

3 Discusión y Resultados

5.1 Desempeño y aplicaciones de las celdas sensibilizadas por un colorante

5.1.1 Ensamble de las DSSC

Para poder hablar del funcionamiento de las DSSC, los fotoánodos, los cátodos, sensibilizadores y demás partes importantes que conjuntan la celda solar hay que explicar también tanto la forma en que ésta es ensamblada como la importancia en la que repercuten ciertas características del ensamble en la eficiencia de las DSSC. Estas características van desde las propiedades de los TCO y el grosor de los vidrios, situaciones que se explicarán a continuación.

Primeramente, la manera en la que la celda se coloca bajo el Sol para poder obtener las mediciones es de gran importancia, aquí el vidrio conductor, el cual es el que absorbe la radiación electromagnética porque es en donde se encuentra impregnado el semiconductor es el que se coloca hacia la luz, es decir la parte posterior de la estructura sándwich correspondiente a donde se encuentran nuestros óxidos. Asimismo se debe procurar que el ángulo de los vidrios con respecto a la energía incidente fuera totalmente perpendicular para una mejor captación de la energía.

Para la realización de todas estas celdas solares se han utilizado vidrios que poseen cierta conductividad y por la tanto, cierta resistencia. La resistencia eléctrica es una medida de su oposición



al paso de corriente y esta depende de la corriente eléctrica. De aquí es donde los materiales se clasifican en conductores, semiconductores y aislantes en donde todos poseen una proporción de resistencia con excepción de los materiales llamados superconductores, en donde este valor es prácticamente nulo.

Partiendo de este principio, nuestros vidrios conductores dependiendo de las concentraciones de la solución de $\text{SnCl}_2/\text{Sb}_2\text{O}_3$ que se le fuera añadido, la resistencia eléctrica iba disminuyendo. De manera general, la resistencia promedio de estos TCO sintetizados fueron entre 300Ω hasta $1.7 \text{ k}\Omega$. Todos estos valores, en tanto, observamos que disminuían la intensidad de corriente de nuestras celdas y fue un factor importante en el resultado de este trabajo.

Otra situación que se debe de exponer en cuanto a las DSSC es el grosor de los vidrios. La película de los óxidos debe de ser suficientemente delgada pero que al mismo tiempo sea capaz de mantener una interfase sólida entre las nanopartículas de nuestros óxidos y el sensibilizador utilizado para una mejor transferencia electrónica. En este caso utilizamos la manera tradicional en que se construye la película delgada al valerse de una varilla de vidrio como rodillo para poder esparcir, de manera individual, la pasta tanto del TiO_2 y ZnO sobre el TCO. Aparte del uso de la varilla de vidrio, también utilizamos el equipo de Spin Coating y el uso de un aspersor para observar las diferentes capas que se formaron y poder realizar comparaciones. En la tabla 2 se muestran los valores de voltajes y corrientes obtenidos en las DSSC utilizando diferentes métodos para la formación de la película del óxido de titanio sobre los vidrios conductores.

Ánodos	Método	Voltaje (volts)	Corriente (mA)	Área (cm ²)	Eficiencia %
TiO ₂	Aspersor	0.135	0.0163	6.6	0.00047848
TiO ₂	Rodillo	0.255	0.0117	10	0.0004273
TiO ₂	Spin Coating	0.123	0.0152	6.3	0.00042549

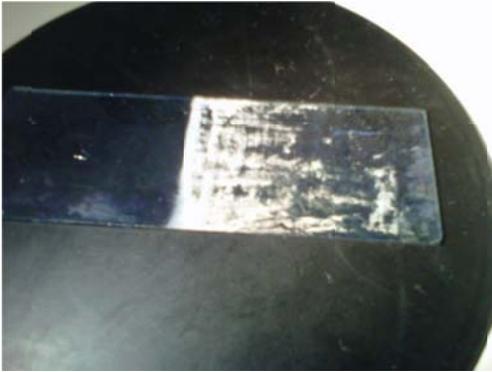
Tabla 2 Resultados de DSSC de TiO₂ utilizando diferentes métodos para la formación de películas

Como se puede ver en las siguientes imágenes, el espesor de la capa es diferente dependiendo del método con el cual se esté trabajando. La técnica del spin coating fue la que nos dio un espesor bastante pequeño sin embargo no nos proporcionaba una uniformidad sobre el vidrio, situación observable en la imagen 25. Lo anterior se puede deber a la densidad que tenía nuestra solución y que provocaba la formación de grumos al centro de nuestros vidrios. Para realizar esta metodología también es importante recalcar que se utilizaron vidrios de formas cuadrangulares para la mejor dispersión del semiconductor.

En cuanto al aspersor utilizado, el grosor de la capa fue intermedio entre el obtenido por spin coating y el formado usando la varilla de vidrio (figura 26) y además se obtuvo una película bastante uniforme a lo largo de todo el TCO, a diferencia del obtenido por spin coating; y como observamos en la tabla anterior, el rendimiento fue ligeramente mayor que el obtenido por spin coating.

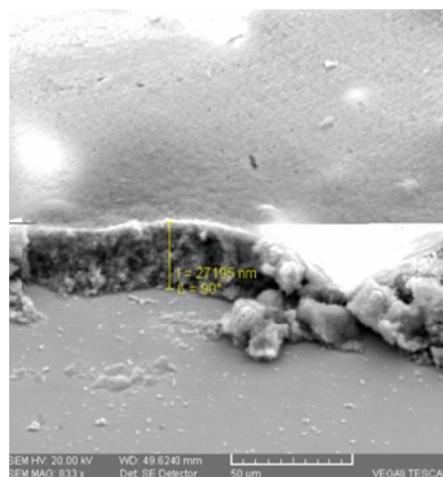


spensor



de una
el TCO
lla de

En la figura 28 es una micrografía en donde se puede observar una capa de TiO_2 sobre un vidrio conductor utilizando una varilla de vidrio y podemos ver que el espesor de dicha capa es de $27.2 \mu\text{m}$, el cual se encuentra dentro de los valores normales que se obtienen al utilizar este método y que es capaz de proporcionar una eficiencia buena al estar en contacto con el sensibilizador y lograr la transferencia de electrones.



