

Primena kurkumina u solarnim ćelijama sa fotoosetljivim pigmentom

Stefan Ilić, *Student Member, IEEE*, Vesna Paunović, *Member, IEEE*

Apstrakt—Solarne ćelije sa fotoosetljivim pigmentom su najbliže sistemu fotosinteze koji je do sada čovečanstvo postiglo. Njene karakteristike zavise od vrste pigmenta koji se nalazi u solarnoj ćeliji. U radu je obrađen kurkumin kao potencijalni novi pigment u solarnoj ćeliji i upoređen sa najkorišćenijim cijanidinom. Rezultati su pokazali da solarna ćelija sa kurkumom (kurkumin) daje veću efikasnost od solarne ćelije sa malinom (cijanidin), kao i da molekul kurkumina ima veću apsorpciju fotona u vidljivom delu spektra u odnosu na cijanidin. Kada su deprotonovani kurkumin i cijanidin adsorbovani za klaster titanijum dioksida, dobijeni raspored energetskih nivoa ukazuje na veću verovatnoću prelaska elektrona iz molekula u titanijum dioksid u slučaju kurkumina nego u slučaju cijanidina. Na osnovu dobijenih rezultata, zaključili smo da kurkumin ima bolje osobine kao fotoosetljivi pigment u solarnoj ćeliji.

Ključne reči—solarne ćelije; fotoosetljivi pigment; kurkumin; cijanidin; titanijum dioksid; DFT; otpor kontrolisan naponom;

I. UVOD

Solarne ćelije vrše direktnu konverziju sunčeve svetlosti u električnu energiju. Pri izlaganju svetlosti solarna ćelija postaje izvor jednosmerne struje. Princip rada svih solarnih ćelija zasnovan je na fotoelektričnom efektu. Solarne ćelije se mogu podeliti na: solarne ćelije prve, druge i treće generacije.

Solarne ćelije sa fotoosetljivim pigmentom pripadaju trećoj generaciji. Glavni deo ovih ćelija predstavlja porozni sloj nanočestičnog anatas titanijum dioksida za koji se vezuje pigment tj. boja (eng. dye). Vrsta pigmenta, način na koji se vezuje za titanijum dioksid, njegova apsorpcija fotona i drugi efekti utiču na efikasnost ovih ćelija. Od svog nastanka 1991. godine pa do danas, rutenijumski polipiridilni kompleksi su dostigli gotovo 12% efikasnosti i oni važe za najefikasnije pigmente [1]. Međutim, pošto ovi pigmenti sadrže rutenijum (Ru) i zagađuju životnu sredinu, jeftiniju alternativu mogu dati prirodni pigmenti. Među prirodnim pigmentima, postoje tri glavne porodice jedinjenja koji su iskorišćeni kao fotosetljiva boja u solarnoj ćeliji. To su antocijani, betalaini i hlorofili, gde su betalaini postigli najveću efikasnost od 2% [2]. Pored njih postoje i kurkuminoide koji su sa ulogom fotoosetljivog pigmenta u solarnim ćelijama slabo istraženi [3].

U ovom radu su obrađivane dve vrste pigmenta: antocijane i kurkuminoide, tj. njihove glavne predstavnike cijanidin i kurkumin.

Stefan Ilić – Elektronski fakultet, Univerzitet u Nišu, Aleksandra Medvedeva 14, 18000 Niš, Srbija (e-mail: stefan.ilic@yahoo.com).

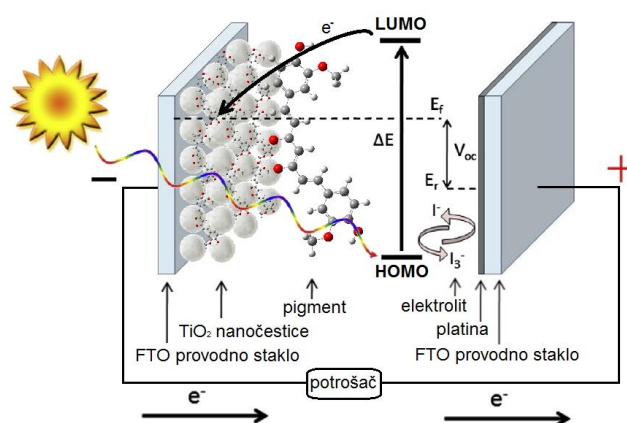
Vesna Paunović – Elektronski fakultet, Univerzitet u Nišu, Aleksandra Medvedeva 14, 18000 Niš, Srbija (e-mail: vesna.paunovic@elfak.ni.ac.rs).

Cilj ovog rada je da se eksperimentalno i simulacijom potvrdi teza da je kurkumin podobniji pigment od cijanidina za potrebe fotoosetljivog pigmenta u solarnim ćelijama.

Najpre će se eksperimentalno odrediti strujno-naponske karakteristike i izmeriti apsorpcioni spektri. Zatim će se pristupiti modelovanju sistema molekul/klaster (molekul koji je vezan za klaster titanijum dioksida), pomoću softvera NWChem [4] koji koristi teoriju funkcionala gustine i vremenski zavisnu teoriju funkcionala gustine, u cilju potvrđivanja eksperimentalnih rezultata.

