

**Коровин Яков Сергеевич**

Технологический институт федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего профессионального образования «Южный федеральный университет» в г. Таганроге.

E-mail: korovin\_yakov@mail.ru.

347930, г. Таганрог, 28 пер., дом 14 "В"

Тел.: 88634315941.

Кафедра интеллектуальных и многопроцессорных систем; к.т.н.

**Хисамутдинов Максим Владимирович**

E-mail: L-V-P@yandex.ru.

г. Таганрог, ул. Безымянный пр-д., 7/1, кв. 8.

Кафедра интеллектуальных и многопроцессорных систем; аспирант.

**Korovin Yakov Sergeevich**

Taganrog Institute of Technology – Federal State-Owned Autonomy Educational Establishment of Higher Vocational Education “Southern Federal University”.

E-mail: korovin\_yakov@mail.ru.

44, Nekrasovskiy, Taganrog, 347928, Russia.

Phone: +78634315941.

The Department of Intellectual and Multiprocessing Systems; Cand. of Eng. Sc.

**Khisamutdinov Maxim Vladimirovich**

E-mail: L-V-P@yandex.ru.

7/1, Anonymous pr-d. Street, sq. 8, Taganrog, Russia.

The Department of Intellectual and Multiprocessing Systems; Postgraduate Student.

УДК 621.383+539.21

**С.П. Малюков, А.В. Саенко**

**МОДЕЛИРОВАНИЕ ПОГЛОЩЕНИЯ СОЛНЕЧНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ  
ПЛЁНКОЙ TiO<sub>2</sub> В СЕНСИБИЛИЗИРОВАННОМ КРАСИТЕЛЕМ  
СОЛНЕЧНОМ ЭЛЕМЕНТЕ**

*Сенсибилизированные красителем солнечные элементы (СКСЭ) имеют уникальную структуру, значительно отличающуюся от других типов солнечных элементов. В этих элементах большое влияние на эффективность преобразования солнечного излучения оказывает структура плёнки TiO<sub>2</sub>, а также свойства молекул красителя. В статье представлено разработанное приложение MatLab для моделирования поглощения солнечного излучения сенсибилизированной красителем плёнкой TiO<sub>2</sub>. Разработанное приложение позволяет оценить влияние толщины плёнки и диаметр частиц TiO<sub>2</sub> на её поглощение солнечного излучения.*

*Поглощение солнечного излучения; сенсибилизированный красителем солнечный элемент; наноструктурная плёнка TiO<sub>2</sub>.*

**S.P. Malyukov, A.V. Saenko**

**SIMULATION OF ABSORPTION SOLAR RADIATION TiO<sub>2</sub> FILM  
IN DYE-SENSITIZED SOLAR CELL**

*Dye-sensitized solar cells (DSSC) have the unique structure considerably different from other types of solar cells. In these cells the big influence on efficiency conversion solar radiation is rendered by structure of TiO<sub>2</sub> films and also properties of dye molecules. In article developed MatLab application for simulation of solar radiation absorption dye-sensitized TiO<sub>2</sub> film is presented. Designed application allows to evaluate the influence of film thickness and the diameter of the TiO<sub>2</sub> particles on its solar radiation absorption.*

*Solar radiation absorption; dye-sensitized solar cell; nanostructured TiO<sub>2</sub> film.*

Хранение, производство и преобразование энергии являются одними из главных направлений развития науки и техники, в которых ожидается значительный экономический эффект от внедрения нанотехнологий. Нанотехнологии пока слабо используются в производстве солнечных элементов. Однако они будут играть всё возрастающую роль в будущем. Создание сенсibilизированных красителем солнечных элементов (СКСЭ) на основе нанопористого диоксида титана ( $\text{TiO}_2$ ) является ярким примером внедрения нанотехнологических разработок, заключающиеся в использовании наночастиц для увеличения рабочей поверхности плёнки  $\text{TiO}_2$ , что способствует значительному увеличению эффективности преобразования солнечного излучения [1].