5.1.2 Cálculos de las

Figura 6 Micrografía del grosor de una capa de TiO_2 utilizando una varilla de vidrio para la difusión

eficiencias de las

DSSC

Al hablar de este armado debemos de tomar en cuenta ciertos factores, desde los vidrios conductores que se han fabricado previamente, hasta la cantidad de energía radiante del día, así como el horario en el que estas mediciones se realizaron.

En principio, todas las mediciones se realizaron entre las 12:00 de día y las 2 de la tarde para tomar la mayor cantidad de energía radiante y se tomaron en el mismo lugar todas las celdas, ya que como es bien sabido, la cantidad de energía que se recibe de sitios más elevados no es la misma que en zonas con baja altitud.

Para poder realizar los cálculos de eficiencia en la conversión solar, además de utilizar un radiómetro el cual nos indicaba la cantidad de energía incidente también en ese en el mismo punto se medía el voltaje de la celda y la intensidad de corriente con ayuda de un multímetro, además se midió el área de la celda que se encontraba expuesta a la luz solar. Una vez teniendo los datos anteriores, se procedía a utilizar la fórmula de eficiencia expuesta en el capítulo referente al marco teórico:

$$\eta = \frac{\frac{I \times V}{\text{Área}}}{E_{\text{incidente}}} \times 100$$

La tabla 3 muestra los valores obtenidos y las eficiencias calculadas tanto para TiO₂ como para ZnO con las diferentes formas del depósito sobre los TCO, diferentes sensibilizadores y cátodos.

Ánodos	Sensibilizador	Cátodos	Voltaje (volts)	Corriente (mA)	Área (cm ²)	Eficiencia %
TiO ₂	Moras	Aspersor	0.135	0.0163	6.6	0.00047848
TiO ₂	Moras	Utilizando la varilla	0.255	0.0117	10	0.0004273
TiO ₂	Moras	Spin Coating	0.123	0.0152	6.3	0.00042549
TiO ₂	Moras	Aspersor	0.135	0.0163	6.6	0.00047848
TiO ₂	Moras	Pasta de óxido	0.255	0.0603	11.7	0.00189329
TiO ₂	Moras	Precursor: Butóxido de titanio	0.1	0.0225	7.5	0.00041591
TiO ₂	Moras	DEP	0.07	0.0223	7.6	0.00029016
ZnO	Moras	Poliol	0.216	0.0215	9.9	0.00064451
ZnO	Moras	DEP	0.55	0.0605	6.12	0.00770435
ZnO	Moras	Pasta de ZnO	0.29	0.0825	12.9	0.00269483
ZnO	Moras	H ₂ PtCl ₆	0.175	0.0386	13	0.0007247
TiO ₂	Moras	H ₂ PtCl ₆	0.153	0.0187	3.75	0.00102298
ZnO	Moras	Pd-C + Cobertura de Nafión	0.232	0.0379	5.1	0.00242994
TiO ₂	Moras	Pd-C + Cobertura de Nafión	0.051	0.0135	4	0.00022604
ZnO	Moras	Pd-C + Nafión	0.385	0.06	9	0.00362196
TiO ₂	Moras	Pd-C + Nafión	0.223	0.0172	8.58	0.00060865

ZnO	Moras	Pt-C + Cobertura de Nafión	0.25	0.0261	15	0.0005843
TiO ₂	Moras	Pt-C + Cobertura de Nafión	0.199	0.243	11.6	0.02583963
ZnO	Moras	Pt-C + Nafión	0.211	0.057	7.35	0.00226956
TiO ₂	Moras	Pt-C + Nafión	0.14	0.0468	13	0.00070823

Tabla 1 Tabla General de resultados obtenidos

De manera muy general y basándose en la tabla, el ZnO es el que ha demostrado mejores eficiencias, además en conjunto con el uso de platino dopando al carbono utilizado en el cátodo de la celda, esta tendencia es mucho mayor. A lo largo de este capítulo se discutirán por separado cada una de las técnicas, de los resultados para hacer comparaciones más específicas respecto a los resultados obtenidos.

5.2 Análisis de las nanopartículas de TiO₂ y ZnO y sus agentes dopantes

5.2.1 Análisis del depósito de óxidos sobre TCO a partir de diversos precursores

Una situación importante a analizar al utilizar diferentes métodos de síntesis de nanopartículas, es el tiempo que las muestras son colocadas para su sinterización, se ha visto que entre mayor tiempo se encuentren bajo altas temperaturas, mayor es su actividad fotocatalítica debido a que se asocia a que poseen una mayor estructura cristalina y aumenta la cantidad de puntos específicos en donde el semiconductor se puede acoplar con el sensibilizador. En nuestro caso las muestras se dejaban alrededor de 30-40 minutos a una

temperatura aproximada de 450°C. En seguida se presentan los resultados obtenidos al elaborar DSSC utilizando diversas síntesis tanto para el ZnO como para el TiO₂.

5.2.1.1 ZnO

Para la síntesis del ZnO por el método del poliol explicado previamente, se obtuvo una capa (figura 29) con muy buena adherencia, mucha estabilidad y además una mejoría ligera en la eficiencia como se observará en la tabla 4. Para los cálculos de eficiencias de todas estas celdas, se utilizó un cátodo de grafito y como sensibilizador único el extracto de moras para poder realizar una mejor comparación.

Otra síntesis utilizada fue por medio del depósito electroforético, en donde primero se llevaron partículas de zinc coloidal a una solución y ahí se aplicó un voltaje de 15 volts. La capa formada a través de esta técnica tuvo un grosor similar a cuando se utiliza el método de rodillo pero a diferencia de esta última, el voltaje obtenido fue mucho mayor, como se verá en la tabla de resultados.



or el

Ánodos	Método	Voltaje (volts)	Corriente (mA)	Área (cm ²)	Eficiencia %
ZnO	Poliol	0.216	0.0215	9.9	0.00064451
ZnO	DEP	0.550	0.0605	6.12	0.00770435
ZnO	Pasta de ZnO	0.290	0.0825	12.9	0.00269483

Tabla 2 Resultados de DSSC de ZnO utilizando diferentes métodos para la formación de películas

Finalmente, se puede concluir en esta sección que la mejor síntesis para realizar DSSC con semiconductores de ZnO es hacer un depósito electroforético sobre nuestro TCO, ya que el voltaje de 0.550 volts obtenido ha sido uno de los más altos, además la DEP es fácil y viable para largas escalas además de que la capa resultó tener una excelente adherencia hacia el vidrio, ya que al momento de ser sumergida en el extracto de zarzamoras, no se perdió material y los resultados observados fueron muy buenos.