II. PRINCIP RADA

Kod solarnih ćelija sa fotoosetljivim pigmentom glavna ideja je da se odvoji proces apsorbovanja svetlosti od procesa prikupljanja naelektrisanja, imitirajući prirodni proces prikupljanja svetlosti koji se odvija u fotosintezi, kombinujući fotoosetljivu boju sa poluprovodnikom [5]. Ovo omogućava upotrebu poluprovodnika široke zabranjene zone, gde se najbolje pokazao titanijum dioksid (TiO_2). Ove vrste solarnih ćelija najbliže imitiraju proces fotosinteze. One se sastoje od fotoaktivne anode, elektrolita i pomoćne platinske elektrode. Fotoaktivnu elektrodu (anodu) čini porozni sloj titan(IV)-oksida, visoke specifične površine, koji je deponovan na transparentno provodno staklo, i na kojem su adsorbovani molekuli fotoosetljive boje. Provodljivosti stakla doprinosi tanak sloj fluorom dopiranog kalaj-oksida (FTO glass), čija debljina od oko 220 μm omogućava transport fotogenerisanih nosilaca naelektrisanja. Prostor između elektroda ispunjen je elektrolitom na bazi joda (Sl. 1).



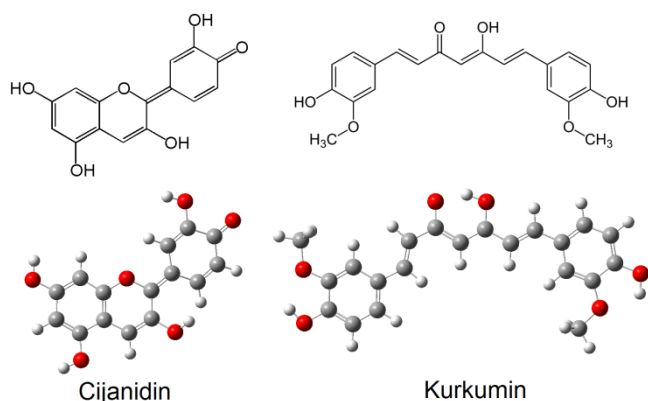
Sl. 1. Šematski prikaz solarne ćelije sa fotoosetljivim pigmentom

Pri prodoru zračenja u solarnu ćeliju kroz transparentno provodno staklo, molekuli boje bivaju pobuđeni i preko provodne zone poluprovodničkog TiO_2 elektroni dolaze do spoljnog električnog kola. Gubitak elektrona molekuli boje

kompenzuju preko elektrolita (jod se oksiduje), dok elektrolit nadoknađuje izgubljene elektrone na pomoćnoj elektrodi. Dakle, operativni mehanizam solarnih ćelija sa fotoosetljivom bojom omogućava generisanje električne energije bez ireverzibilne hemijske promene u ćeliji. Kao što se može pretpostaviti iz opisanog mehanizma, molekuli boje igraju ključnu ulogu u proizvodnji električne energije. Njihova uloga je da apsorbuju fotone, tj. da prevaziđu malu apsorpcionu moć titan(IV)-oksida, i samim tim povećaju efikasnost solarne ćelije. Prema tome, što je veća apsorpciona moć boje, time je i ćelija efikasnija.

III. FOTOSETLJIVE BOJE

Fotoosetljivi pigmenti ili boje (eng. dye-sensitizers) imaju ulogu apsorbera energije u solarnoj ćeliji. Veliki problem prirodnih pigmenta je degradacija prilikom dužeg izlaganja sunčevoj svetlosti zbog dejstva UV zračenja. Na slici 2 su prikazane strukturne formule cijanidina i kurkumina, kao i njihovi 3D modeli koji će biti vezani za klaster titanijum dioksida (prethodno su relaksirani pomoću NWChem-a).



Sl. 2. Strukturna formula i 3D model cijanidina i kurkumina

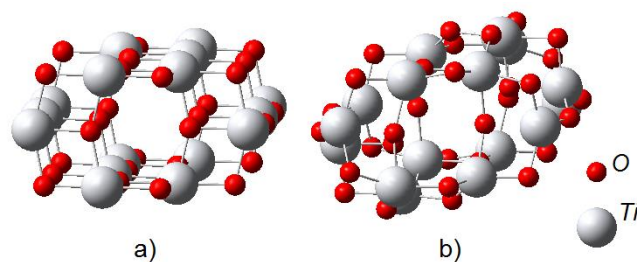
Antocijani su biljni pigmenti koji se mogu javljati u različitim bojama (crvenoj, plavoj ili ljubičastoj) u zavisnosti od pH vrednosti. U najvećoj koncentraciji javljaju se u plodovima i cvetovima. Novu primenu su našli u solarnim ćelijama jer imaju značajnu apsorpciju u vidljivom delu spektra, s tim da samo antocijani sa prisutnim -O i -OH vezama (npr. cijanidin koji se nalazi u malini) mogu da služe kao fotoosetljive komponente, zbog mogućnosti vezivanja za titan(IV)-oksid.