СКСЭ представляет собой фотоэлектрохимический элемент, состоящий из двух электродов, промежутком между которыми заполняется раствором электролита, содержащим обратимую окислительно-восстановительную пару, обычно  $\text{I}^-/\text{I}_3^-$  (рис. 1). Выбор материалов для такой структуры осуществляется на основании зонной энергетической диаграммы многослойной гетероструктуры. Подложкой для электродов обычно служит стекло с покрытием из прозрачного проводящего оксида (TCO), например, оксида олова легированного фтором ( $\text{SnO}_2:\text{F}$ ). Фотоэлектродом в элементе является нанопористая плёнка  $\text{TiO}_2$  с абсорбированным на её поверхности монослоем органического красителя. Противозлектродом в элементе является тонкий каталитический слой платины или углерода. СКСЭ рассматриваются в качестве многообещающих возобновляемых источников энергии, из-за их потенциально недорогой технологии изготовления по сравнению с солнечными элементами на основе твёрдотельного p-n-перехода [2,3].

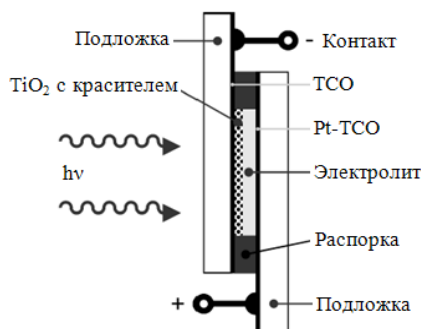


Рис. 1. Поперечное сечение СКСЭ

Солнечное излучение в СКСЭ поглощается фотоэлектродом  $\text{TiO}_2$ , который имеет высокую химическую стабильность к фотокоррозии при освещении в растворе электролита. Однако у  $\text{TiO}_2$  фактически отсутствует поглощение солнечного спектра, кроме ультрафиолетовой области (до 390 нм) из-за большой ширины запрещенной зоны  $E_G = 3,2$  эВ. Для расширения спектрального диапазона поглощения фотоэлектрода  $\text{TiO}_2$  применяется абсорбция на его поверхности молекул красителя (сенсibilизация), имеющих границу поглощения до 800-900 нм в зависимости от свойств красителя. Главная проблема здесь заключается в том, что эффективное поглощение и преобразование солнечного излучения осуществляют только те молекулы, которые находятся непосредственно на поверхности  $\text{TiO}_2$  в виде монослоя. При этом монослой красителя способен поглощать в лучшем случае лишь несколько процентов падающего солнечного света, что ограничивает эффективность преобразования солнечного излучения [2]. Таким образом, самым важным для работы СКСЭ является развитие нанопористой структуры  $\text{TiO}_2$ , что

способствует значительному увеличению площади поверхности плёнки  $\text{TiO}_2$  для абсорбции большого количества поглощающих молекул красителя и, как следствие, достижению примерно 100 % поглощения солнечного излучения.

Данная работа посвящена разработке приложения MatLab с графическим интерфейсом в визуальной среде Guide для отражения влияния параметров сенсibilизированной красителем плёнки  $\text{TiO}_2$  на её поглощение солнечного излучения и определения необходимой толщины плёнки соответствующей примерно 100 % поглощению солнечного излучения. При проведении моделирования использовались средние значения для молярных коэффициентов поглощения молекул красителя.

Основными характеристиками сенсibilизированной красителем плёнки  $\text{TiO}_2$  используемыми при моделировании, являются диаметр наночастиц, которые после спекания формируют нанопористую структуру  $\text{TiO}_2$ , пористость плёнки  $\text{TiO}_2$ , молярный коэффициент поглощения красителя и площадь, занимаемая молекулой красителя на поверхности  $\text{TiO}_2$ . Полная площадь поверхности такой нанопористой плёнки по сравнению с её геометрической площадью поверхности возрастает в 1000 раз при толщине плёнки 10 мкм и диаметре частиц 25 нм. Поэтому количество абсорбированных молекул красителя значительно увеличивается (до порядка  $10^{-7}$  моль/см<sup>2</sup> при занимаемой площади молекулой 1-2 нм<sup>2</sup>), что приводит к увеличению эффективности поглощения солнечного излучения. Необходимо отметить, что толщина нанопористой плёнки  $\text{TiO}_2$ , используемой в СКСЭ, ограничивается диффузионной длиной электронов, которая составляет порядка 15 мкм, поэтому оптимальной считается толщина плёнки 10-12 мкм [2,3].