5.2.1.2 TiO₂

En el caso de las síntesis con TiO₂ se realizó un DEP utilizando TiO₂ coloidal además de las pastas de óxidos antes mencionadas se utilizó como disolvente etilenglicol para tratar de mejorar la adherencia hacia los vidrios. Igualmente, se utilizaron como precursores para las nanopartículas el butóxido de titanio, técnica

que ya ha sido explicada con anterioridad en el capítulo correspondiente a metodología. En la tabla 5, que se muestra a continuación aparecen los resultados correspondientes:

Ánodos	Método	Voltaje (volts)	Corriente (mA)	Área (cm ²)	Eficiencia %
TiO ₂	Pasta de óxido	0.255	0.0603	11.7	0.00189329
	Precursor:				
TiO ₂	Butóxido de titanio	0.100	0.0225	7.5	0.00041591
TiO ₂	DEP	0.07	0.0223	7.6	0.00029016

Tabla 3 Resultados de DSSC de TiO₂ utilizando diferentes precursores

Podemos observar que los valores más bajos obtenidos fueron los de la DSSC conseguido por la técnica de DEP. El motivo de esta situación se presume puede ser porque la cantidad de TiO₂ depositado sobre la capa no fue el suficiente para lograr una adecuada transferencia electrónica, pues la película formada no era del todo visible y a pesar de tener muy buena adherencia el voltaje obtenido no fue lo que se esperaba.

Cabe mencionar, que al igual que el punto anterior, como buscamos analizar el efecto de los fotoánodos en las celdas, tanto el sensibilizador utilizado fue una capa de grafito y el sensibilizador fue extracto de moras.

5.2.2 Dopaje con plata

Se sintetizaron tanto ZnO como de TiO₂ los cuales fueron dopados con Ag a diferentes concentraciones, de 0.5, 1.0, 1.5, 2 y 2.5% respecto a la relación molar para observar la importancia que tiene el factor de la concentración así como el efecto dopante de la plata sobre los óxidos. En la tabla 5 podemos observar los resultados de dichas celdas solares, utilizando nuestros óxidos dopados de plata a diferentes concentraciones.

Ánodos	Sensibilizador	Cátodos	Voltaje (volts)	Corriente (mA)	Área (cm ²)	Eficiencia %
TiO ₂	Moras	Grafito	0.255	0.0603	11.7	0.00183225
Ag-TiO ₂ 0.5%	Moras	Grafito	0.135	0.0163	6.6	0.00044597
Ag-TiO ₂ 1%	Moras	Grafito	0.295	0.0523	6.6	0.00322265
Ag-TiO ₂ 1.5%	Moras	Grafito	0.492	0.0534	8.74	0.00415006
Ag-TiO ₂ 2%	Moras	Grafito	0.058	0.0156	13	9.3072E-05
Ag-TiO ₂ 2.5%	Moras	Grafito	0.023	0.0103	12	2.6356E-05

Tabla 4 Resultados de las DSSC utilizando Ag-TiO₂ a diferentes concentraciones

Aquí podemos ver que el que tuvo mayor eficiencia fue el Ag-TiO₂ con una relación molar de 1.5% produciendo uno de los voltajes más altos de 0.492 voltios. En la gráfica siguiente podemos observar como con una pequeña cantidad de plata como agente dopante aumentó la cantidad de energía producida, sin embargo cuando ya hay más de 1.5% de plata en relación molar al TiO₂, la eficiencia disminuye extremadamente. Esto puede ocurrir debido a que al colocar gran cantidad de metal puede hacer que éste mismo bloquee la acción del semiconductor de realizar la transferencia de electrones al evitar contacto con el

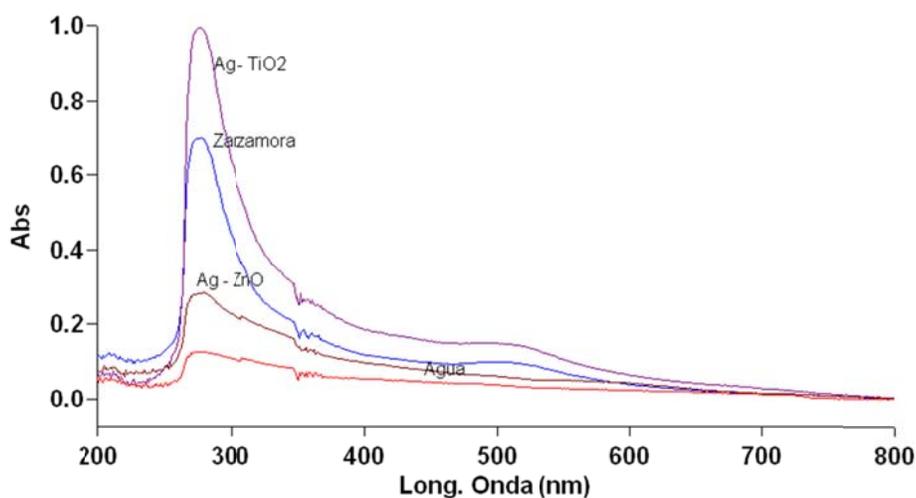
sensibilizador. Lo anterior gracias a que después de pasar la relación del 1.5%, el recubrimiento que se formaba sobre el TCO tenía aspecto metálico, brillo y reflexión de la luz, por lo que aunque pudiéramos pensar que significaría una mayor eficiencia para la celda al atrapar más electrones.

Con respecto al ZnO la tabla 7 muestra los resultados de las eficiencias obtenidas para las diferentes cantidades de Ag como dopante.

Ánodos	Sensibilizador	Cátodos	Voltaje (volts)	Corriente (mA)	Área (cm ²)	Eficiencia %
ZnO	Moras	Grafito	0.29	0.0825	12.9	0.00272562
Ag-ZnO 0.5%	Moras	Grafito	0.121	0.010	9.2	0.00018211
Ag-ZnO 1%	Moras	Grafito	0.142	0.012	9.4	0.00025083
Ag-ZnO 1.5%	Moras	Grafito	0.150	0.018	9	0.00042095
Ag-ZnO 2%	Moras	Grafito	0.135	0.0288	9	0.00059641
Ag-ZnO 2.5%	Moras	Grafito	0.070	0.0215	9	0.0002354

Tabla 5 Resultados de las DSSC utilizando Ag-ZnO a diferentes concentraciones

En la figura 30 se puede observar el espectro UV-Vis de los óxidos dopados obtenidos: Ag-TiO₂ y Ag-ZnO. Para poder obtener dichas bandas de absorción, se hace una solución utilizando una pequeña cantidad del material utilizado en el extracto del sensibilizador y se hace una dilución. En este espectro podemos ver que a pesar de ser curvas muy similares, aquí se puede observar un ligero



aumento en la absorbancia cerca de los 500 nm, de mejor absorbancia de la plata con el TiO₂ en lugar del obtenido por el ZnO.