Kurkumin je glavni predstavnik kurkuminoida koji se nalazi u indijskom začinu kurkuma. Kurkuminoidi, kao i antocijani spadaju u fenole, s tim da kurkuminoidi daju izrazito žutu boju, zbog koje se koriste za bojenje hrane, sa prehrambenom oznakom E100.

IV. MODEL I DETALJI PRORAČUNA

Za model nanočestičnog anatas TiO_2 , korišćen je klaster $(\text{TiO}_2)_{16}$ dobijen pravilnim "sečenjem" anatas strukture (Sl. 3). Za pravilno sečenje potrebno je ispuniti tri uslova: da svaki atom titanijuma gradi minimalno četiri veze sa okolnim

kiseonicima, da svaki kiseonik gradi minimalno dve veze sa okolnim atomima titanijuma, kao i da odnos broja atoma titanijuma i kiseonika u klasteru bude 1:2 [6]. Nakon optimizacije klastera $(\text{TiO}_2)_{16}$ izračunato je da širina zabranjene zone iznosi 4.52 eV.



Sl. 3. Model anatas $(\text{TiO}_2)_{16}$ klastera pre (a) i posle (b) optimizacije.

Za sve proračune je korišćen javno dostupni softver NWChem. U proračunima pomoću teorije funkcionala gustine i vremenski zavisne teorije funkcionala gustine korišćen je B3LYP funkcional i 6-31G skup bazisnih funkcija. Teorija funkcionala gustine (Density functional theory, skraćeno DFT) predstavlja moćan alat za rešavanje višestrukih problema u kvantnoj mehanici. Omogućuje da se komplikovana N-elektronska talasna funkcija i njoj pridružena Šredingerova jednačina zamene mnogo jednostavnijim jednoelektronskim jednačinama u kojima figuriše elektronska gustina naelektrisanja. TDDFT (Time-dependent density functional theory) predstavlja skraćenicu od vremenski zavisne teorije funkcionala gustine.

V. PROCES IZRADE

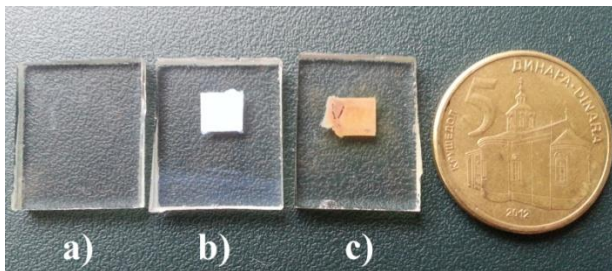
Konstrukcija solarne ćelije zahteva pripremu titan(IV)-oksid filмова, ekstrakciju pigmenta, pripremu elektrolita i na kraju sklapanje ćelije.

A. Priprema TiO_2 filмова

Za pripremu filмова korišćen je nanočestični prah TiO_2 (P25 Degussa). Voda i sirćetna kiselina su dodate zbog doprinosa mehaničkim svojstvima filмова, tj. dobroj adheziji za supstrat i sprečavanju nastanka pukotina. Terpeneol je dodat radi sprečavanja rasta čestica, a etil-celuloza radi postizanja poroznosti filмова, usled dekompozicije tokom termičkog tretmana. Filmovi su deponovani doctor-blade tehnikom na provodna FTO stakla. Doktor blejd tehniku (doctor-blade) čini premazivanje provodnog stakla slojem TiO_2 paste pomoću žileta, dok se skoč traka (scotch tape) koristi kao maska koja daje oblik nanesenom sloju (obično oblik kvadrata) i uniformnu debljinu filma od oko 40 μm . Pravljeni su filmovi kvadratnog oblika, dimenzija 5x5mm, početne debljine 40 μm , odnosno finalne debljine 10-11 μm , nakon sušenja i termičkog tretmana. Filmovi su nakon depozicije ostavljeni na sobnoj temperaturi nekoliko minuta, da bi potom svaki film zbog kalcinacije bio tretiran postupkom: 120°C/10 min, na 250°C/10min, na 400°C/10, na 450°C/5 min, i konačno na 500°C/15 min.

B. Ekstrakcija pigmentata

Antocijani su ekstrahovani iz zamrznute maline po uzoru na uputstvo iz Solaroniksa (Solaronix) [7]. Maline su izdrobljene u avanu pomoću tučka. Rastvor kurkumina napravljen je upotrebom komercijalnog začina kurkume. Postupak pripreme uključivao je rastvaranje 5 grama mase sirovine u etanolu zapremine 6.34 cm^3 . Pripremljeni rastvori skladišteni su na sobnoj temperaturi i mračnom mestu, da bi se sprečila njihova fotodegradacija. Filmovi su potom prebačeni u rastvore pigmentata i ostavljeni 1 sat na 25°C i mračnom mestu, ali su prilikom bojenja prethodno zagrejani na 80°C da bi se sprečilo neželjeno vezivanje vlage iz vazduha za TiO_2 . Na slici 4 je prikazan izgled fotoaktivne anode nakon svakog postupka, hronološki.