В основе разработанного приложения (рис. 2) лежит закон Бугера-Ламберта-Бера, отражающий поглощение излучения веществом молекулярного состава. Согласно этому, долю излучения, прошедшую сквозь сенсibilизированную красителем нанопористую плёнку  $\text{TiO}_2$ , можно представить в виде соотношения [4,5]:

$$J_L/J_0 = 10^{-\varepsilon CL} = 10^{-\Gamma\sigma}, \quad (1)$$

где  $J_L$ ,  $J_0$  – интенсивности прошедшего и падающего излучения (мВт/см<sup>2</sup>);  $C$  – концентрация поглощающих молекул красителя (моль/л);  $L$  – толщина сенсibilизированной красителем плёнки  $\text{TiO}_2$ ;  $\varepsilon$  – десятичный молярный коэффициент экстинкции (поглощения) молекул красителя, который зависит от длины волны излучения и составляет порядка  $10^4$ - $10^5$  л/(моль·см);  $\Gamma$  – количество молекул красителя на квадратном сантиметре полной площади поверхности плёнки  $\text{TiO}_2$  (моль/см<sup>2</sup>);  $\sigma$  – поперечное сечение поглощения молекулы красителя (см<sup>2</sup>/моль), полученное из  $\varepsilon$  умножением на 1000 см<sup>3</sup>/л [6].

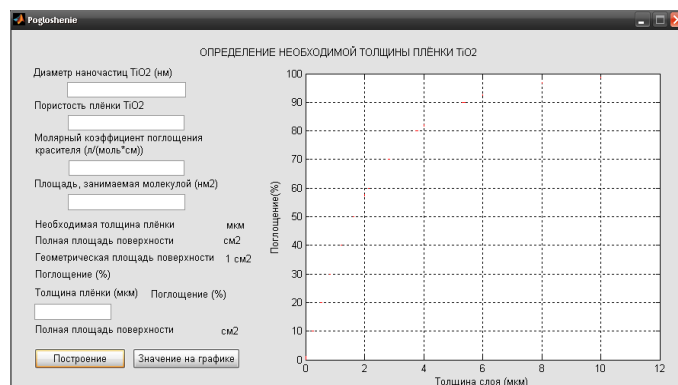


Рис. 2. Вид разработанного приложения MatLab

Справедливость закона Бугера-Ламберта-Бера основано на предположении, что скорость потери фотонов пропорциональна скорости столкновений между падающими фотонами и поглощающими молекулами красителя.

Таким образом, интенсивность поглощённого излучения  $J_{\text{погл}}$  составляет разность  $J_0 - J_L$ , так, что доля поглощённого солнечного излучения соответствует:

$$A = \frac{J_{\text{погл}}}{J_0} = 1 - 10^{-\Gamma\sigma}, \quad (2)$$

где  $A$  – поглощение солнечного излучения материалом [4].

Очевидно, что величина  $A$  может меняться от 0 или 0 % (при умножении на 100 %), при котором излучение проходит через плёнку  $\text{TiO}_2$ , не поглощаясь до 1 или 100 %, при котором всё излучение поглощается в плёнке.

На основе представленного выражения (2) было получено уравнение для построения зависимости поглощения солнечного излучения  $A$  сенсibilизированной нанопористой плёнки  $\text{TiO}_2$  от её толщины  $L$ :

$$A = 1 - 10^{-\frac{6000(1-p)\varepsilon L}{N_A S_{\text{мол}} d}}, \quad (3)$$

где  $d$  – диаметр наночастиц  $\text{TiO}_2$ ;  $S_{\text{мол}}$  – площадь, занимаемая молекулой красителя на поверхности  $\text{TiO}_2$ ;  $N_A$  – постоянная Авогадро;  $p$  – пористость плёнки  $\text{TiO}_2$ .