5.2.3 Dopaje con nitrógeno

Para el depósito del TiO₂ dopado con nitrógeno, se obtuvo una celda con resultados que se muestran a continuación:

Ánodo	Sensibilizador	Cátodo	Voltaje (volts)	Corriente (mA)	Área (cm ²)	Eficiencia %
TiO ₂ -N	Jamaica	Grafito	0.5	0.047	12	0.00261111

Ag-TiO ₂ 1.5%	Moras	Grafito	0.492	0.0534	8.74	0.00415006
--------------------------	-------	---------	-------	--------	------	------------

Tabla 6 Resultados del TiO₂ dopado con nitrógeno

Como se puede observar en la tabla 8, aunque el voltaje fue mayor en comparación con algunas otras celdas, la plata es un mejor agente dopante que el nitrógeno, además de que la película de este semiconductor no poseía buena adherencia y al estar en contacto con los extractos de sensibilizadores, gran parte del material se perdía.

5.3 Análisis microscópicos de los materiales catódicos

5.3.2 Electrodo de Pd-C y Pt-C

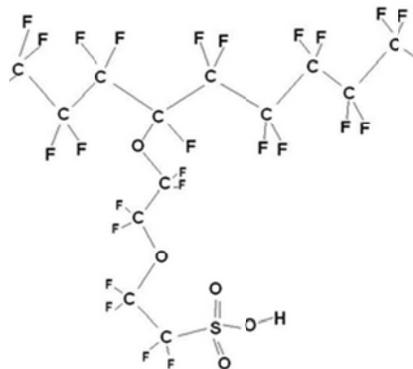
En primer lugar, el rendimiento de nuestra síntesis para la obtención de Pd-C al 5% fue bastante bueno, sin embargo, el problema principal con los recubrimientos tanto de Pd-C como de Pt-C fue que su adherencia no era tan buena, así que por ende se utilizaron diversos recubrimientos, principalmente de Nafión para tener un vidrio mejor recubierto y que resistiera el ensamblado sin despegarse del TCO. A continuación se muestran los resultados:

Ánodo	Sensibilizador	Cátodo	Voltaje (volts)	Corriente (mA)	Área (cm ²)	Eficiencia %
ZnO	Moras	H ₂ PtCl ₆	0.175	0.0386	13	0.0007247
TiO ₂	Moras	H ₂ PtCl ₆	0.153	0.0187	3.75	0.00102298
ZnO	Moras	Pd-C + Cobertura de Nafión	0.232	0.0379	5.1	0.00242994
TiO ₂	Moras	Pd-C + Cobertura de Nafión	0.051	0.0135	4	0.00022604

ZnO	Moras	Pd-C + Nafión	0.385	0.060	9	0.00362196
TiO ₂	Moras	Pd-C + Nafión	0.223	0.0172	8.58	0.00060865
ZnO	Moras	Pt-C + Cobertura de Nafión	0.250	0.0261	15	0.0005843
TiO ₂	Moras	Pt-C + Cobertura de Nafión	0.199	0.243	11.6	0.02583963
ZnO	Moras	Pt-C + Nafión	0.211	0.057	7.35	0.00226956
TiO ₂	Moras	Pt-C + Nafión	0.140	0.0468	13	0.00070823

Tabla 7 Resultados obtenidos de los diferentes electrodos dopados

En el capítulo anterior se habló de las diferentes formas de utilizar el nafión para mejorar la dispersión del carbono dopado y así su adherencia y distribución sobre el vidrio. En cualquiera de las dos metodologías para la elaboración de los cátodos dopados con estos

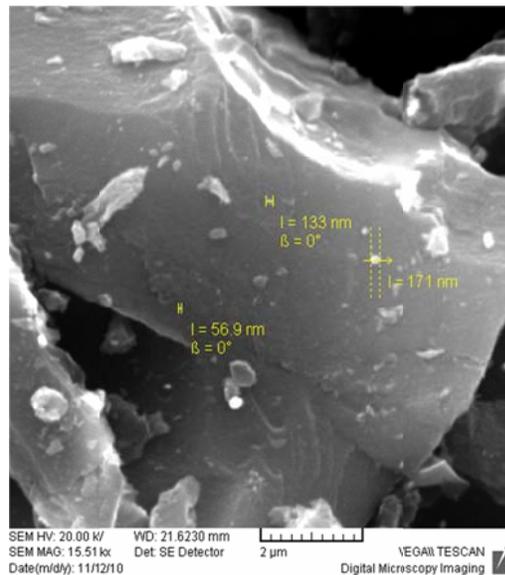
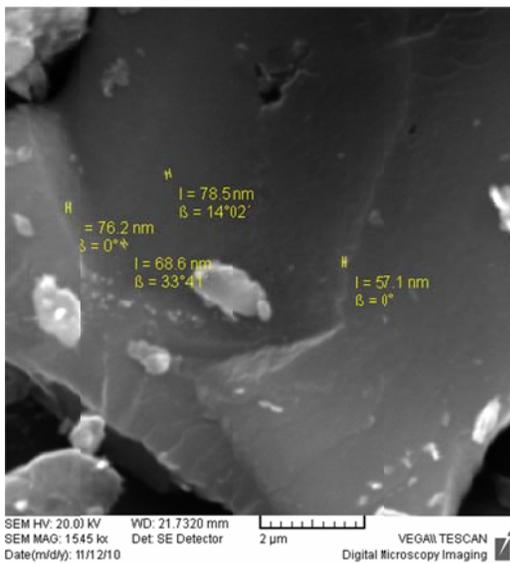


I Nafión

metales se observó la formación de una solución completamente homogénea, comprobando que el nafión es un buen disolvente, no obstante, se logró tanto una mejor adherencia como la producción de un mayor voltaje cuando el carbono dopado se disolvió en la solución de nafión/isopropanol que únicamente colocando el recubrimiento

Una de las razones por las cuales la incorporación del nafión mejoró la eficiencia y la adherencia de las celdas es gracias a que éste es un polímero que tiene propiedades conductoras porque en su estructura (figura 31), tiene poros que mejoran la transferencia de las cargas además de que es muy estable contra efectos químicos y térmicos.

