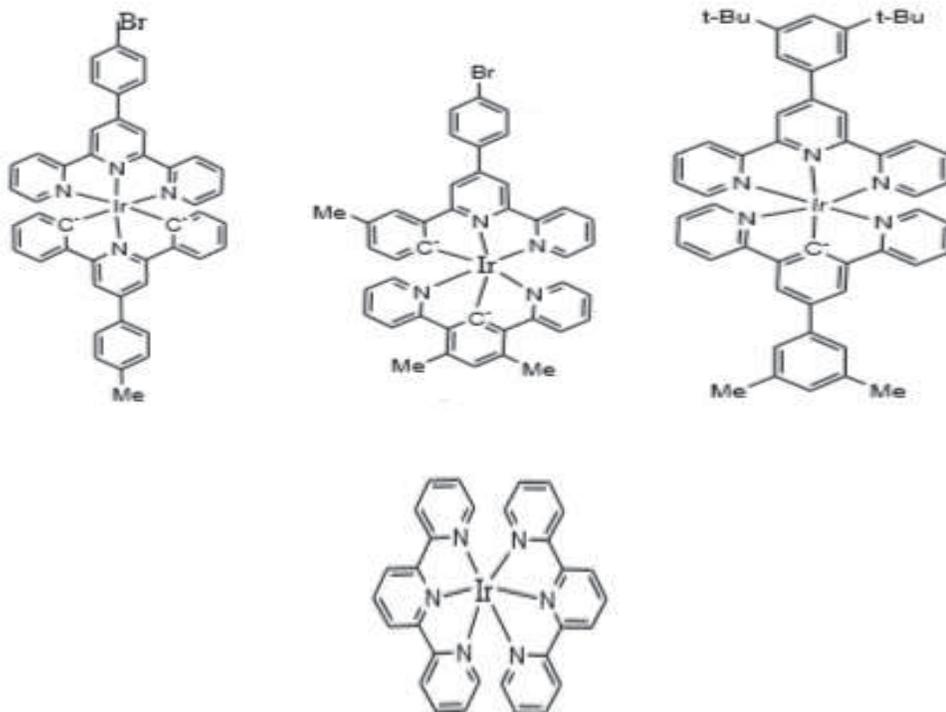
الشكل (1-31) التركيب الكيميائي لمعقد Schiff base Pd(II)

باستخدام نظرية DFT (PW91) إذ تم دراسة العديد من الخصائص الهندسية والطيفية من خلال الحسابات النظرية وموازنة النتائج النظرية مع النتائج العملية للمعقد المدروس.

قام الباحث Rodrigo C. وجماعته [72][2013] بدراسة نظرية من خلال DFT/6-311++G(d,p) إذ تم في هذا البحث عرض المنهجيات المستخدمة للتنبؤ الكمي لثوابت الاستقرار و pH لمعقدات العناصر في المحلول وبالنسبة لمعقدات $PM-Cu^{2+}$ إذ إن (PM يعني الليكند pyridoxamine) فان النتائج التي تم الحصول عليها تبين إن PM هو عامل كيليتي كفوء لـ Cu^{2+} .

قام الباحث Naokazu Y. وجماعته [73][2014] بدراسة نظرية باستخدام LANL2DZ مع Iridium(III) DFT/6311+G(d),6311G(d) لدراسة الحالات المثارة الثلاثية لمعقدات Terpyridine وكذلك العلاقة بين هذه الحالات وأطياف الانبعاث للمعقدات، والمعقدات التي تم تحضيرها مبينة في الشكل (1-32) وهي





الشكل (1-32) التركيب الكيميائي لمعقدات Iridium(III)

إذ وجدت هذه المعقدات تمتلك اثنين من الحالات المثارة وان طاقة الفجوات بين الحالات المثارة والحالات المستقرة تم موازنتها مع مايقابلها من القمم في طيف الإشعاع للمعقدات فتم الحصول على درجة عالية من الترابط بين الطاقات المحسوبة والملاحظة وبذلك فإن الحالة المثارة هي مصدر الإشعاع المتفسر لهذه المعقدات.

1-8 الهدف من البحث The Aim Of The Work

الهدف من هذه الدراسة هو إجراء دراسة نظرية لـ 25 صبغة طبيعية وذلك باستخدام برنامج Chembio3Dultra 14 وبالطرق الأتية:

HF/ B3LYB 3-21G

DFT/ B3LYB 3-21G

DFT/ B3LYB 6-31G

DFT/ B3LYB 6-311G

وتحديد أي من هذه الصبغات تمتلك كفاءة أكثر من حيث صفة تحسسها لضوء الشمس لأغراض استخدامات الطاقة الشمسية بغية الاستفادة من النباتات الطبيعية المتوفرة في العراق في تصميم الخلايا الشمسية وتصنيعها وتوافر الطاقة الكهربائية وتجنب استخدام الصبغات الصناعية المكلفة.