Необходимо отметить, что пористость является характеристикой размера и количества пор в плёнке и определяется отношением объёма пор в плёнке к объёму всей плёнки вместе с порами и твёрдой фазой. Поэтому при  $p = 0$  материал плёнки не является пористым, а при  $0 < p < 1$ , соответственно, является пористым. В СКЭС используется плёнка  $\text{TiO}_2$  с величиной пористости 0,5-0,7 [2].

Для определения необходимой толщины сенсibilизированной красителем плёнки  $\text{TiO}_2$  из уравнения (3) выразим толщину плёнки  $L$ , при этом поглощение солнечного излучения  $A$  принимаем равным 0,99:

$$L = -\frac{S_{\text{мол}} d N_A \lg(0,01)}{6000\varepsilon(1-p)}. \quad (4)$$

Для наглядного подтверждения значительного превосходства в поглощении солнечного излучения нанопористой сенсibilизированной плёнки  $\text{TiO}_2$  над плотной (не пористой) плёнкой  $\text{TiO}_2$ , на поверхности которой абсорбирован монослой красителя, было использовано следующее выражение, позволяющее рассчитать долю поглощённого солнечного излучения плотной (непористой) сенсibilизированной плёнкой  $\text{TiO}_2$ :

$$A = 1 - 10^{-\frac{1000\varepsilon}{S_{\text{мол}} N_A}}. \quad (5)$$

На рис. 3 представлено приложение MatLab отражающее влияние толщины сенсibilизированной красителем плёнки  $\text{TiO}_2$  на её поглощение солнечного излучения и определяющее необходимую толщину плёнки соответствующей примерно 100 % поглощению солнечного излучения в зависимости от набора стандартных параметров.

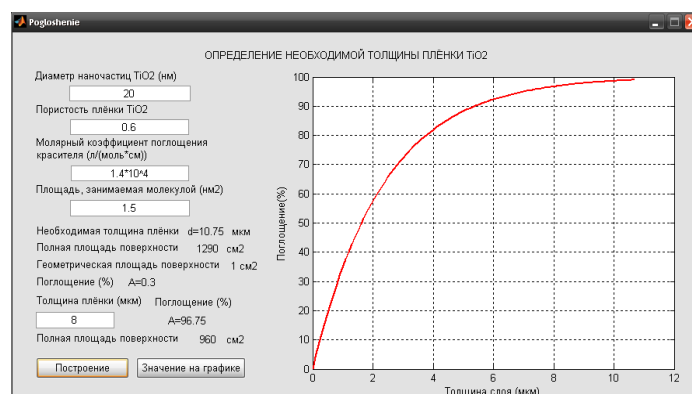


Рис. 3. Результат проведённого моделирования

Из проведённых исследований с помощью разработанного приложения MatLab установлено влияние толщины и диаметра частиц плёнки  $\text{TiO}_2$  на её поглощение солнечного излучения. Получено, что при диаметре частиц больше 30 нм, толщина сенсibilизированной красителем плёнки  $\text{TiO}_2$ , поглощающая примерно 100 % падающего солнечного излучения, начинает значительно превышать диффузионную длину электронов в плёнке  $\text{TiO}_2$ . Это приводит к увеличению рекомбинационных потерь инжектированных из молекул красителя в  $\text{TiO}_2$  электронов с ионами окислителя в электролите и, как следствие, снижению эффективности преобразования солнечного излучения и фотоэлектрических характеристик СКЭС. Показано, что полная (не пористая) сенсibilизированная плёнка  $\text{TiO}_2$  независимо от толщины способна поглощать лишь около 1 % падающего солнечного излучения, что существенно меньше поглощения пористой сенсibilизированной плёнки  $\text{TiO}_2$ . Таким образом, установлена предпочтительная величина диаметра наночастиц, которая составляет 10–30 нм, так как при оптимальной толщине плёнки  $\text{TiO}_2$  порядка 10–12 мкм поглощается 98–99 % падающего солнечного излучения.

#### БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. Сычёв В.В. Нанотехнологии для энергосбережения: прогноз наиболее значимых областей исследования // Российский химический журнал (Журнал Российского Химического общества им. Д.И. Менделеева). – 2008. – Т. LI, № 6. – С. 118-128.
2. Antonio Luque, Steven Hegedus. Handbook of Photovoltaic Science and Engineering. – England, 2003. – P. 1115.
3. Michael Grätzel. Review Dye-sensitized solar cells // Journal of Photochemistry and Photobiology C: Photochemistry Reviews, 2003. – P. 145-153.
4. Melissa Penny. Mathematical Modelling of Dye-Sensitised Solar Cells. A thesis submitted in partial fulfilment of the requirements for the degree of Doctor of Philosophy, 2006. – P. 241.
5. Уэйн Р. Основы и применения фотохимии. – М: Мир, 1991. – С. 304.
6. Kureichik V.M., Malioukov S.P., Kureichik V.V., Malioukov A.S. Genetic Algorithms for Applied CAD Problems. – Springer, 2009. – P. 236.

#### Малюков Сергей Павлович

Технологический институт федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего профессионального образования «Южный федеральный университет» в г. Таганроге.

E-mail: malyukov@fep.tti.sfedu.ru.

347922, г. Таганрог, ул. Шевченко, 2.

Тел.: 88634371603.

Кафедра конструирования электронных средств; заведующий кафедрой; профессор; член-корреспондент РАЕН.

**Саенко Александр Викторович**

E-mail: aleks@fep.tti.sfedu.ru.

347922, г. Таганрог, ул. Шевченко, 2.

Тел.: 88634371603.

Кафедра конструирования электронных средств; аспирант.

**Malyukov Sergey Pavlovich**

Taganrog Institute of Technology – Federal State-Owned Autonomy Educational Establishment of Higher Vocational Education “Southern Federal University”.

E-mail: malyukov@fep.tti.sfedu.ru.

2, Shevchenko Street, Taganrog, 347900, Russia.

Phone: +78634371603.

The Department of Electronic Apparatuses Design; Head the Department; Professor; Corresponding Member RANS.

**Saenko Alexandr Victorovich**

E-mail: aleks@fep.tti.sfedu.ru.

The Department of Electronic Apparatuses Design; Postgraduate Student.

УДК 629.37:620.178.35

**В.В. Миронова**

**КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА УДАРНОГО  
НАГРУЖЕНИЯ КОЛЕС\***

*Предложена методика исследования поведения дисков алюминиевых колес при ударном воздействии. Она основана на методе конечных элементов с использованием программного комплекса КАПРИС. В результате получена картина напряженно-деформированного состояния обода колеса. Из нее можно сделать вывод, что при ударе напряжения концентрируются близко к месту приложения нагрузки, и для расчета достаточно рассмотреть одну четвертую часть обода колеса*

*Моделирование компьютерное; колесо алюминиевое; удар осевой; состояние напряженно-деформированное; метод конечных элементов.*

**V.V. Mironova**

**COMPUTER-BASED MODELING OF WHEELS IMPACT LOADING**

*The paper considers the technique of studying the behavior of aluminium wheels discs while impact loading. It is based on the finite element method with using software tool KAPRIC. As a result the picture of wheel stress-deformation field is drawn. From this it may be concluded that the stresses are concentrated near the place of loading; hence for further calculations it is enough to consider only a quarter of wheel*

*Computer-based modeling; aluminium wheel; axial impact; stress-deformation field; finite element method.*

**Введение.** Разрушение колес автомобиля при ударных воздействиях в процессе движения может привести к опасным последствиям, что особенно актуально для колес из легких сплавов. Поведение колеса в процессе ударных нагрузок описывается методом конечных элементов (МКЭ) [1]. Виды ударного нагружения могут быть различными, однако статистический анализ показывает, что один из наиболее типичных видов нагружения – осевой удар по ободу колеса.

---

\* Работа выполнена при поддержке: РФФИ (грант № 10-07-00727).