Finalmente, entre ambos metales como su efecto dopante sobre el carbono y por consiguiente la eficiencia en las DSSC, se obtuvieron imágenes de SEM para observar el tamaño de partícula y la forma en que se encuentra la estructura.



5.3.3 Electrodo de Paladio

Anteriormente se explicó a detalle la técnica para la obtención de una capa de paladio utilizando el método electroquímico. En esta reacción se utilizó una solución de PdCl_2 para el depósito sobre el TCO que se muestra a continuación.

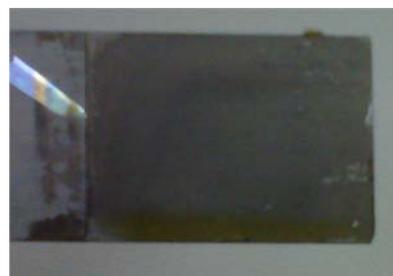
La capa que se depositó después de los 30 minutos fue una capa resistente y delgada de color plateado que fue utilizada en el ensamblado de la DSSC con los resultados que se muestran en la tabla 10. Adjunto de estos resultados observados por los diferentes óxidos, también se encuentran los voltajes

obtenidos por celdas que se prepararon utilizando diferentes metales para poder realizar la comparación del paladio, además del cátodo más común utilizado que es el grafito y ver su efectividad frente a algunos otros metales.

Ánodos	Sensibilizador	Cátodos	Voltaje (volts)	Corriente (mA)	Área (cm ²)	Eficiencia %
ZnO	Moras	Pd	0.260	0.072	13	0.00204736
ZnO	Moras	Grafito	0.290	0.0825	12.9	0.0026928
TiO ₂	Moras	Pd	0.168	0.0216	7.92	0.00061435
TiO ₂	Moras	Grafito	0.255	0.0603	11.7	0.00183225
ZnO	Moras	Zinc	0.680	0.470	13	0.42613333
ZnO	Moras	Cobre	0.322	0.16	13	0.00762717

Tabla 8 Eficiencias de los óxidos utilizando metales como cátodos

Una de las situaciones importantes que podemos concluir en la tabla anterior es la importancia que tiene que el contraelectrodo sea un buen conductor eléctrico para poder realizar de una manera efectiva la transferencia de electrones, así podemos ver que los contraelectrodos que únicamente eran láminas del metal correspondiente tenían tanto una mayor intensidad de corriente como producían un mayor voltaje. Por otro lado, el uso de la capa de paladio depositada electroquímicamente no tuvo los beneficios que se esperaban en las DSSC. A pesar de existir una relativa facilidad para la síntesis del cátodo a diferencia de otros métodos, además de tener una resistencia, adherencia y durabilidad de la capa durante todo el proceso, las



eficiencias siguen siendo mayores utilizando un cátodo de grafito.

5.4 Análisis espectrofotométricos de los componentes de los extractos utilizados como colorantes

A lo largo de este trabajo se ha explicado la vital importancia que tienen los sensibilizadores dentro de las DSSC, y también se ha dicho los diferentes tipos de sensibilizadores que se utilizaron en el proyecto que son: clorofila, antocianinas extraídas de Jamaica y zarzamoras y la ftalocianina.

5.4.1 Comparaciones generales

Dentro de los resultados, se puede observar en la siguiente tabla:

Ánodos	Sensibilizador	Cátodos	Voltaje (volts)	Corriente (mA)	Área (cm ²)	Eficiencia %
ZnO	Jamaica	Grafito	0.213	0.1035	12.81	0.00267105
ZnO	Clorofila	Grafito	0.238	0.0353	11.81	0.00099768
ZnO	Ftalocianina	Grafito	0.265	0.0615	16.1	0.00146125
ZnO	Moras	Grafito	0.29	0.0825	12.9	0.00272562

Tabla 9 Resultados de DSSC de ZnO utilizando diversos sensibilizadores

En cuanto a estos resultados, se puede observar que los niveles más altos de voltaje que nuestras celdas arrojaron fueron las moras y la ftalocianina para las DSSC utilizadas con ZnO mientras que utilizando los mismos sensibilizadores pero ahora con TiO₂ los efectos fueron los siguientes:

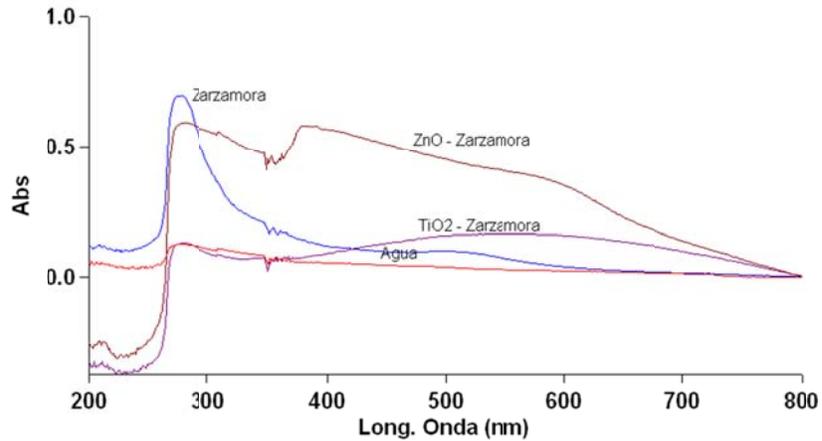
Ánodos	Sensibilizador	Cátodos	Voltaje (volts)	Corriente (mA)	Área (cm ²)	Eficiencia %
TiO ₂	Jamaica	Grafito	0.160	0.015	13	0.00024682
TiO ₂	Clorofila	Grafito	0.267	0.0337	14.52	0.00083767
TiO ₂	Ftalocianina	Grafito	0.159	0.0100	7.35	0.00028878
TiO ₂	Moras	Grafito	0.255	0.0603	11.7	0.00183225

Tabla 10 Resultados de DSSC de TiO₂ utilizando diversos sensibilizadores

Haciendo una comparación entre cada una de las tablas, podemos observar algunas diferencias y similitudes entre los sensibilizadores, estos detalles se explicarán a continuación de manera breve por cada colorante utilizado:

5.4.2 Moras

La figura 35 nos muestra el espectro de absorción de UV-Vis que tiene la zarzamora, que es uno de nuestros colorantes utilizados así como las diferentes longitudes de onda a las que absorben nuestra misma zarzamora pero ahora cuando se encuentra en conjunto con nuestros óxidos. De acuerdo con este espectro, el que mejora demasiado al absorber la radiación electromagnética desde los 250 hasta los 650 nm aproximadamente es el ZnO, teniendo las mismas absorbancias que tiene la zarzamora sola y también en zonas donde por sí sola no tiene ninguna absorción.