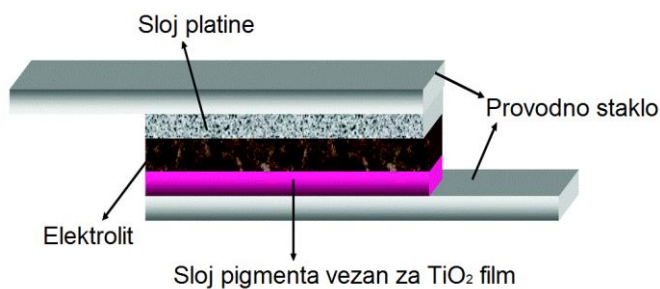
Sl. 4. Provodno staklo (a), provodno staklo sa deponovanim TiO_2 filmom nakon kalcinacije (b), formirana fotoaktivna elektroda (c).

C. Priprema elektrolita

Elektrolit je pripremljen tako što je u 20 ml etilen glikola rastvoreno 1.66 g litijum jodida (0.5M LiI) i 0.254 g joda (0.05M I_2) na temperaturi 50°C uz mešanje.

D. Sklapanje ćelija

Nakon bojenja, filmovi su pažljivo isprani etanolom i destilovanom vodom, a nakon sušenja toplim vazduhom spojeni sa pomoćnom platinskom elektrodom i pričvršćeni pomoću štipaljki.

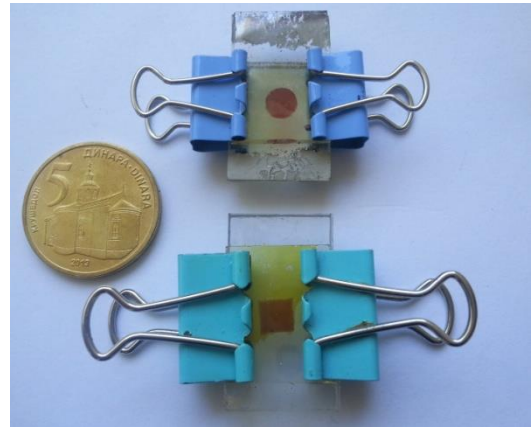


Sl. 5. Presek ćelije po slojevima

Platinska transparentna elektroda pripremljena je doctorblade depozicijom komercijalno dostupne platinske paste (Platisol T/SP, Solaronix) na FTO staklu i daljim termičkim tretmanom na 450°C tokom 30 minuta. Na slici 5 dat je šematski prikaz preseka ćelije po slojevima.

Nakon spajanja elektroda, pritisak štipaljki je nezatno popušten i omogućen je dodatak elektrolita u međuprostor

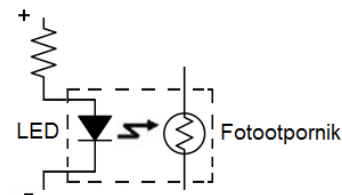
između elektroda iglom i špricom, čime je završen proces sklapanja ćelije (Sl. 6).



Sl. 6. Finalni izgled ćelija sa bojom N719 (gore) i sa kurkumom (dole)

VI. MERENJE STRUJNO-NAPONSKIH KARAKTERISTIKA

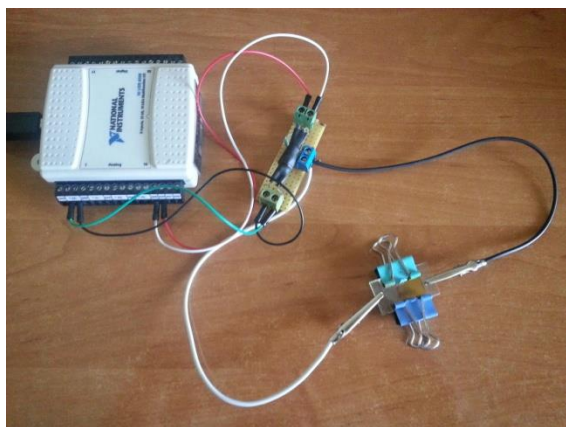
Prilikom merenja strujno-naponske karakteristike solarne ćelije potrebno je meriti napon na ćeliji i struju koja prolazi kroz ćeliju kada je ona izložena sunčevom zračenju za različite vrednosti otpora u kolu. Kasnije se na osnovu tih rezultata crta strujno-naponska karakteristika. Pošto solarne ćelije sa prirodnim pigmentima daju jako slabe struje reda veličine mikro ampera, struja u kolu nije merena direktno pomoću ampermetra, jer bi on dosta poremetio rezultate. Umesto toga, struja je određivana indirektno, na osnovu poznavanja otpora i napona u kolu. To je izvedeno pomoću LE diode i fotootpornika koji se nalaze okrenuti jedan prema drugom u mračnom i zatvorenom sistemu. Dakle, koristi se tzv. otpor kontrolisan naponom, jer zadajući različite napone na LE diodi dobijamo različite otpore na fotootporniku (Sl. 7).



Sl. 7. Šema elektronske komponente koja je sastavljena od LE diode i fotootpornika

Kako ne bismo menjali napon ručno na LE diodi i merili napon na ćeliji, a zatim preračunavali struju u kolu, korišćen je multifunkcionalni sistem NI USB-6008 [8]. On je za poznate 1136 vrednosti otpora na fotootporniku, koji ima opseg od $367\text{--}250000 \Omega$, zadavao vrednosti napona na LE diodi, a zatim nakon 10 milisekundi merio napon na solarnoj ćeliji koja je pritom bila izložena sunčevom zračenju (Sl. 8).