Zarzamora
Zarzamora + ZnO

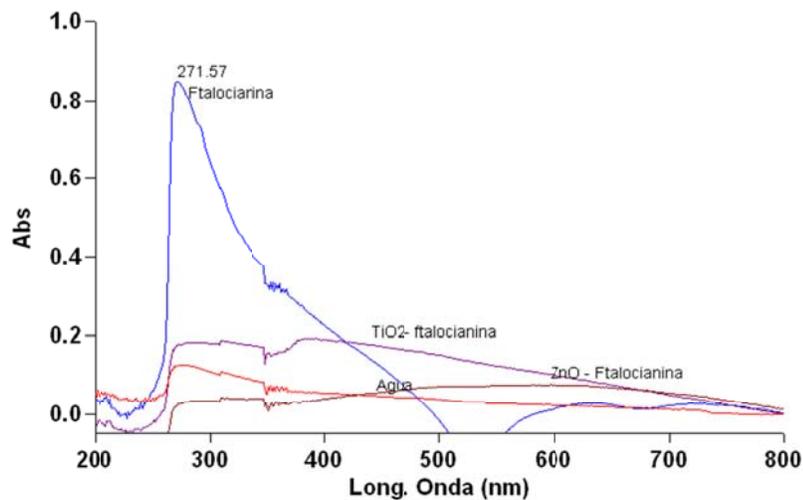
Para una ilustración visible de estos datos, se hace una comparación de los tubos de dichas soluciones en la figura 36. En el tubo izquierdo

tenemos al TiO_2 con el extracto de zarzamoras, al estar en contacto estas dos sustancias, el óxido no modificó de manera importante el color del extracto de zarzamora (el color inicial del extracto de zarzamora es rojo), situación que se puede comprobar en el espectro UV-Vis anterior pues el TiO_2 no presenta muchas diferencias en la absorción de la zarzamora. En cambio, el tubo derecho de la fotografía se encuentra nuestro ZnO utilizado en las DSSC con el mismo extracto de zarzamora, en donde existe un cambio de color de rojo a morado y dichas tonalidades son observables en el mismo espectro cuando la mayor parte de la absorbancia de la sustancia se encuentra entre los 400 y 500 nm, pues corresponden a colores entre azules y morados.

Finalmente, se puede acordar que el ZnO se acopla mejor con el extracto de zarzamoras, situación que se ve reflejado en las eficiencias, en donde son mucho mayores las que tienen ZnO que las de TiO₂. En seguida se explicará un poco mejor cada uno de los sensibilizadores utilizados.

5.4.3 Ftalocianina

La ftalocianina es conocida por su poder de absorción de la radiación electromagnética y aunque no es muy utilizado como sensibilizador en las DSSC debido a su costo y que su síntesis es ligeramente más costosa, en este trabajo se decidió incluirla para tener un colorante inorgánico para efectos de comparación de las eficiencias. De igual manera se realizó un espectro UV-Vis (figura 37) donde se encuentran de la misma manera que el ejemplo anterior, la ftalocianina y ésta misma acoplada con el TiO₂ y ZnO.



En este espectro se puede ver que tanto las absorbancias entre la ftalocianina acoplada al ZnO como acoplada al TiO₂ son muy semejantes en un intervalo de los 800 nm hasta casi los 250 nm, quizás ligeramente abarcando un poco mayor longitud de onda el TiO₂. Estos resultados coadyuvan con las eficiencias demostradas con cada uno de estos sensibilizadores, mostrando mayor voltaje el que contiene TiO₂.

5.4.4 Clorofila

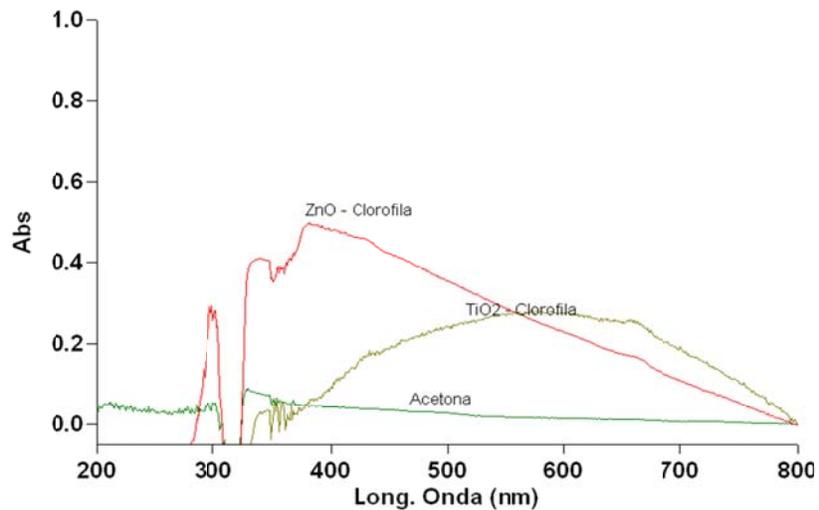
Una de las observaciones que hizo nacer a las DSSC fue hacia las plantas que utilizaban la energía del Sol para su propia producción de energía, por ende se ha extraído la clorofila de hojas de plantas para identificar su posible uso en este tipo de celdas.



En la figura 39 tenemos el espectro de UV-Vis de la clorofila que a pesar que a simple vista no se puede ver gran diferencia entre la longitud de onda a la que absorben, comparando resultados con la celda

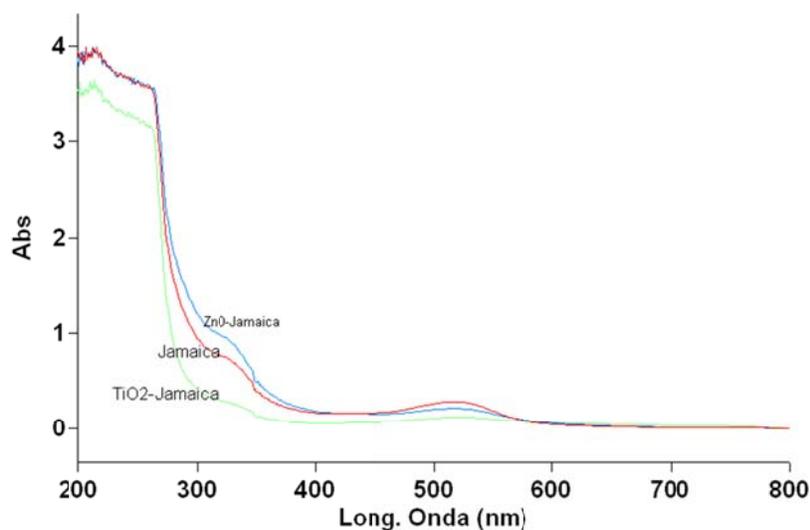
gnado que tuvo una mayor eficiencia que fue la del TiO₂ se puede decir que en el espectro el TiO₂ acoplado con la clorofila tiene su absorbancia mayor de entre los 400 a los 800 nm que viene siendo el espectro visible mientras que el ZnO tiene

su mayor absorbancia en el área de UV. Lo anterior nos quiere decir que existe mayor energía radiante proveniente del Sol de los 400 a los 800 nm que de la parte del espectro perteneciente al UV, por consiguiente quien tiene una mejor captación y más posibilidades de producir energía es el TiO_2 .



5.4.5 Jamaica

De acuerdo a las eficiencias mostradas, el extracto de jamaica no fue el mejor sensibilizador utilizado. A pesar de que la energía generada es ligeramente cercana a las observadas por el extracto de zarzamora, en la figura 40 correspondiente al espectro UV-Vis podemos observar que aunque tiene un pequeño pico de absorbancia cercano a los 500 nm, su mayor absorbancia se observa en el área de UV entre los 200 y 300 nm. La figura también se puede ver, como ha sido en gran parte de las celdas, que el sensibilizador tiene un mejor acoplamiento con las nanopartículas de ZnO que las de TiO_2 , situación que se compagina con los resultados obtenidos de las celdas, siendo la de mayor energía obtenida los de ZnO.



a los

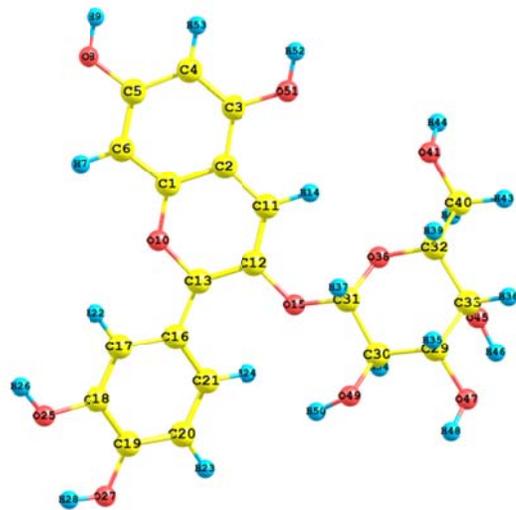
5.5 Análisis teórico de los componentes principales de cada extracto

5.5.1 Determinación de las estructuras optimizadas para cada componente principal del extracto

Considerando las estructuras de las antocianinas más comunes de los extractos utilizados, se han optimizado dichas estructuras utilizando el programa Gaussian 03, con un método HF y un conjunto de base 6-31G.

5.5.1.1 Cianidin-3-galactósido

La figura 41 muestra dichas estructuras optimizadas. Algunos parámetros geométricos se muestran en la tabla 12.



lel cianidin-

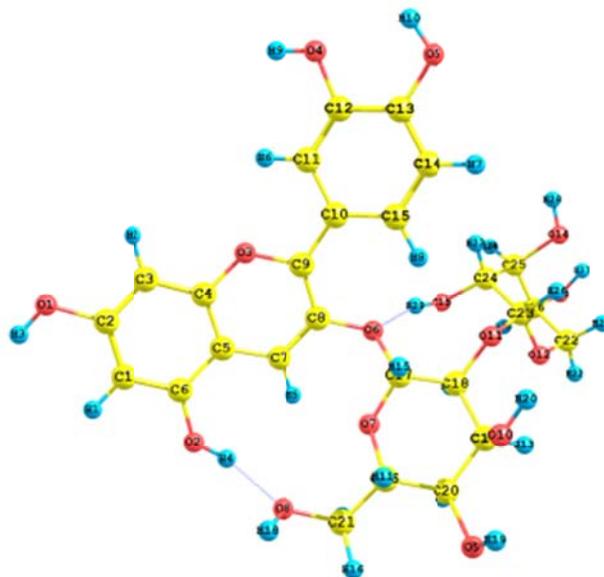
Átomos	Distancia (Å)
C5 – C6	1.38460
C11 – C12	1.38047
C20 – C21	1.38061
C12 – O15	1.37398
C31 – O38	1.40497
C1 – O10	1.36424

Tabla 11 Distancias interatómicas del cianidin-3-galactósido

Como se puede observar, las primeras tres distancias corresponden a carbonos que se encuentran formando parte de anillos aromáticos, una vez que la estructura se ha optimizado, conjugando las interacciones atómicas, efecto de apantallamiento así como tomando en cuenta al resto de los elementos se pueden obtener distancias entre los átomos muy similares; además, en el caso del C31 –

O38 su distancia es muy similar al resto ya que a pesar de que el enlace es entre un carbono y un oxígeno, éstos aún se encuentran dentro de un anillo aromático.