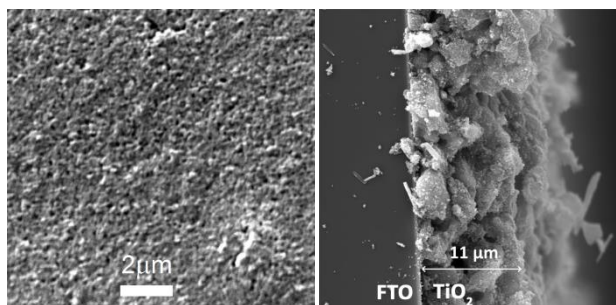
Na osnovu poznatog otpora i napona u kolu izračunata je struja, a zatim ispisivana tabela sa vrednostima struje i napona. Na osnovu rezultata koji su dobijeni ovakvim merenjem iscrtavana je strujno-naponska karakteristika.



Sl. 8. Prikaz aparature koja je korišćena za merenje strujno-naponske karakteristike solarne ćelije

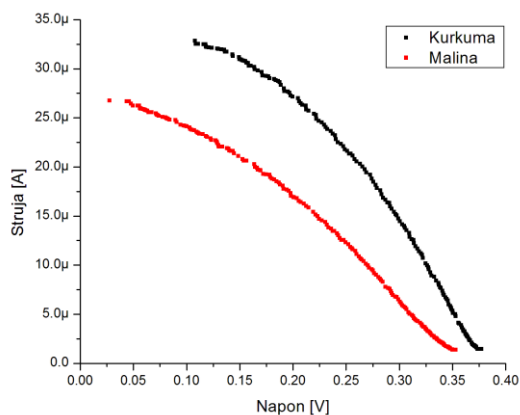
VII. EKSPERIMENTALNI REZULTATI

Analiza filmova TiO_2 skenirajućom elektronskom mikroskopijom potvrđuje prisustvo razvijene površine i porozne strukture (Sl. 9).



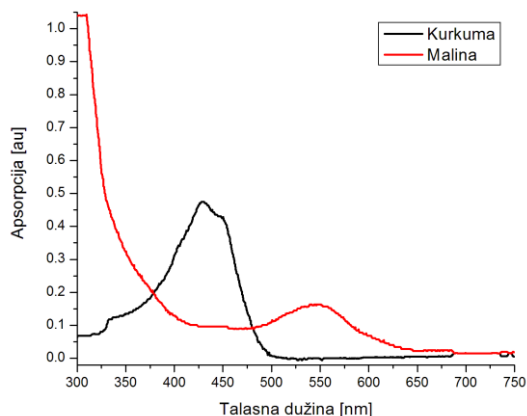
Sl. 9. SEM prikaz morfologije TiO_2

Na osnovu merenja strujno-naponskih karakteristika solarnih ćelija sa fotoosetljivim pigmentom, dobijeni su rezultati za prirodne pigmente tj. za cijanidin (ekstraktovan iz maline) i kurkumin (ekstraktovan iz začina kurkume), kao i za rutenijumsku boju N719. Sve karakteristike snimane su pri intenzitetu sunčevog zračenja od 790 W/m^2 .



Sl. 10. Strujno-naponske karakteristike solarne ćelije sa kurkumom i solarne ćelije sa malinom

Na slici 10 može se videti strujno-naponske karakteristike solarne ćelije sa kurkumom i solarne ćelije sa malinom. Solarne ćelija na bazi kurkume ima izračunatu efikasnost od 0.028% i fill faktor 45%, dok solarne ćelija sa malinom ima efikasnost od 0.017% i fill faktor vrednosti 36%. Upoređivanjem strujno-naponskih karakteristika možemo utvrditi da solarne ćelije na bazi kurkume daje veću struju. Rezultate sa grafika možemo objasniti apsorpcionim spektrima maline i kurkume (Sl. 11). Kurkuma je aktivna u vidljivoj oblasti 400-500 nm i poseduje pik na 429.6 nm, dok se kod maline primećuje aktivnost u vidljivoj oblasti 500-600 nm sa pikom na 544 nm što je i karakteristika antocijana [9].

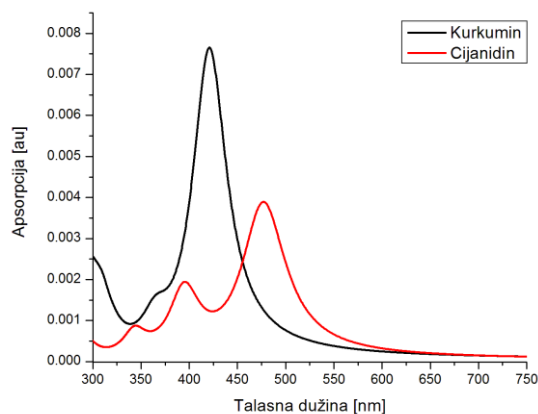


Sl. 11. Apsorpcioni spektar maline i kurkume

Spektri su snimani pomoću Perkin-Elmer Lambda 15 UV/Vis spektrofotometra. Uzorci nisu imali istu koncentraciju rastvora, kurkuma ima znatno veću apsorpciju od prikazane.

VIII. REZULTATI DOBIJENI SIMULACIJOM

Na osnovu TDDFT izračunati su apsorpcioni spektri za cijanidin i kurkumin (Sl. 12). Ovi spektri su u dobrom slaganju sa eksperimentalnim vrednostima koji su prethodno određeni (Sl. 11). Apsorpcija kurkumina je veća po intenzitetu od cijanidina, što može objasniti veću efikasnost ćelije.



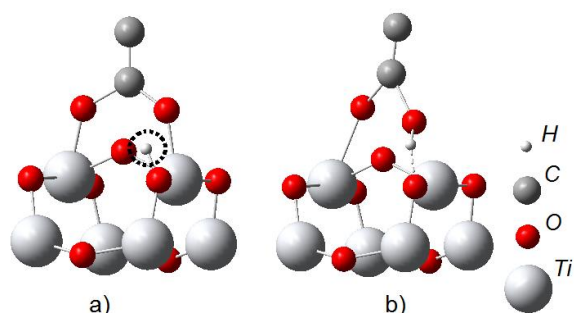
Sl. 12. Apsorpcioni spektri cijanidina i kurkumina.

Nakon izvršene optimizacije za molekule cijanidina i kurkumina izračunate su HOMO-LUMO zone koje inose: za

cijanidin 2.43 eV, što je u odličnom poklapanju sa referentnim radom [5], a za kurkumin 3.22 eV.

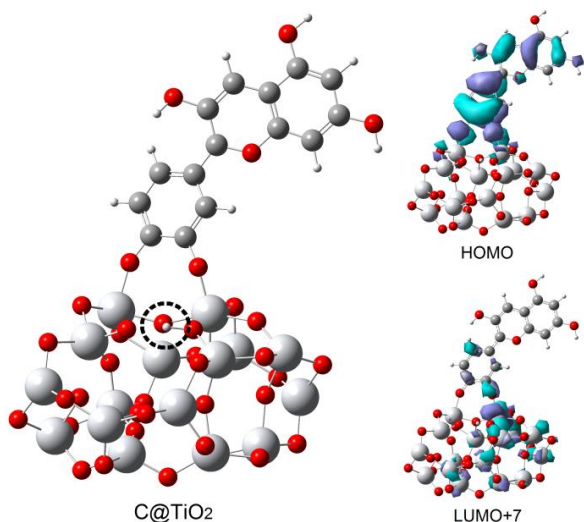
HOMO (highest occupied molecular orbital) i LUMO (lowest unoccupied molecular orbital) predstavljaju granice valentne i provodne zone kod organskih molekula, a HOMO-LUMO zona je analogna zabranjenoj zoni kod poluprovodnika.

Kada se molekul veže za strukturu titanijum dioksida sa hidroksilnom (-OH) ili karboksilnom (-COOH) grupom dolazi do deprotonacije. Deprotonacija je proces kada molekul izgubi proton i postane negativno naelektrisan. Kod cijanidina i kurkumina prilikom deprotonacije H atom se premešta sa hidroksilne grupe na strukturu TiO₂. Ovaj proces smanjuje energiju sistema. Postoji nekoliko načina za vezivanje molekula za strukturu titanijum dioksida (Sl. 13) [10].



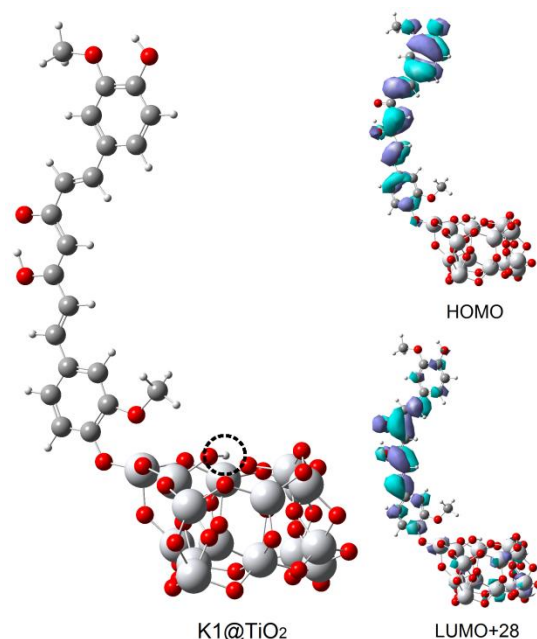
Sl. 13. Prikaz regije klastera za koji je vezan pigment dvostrukom vezom (a) i jednostrukom (b). Tačkasti krugovi označavaju pozicije protona.

Na slici 13a možemo videti da je molekul formirao dvostruku vezu nakon izvršene deprotonacije, uočavamo da je atom vodonika (zaokružena bela kuglica) vezan za kiseonik iz klastera titanijum dioksida. Međutim, molekul se može vezati kao na slici 13b bez izvršene deprotonacije ako ima karbonylnu (-C=O) grupu. Atom vodonika u tom slučaju može biti vezan vodoničnom vezom za kiseonik iz TiO₂.