5.5.1.2 Cianidin-3-sambubiósido



ido

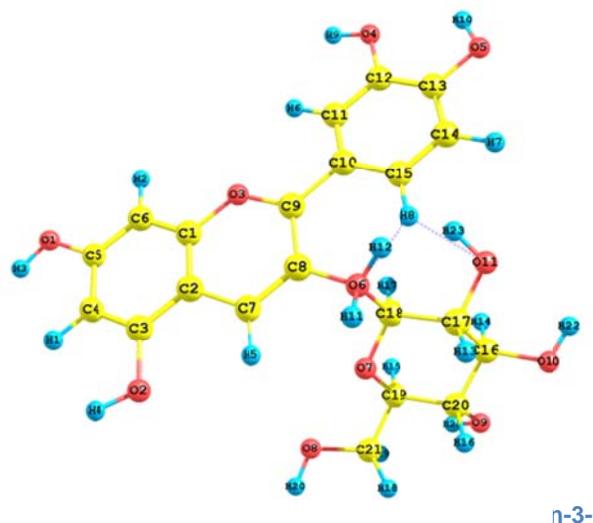
A continuación, en la tabla 14 se muestran algunas distancias interatómicas obtenidas en el programa Gaussian al optimizar la estructura del cianidín-3-sambubiósido:

Átomos	Distancia (Å)
C1 – C2	1.39690
C13 – C14	1.39231
C17 – O7	1.41322
C9 – O3	1.41322

Tabla 12 Distancias interatómicas de algunos elementos del cianidín-3-sambubiósido

Todas las distancias mostradas corresponden a carbonos dentro de anillos aromáticos y las distancias obtenidas son muy similares entre ellas, demostrando la optimización realizada.

5.5.1.3 Cianidin-3-glucósido



A continuación se observa una tabla con distancias interatómicas de la estructura optimizada del cianidin-3-glucósido de la manera en que se han mostrado estas distancias pero de las otras estructuras.

Átomos	Distancia (Å)
C4 – C5	1.39483
C10 – C11	1.39516
C7 – C8	1.40024
C5 – O1	1.43000

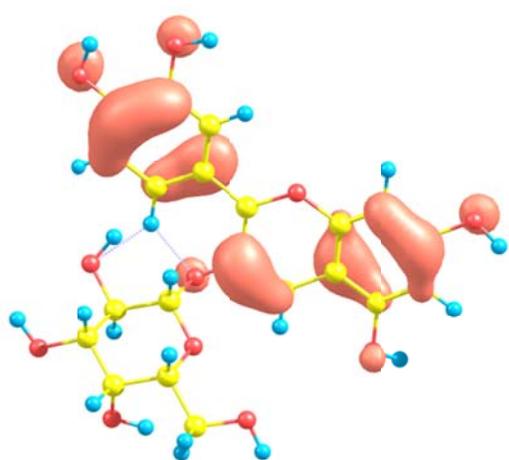
Tabla 13 Distancias interatómicas de algunos elementos del cianidin-3-glucósido

En la tabla anterior podemos observar la tendencia en la mayoría de las distancias mostradas pertenecientes a diferentes anillos aromáticos de la molécula. Las diferencias entre estas distancias se debe a los efectos existentes entre los átomos que rodean a dichos átomos.

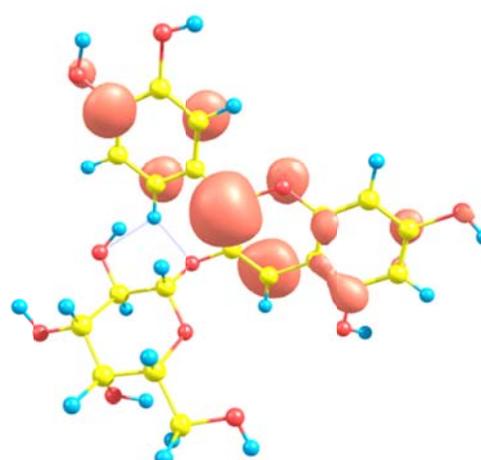
5.5.2 Descripción de los orbitales moleculares para cada componente principal del extracto

Con ayuda del programa Gaussian, además de obtener las estructuras optimizadas, también es posible localizar los orbitales moleculares HOMO y LUMO así como la energía que éstos poseen. De esta manera, es posible calcular la energía teórica necesaria para poder hacer la transición electrónica entre estos dos orbitales. A continuación se mostrarán figuras de estos orbitales además de dichas transiciones para algunas de las antocianinas más importantes de los sensibilizadores utilizados en las DSSC.

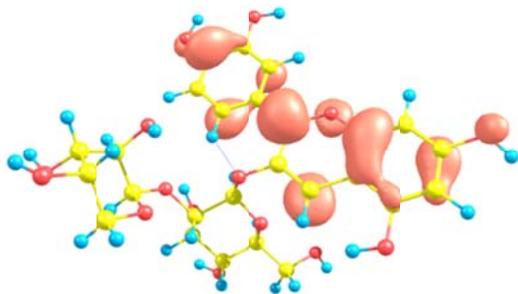
5.5.2.1 Cianidin-3-galactósido



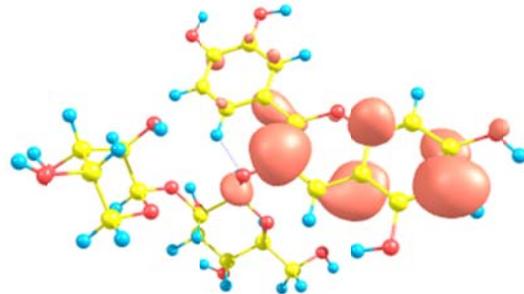
culado
ósido



5.5.2.2 Cianidin-3-sambubiósido



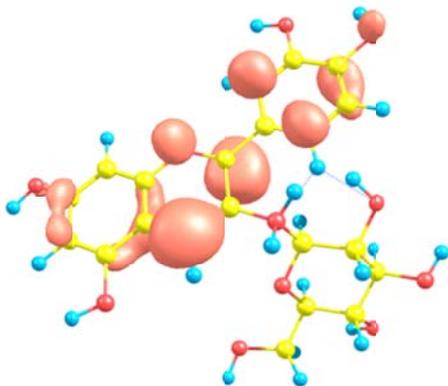
teóricamente



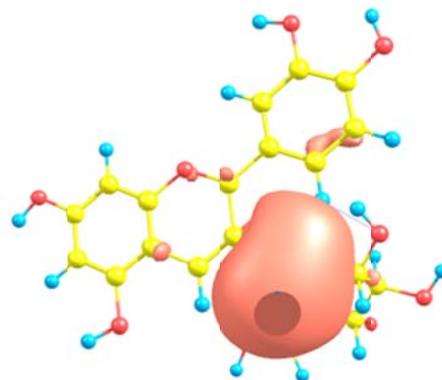
ente

5.5.2.3

Cianidin-3-glucósido



lculado
nidin-3-



lculado
nidin-3-