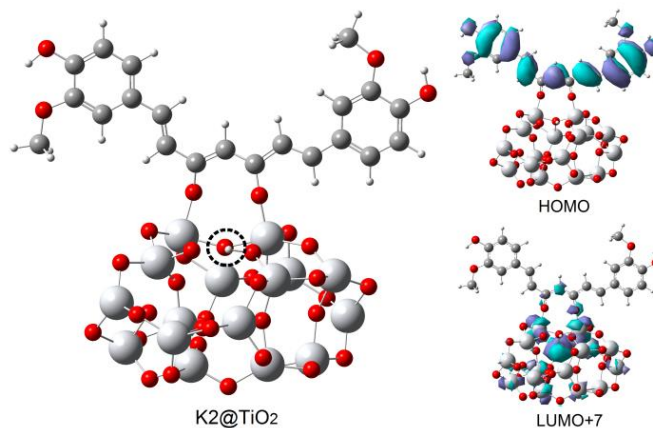


Sl. 14. Optimizovana geometrijska struktura cijanidina koji je vezan dvostrukom vezom (C@TiO₂) za (TiO₂)₁₆ model kao i gustine naelektrisanja orbitala za HOMO i LUMO+7 nivoe.

U našem slučaju posmatraćemo tri sistema molekula vezanih za TiO₂. U svakom od njih je izvršena deprotonacija. Tačkasti krugovi označavaju pozicije protona koji su deprotonacijom prešli sa molekula na klaster TiO₂ (Sl. 14, 15 i 16). Na slikama su takođe prikazane orbitale sistema putem gustine naelektrisanja orbitala.



Sl. 15. Optimizovana geometrijska struktura kurkumina vezanog jednostrukom vezom (K1@TiO₂) za (TiO₂)₁₆ model kao i gustine naelektrisanja orbitala za HOMO i LUMO+28 nivoe.



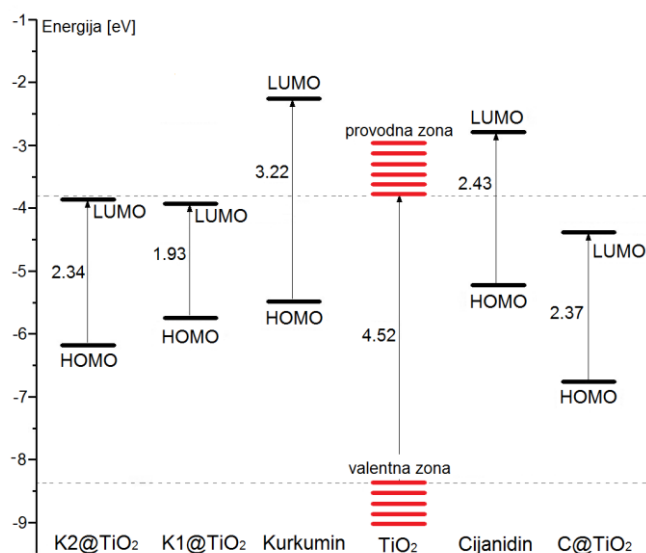
Sl. 16. Optimizovana geometrijska struktura kurkumina vezanog dvostrukom vezom (K2@TiO₂) za (TiO₂)₁₆ model kao i gustine naelektrisanja orbitala za HOMO i LUMO+7 nivoe.

U slučaju C@TiO₂ i K2@TiO₂ prvi nivo iznad LUMO koji je delokalizovan na celom sistemu molekul/klaster je LUMO+7 (energije -2.859 eV za C@TiO₂ i -3.039 eV za K2@TiO₂). U slučaju K1@TiO₂ prvi takav nivo je LUMO+28, koji je na većoj energiji (-2.597 eV). Apsorpcija elektrona iz valentne zone na nive LUMO+7 i LUMO+28 vode direktnoj injekciji elektrona [11] u TiO₂, jer su nivou

delokalizovani duž celog sistema.

Nakon izvršene optimizacije za tri sistema molekula i klastera izračunate su HOMO-LUMO zone koje iznose: za C@TiO₂, K1@TiO₂ i K2@TiO₂ redom 2.37 eV, 1.93 eV i 2.34 eV. Primećujemo da su se zone smanjile nakon vezivanja molekula za klaster, takođe da kurkumin ima najmanju HOMO-LUMO zonu kada je vezan jednostrukom vezom sa bočne strane za klaster. Na osnovu ovih rezultata je napravljen grafik energija nivoa elektrona u modelima koje smo simulirali (Sl. 17).

Kako bi ćelija bila što efikasnija potrebno je da se HOMO nivo pigmenta nalazi u zabranjenoj zoni poluprovodnika TiO₂ i da LUMO nivo leži uz provodnu zonu poluprovodnika [5]. Uočavamo da se HOMO nivoi sva tri sistema molekula/klaster nalaze u procepu TiO₂, kao i da se LUMO nivoi nalaze ispod dna provodne zone tj. ispod CBM (conduction band minimum). Energija na kojoj se nalazi CBM je -3.835 eV. Najbliži dnu provodne zone je LUMO za K2@TiO₂ (-3.842 eV), zatim LUMO za K1@TiO₂ (-3.925 eV) i na kraju LUMO za K2@TiO₂ (-4.386 eV). Kod svih sistema se svi ostali LUMO nivoi nalaze u provodnoj zoni TiO₂ klastera.



Sl. 17. Šematski dijagram energijskih nivoa cijanidina, kurkumina, TiO₂ modela i tri sistema molekula/klaster.

Rezultati potvrđuju da će elektroni lakše doći do provodne zone u slučaju sistema sa kurkuminom nego u slučaju sistema sa cijanidinom, što ukazuje na još jedan razlog zašto ćelija sa kurkuminom ima veću efikasnost.

IX. ZAKLJUČAK

Eksperimentom smo pokazali da je kurkuma (glavni predstavnik kurkumin) bolji izvor fotoosetljivog pigmenta nego antocijani (glavni predstavnik cijanidin) i da ćelija sa kurkumom daje veću efikasnost, što je pomoću modelovanja i potvrđeno. Zaključujemo na osnovu dobijenih rezultata da je kurkumin podobniji pigment od cijanidina za potrebe solarnih

ćelija sa fotoosetljivim pigmentom i da treba nastaviti sa istraživanjima u ovom pravcu.

ZAHVALNICA

Zahvaljujem se Istraživačkoj stanici Petnica, Departmanu za hemiju na PMF-u u Nišu, Institutu za fiziku u Beogradu i Ministarstvu prosvete, nauke i tehnološkog razvoja na pruženoj velikoj pomoći i saradnji.

LITERATURA

- [1] B. O'Regan, M. Gratzel, "A low-cost, high-efficiency solar cell based on dye-sensitized colloidal TiO₂ films," *Nature*, vol. 353, pp. 737-740, 1991.
- [2] G. Calogero, J. Yum, A. Sinopoli, G. Di Marco, M. Gratzel, M. K. Nazeeruddin, "Anthocyanins and betalains as light-harvesting pigments for dye-sensitized solar cells," *Solar Energy*, vol. 86, pp. 1563-1575, 2012.
- [3] H. Kim, D. Kim, S.N. Karthick, K.V. Hemalatha, C. Justin Raj, Sunseong ok, Youngson choe, "Curcumin Dye Extracted from Curcuma longa L. Used as Sensitizers for Efficient Dye-Sensitized Solar Cells," *Int. J. Electrochem. Sci.*, vol. 8, pp. 8320-8328, 2013.
- [4] M. Valiev, et al., "NWChem: a comprehensive and scalable open-source solution for large scale molecular simulations," *Computer Physics Communications*, vol. 181, pp. 1477-1489, 2010.
- [5] S. Meng, J. Ren, E. Kaxiras, "Natural Dyes Adsorbed on TiO₂ Nanowire for Photovoltaic Applications: Enhanced Light Absorption and Ultrafast Electron Injection," *Nano Letters*, vol. 8, no.10, pp. 3266-3272, 2008.
- [6] P. Persson, J. C. M. Gebhardt, S. Lunell, "The Smallest Possible Nanocrystals of Semiconducting Oxides," *The Journal of Physical Chemistry B*, vol. 107, pp. 3336-3339, 2003.
- [7] Sa zvaničnog sajta Solaronix-a [On Line]. Dostupno na: http://www.solaronix.com/documents/dye_solar_cells_for_real.pdf
- [8] Multifunkcionalni sistem NI USB-6008. Dostupno na: <http://www.ni.com/pdf/manuals/371303n.pdf>
- [9] I. Đorđević, S. Ilić, "Primena različitih prirodnih pigmenta kao fotoosetljive komponente u solarnim ćelijama," *Petničke sveske*, vol. 73, pp. 96-105, 2014.
- [10] E. Ronca, M. Pastore, L. Belpassi, F. Tarantelli, F. De Angelis, "Influence of the dye molecular structure on the TiO₂ conduction band in dye-sensitized solar cells: disentangling charge transfer and electrostatic effects," *Energy & Environmental Science*, vol. 6, pp. 183-193, 2013.
- [11] D. Rocca, R. Gebauer, F. De Angelis, M. Nazeeruddin, S. Baroni, "Time-dependent density functional theory study of squaraine dye-sensitized solar cells," *Chemical Physics Letters*, vol. 475, pp. 49-53, 2009.

ABSTRACT

Dye-sensitized solar cells are the closest mankind has come to replicating nature's photosynthesis. The type of a dye influence the efficiency of these cells. In this paper we studied curcumin dye as sensitizer in dye-sensitized solar cells and compared him with mostly used cyanidin. The results have shown that curcumin has higher efficiency and higher absorption in the visible part of the spectrum compared to cyanidin. Model dye molecules, curcumin and cyanidin, are deprotonated upon adsorption on the titanium dioxide surface. The energy levels obtained from the calculation indicate a higher probability of electron transition from molecule to titanium dioxide surface in the case of curcumin than in the case of cyanidin. Based on these results, we concluded that curcumin dye has better properties as sensitizer in dye-sensitized solar cells.

Application of Curcumin in Dye-Sensitized Solar Cells

Stefan Ilic, Vesna Paunović