

SÍNTESIS DE NANOPARTÍCULAS DE TiO_2 PARA APLICACIÓN EN CELDAS SOLARES SENSIBILIZADAS CON TINTE

SYNTHESIS OF TiO_2 NANOPARTICLES FOR THEIR
APPLICATION IN DYE-SENSITIZED SOLAR CELLS.

José Francisco Arriola Oliva
Julio Villanueva Cab

ISSN 2448-5829

Año 11, No. 31, 2025, pp. 333 - 342

RD-ICUAP

<https://orcid.org/0009-0001-8414-927X>
<https://orcid.org/0000-0002-6261-9197>

Recibido: 1 de Diciembre 2024
Revisado: 2 de Enero 2025
Publicado: 20 de Enero 2025
FOLIO A11N30.25/948

223470235@viep.com.mx
julio.villanuevac@correo.buap.mx

Maestría en Ciencias en Energías Renovables Instituto de Ciencias
BUAP,
Instituto de Física BUAP "Ing. Luis Rivera Terrazas".

Resumen

Este proyecto de investigación forma parte de una tesis de maestría en Energías Renovables en el Instituto de Ciencias de la BUAP. El objetivo principal de este trabajo es crear materiales especiales que ayuden a mejorar el rendimiento de los dispositivos llamados celdas solares sensibilizadas por tinte (DSSC, por sus siglas en inglés). Para alcanzar dicho objetivo, se fabricarán nanopartículas de dióxido de titanio (TiO₂) con ciertas porciones específicas de galio (Ga) haciendo uso de un método rápido y accesible llamado irradiación de microondas. Este estudio busca optimizar este tipo de dispositivos para que sean más eficientes en cuanto a conversión de energía solar a energía eléctrica, lo que podría hacer que la energía renovable, específicamente energía solar sea más accesible y sostenible. Este trabajo es de suma importancia ya que contribuye al desarrollo de fuentes de energía limpias, algo que juega un papel clave para afrontar los retos ambientales en la actualidad.

Palabras clave: celdas solares, energía renovable, dióxido de titanio, energía renovable, irradiación de microondas, nanopartículas.

Abstract

In this research project, part of a master's thesis in the Institute of Science BUAP Renewable Energy Program, the main goal is to develop advanced materials to enhance the efficiency of dye-sensitized solar cells (DSSCs), a promising type of solar technology. The work involves producing titanium dioxide nanoparticles with a small amount of gallium using a fast and efficient method called microwave irradiation. The study aims to optimize and improve this technology for better solar energy capture, making renewable energy more accessible and sustainable. This research is crucial for advancing clean energy solutions, which are essential for addressing current environmental challenges.

Keywords : advanced materials, microwave irradiation, nanoparticles, Titanium dioxide.

Introducción

Según los informes y predicciones de la administración de energía de los EE.UU [1], la demanda de energía renovable ha aumentado significativamente en las últimas décadas debido al impacto ambiental negativo de los combustibles y energías fósiles como el petróleo, el gas y el carbón. Las celdas solares, especialmente las celdas solares sensibilizadas por colorante (DSSCs, por sus siglas en inglés), representan una solución prometedora al ofrecer una forma más accesible y eficiente de convertir la luz solar en electricidad. Este proyecto de investigación tiene como objetivo mejorar las DSSCs desarrollando de nanopartículas (NPs) de dióxido de titanio (TiO_2) y dióxido de titanio con ciertas fracciones de galio ($\text{TiO}_2\text{:Ga}$). Utilizando irradiación por microondas, se espera que este proceso mejore la capacidad de TiO_2 para capturar, y convertir la luz solar en electricidad [2]. El proceso de adición de otros átomos al TiO_2 como Ga es llamado dopaje, lo cual busca modificar las propiedades del material original para mejorar su desempeño. Para evaluar estos materiales, se utilizarán diversas técnicas para analizar las propiedades estructurales, morfológicas y optoelectrónicas [3]. El objetivo principal es modificar las propiedades del TiO_2 para mejorar la eficiencia de la conversión de energía solar a eléctrica, lo cual se medirá a través de curvas de voltaje contra corriente (I-V). Estas curvas proporcionarán información clave sobre el rendimiento y potencial de las DSSCs mencionadas anteriormente[4]

Desarrollo

Un breve antecedente sobre las DSSC.

Las celdas solares sensibilizadas por tinte (DSSCs) representan un avance significativo no solo para la comunidad científica sino para la humanidad en general. Este tipo de tecnología, impulsada en gran parte por el científico Michael Grätzel ha revolucionado el campo de las celdas solares al ofrecer una alternativa eficiente, económica y funcional incluso cuando no hay mucha luz [3,4].

Pero ¿cómo funcionan las DSSCs?...

Estas celdas hacen uso de un tinte especial que absorbe luz solar y facilita la conversión a electricidad. Este proceso es similar a cómo las plantas convierten luz solar en energía para nutrirse por medio de la fotosíntesis, pero en lugar de producir alimento, este tipo de celdas producen electricidad. Su diseño es simple y sus bajos costos de fabricación son de gran atracción para los investigadores e industrias, posicionándolas como una opción prometedora para el futuro de la energía renovable.

¿Cómo funciona una celda solar tipo DSSC?

Una DSSC está conformada por varias capas apiladas secuencialmente para dar lugar a su estructura básica (véase diagrama en la Fig.1). Su diseño puede compararse a un "sándwich": el pan se son los sustratos de vidrio conductor y el contraelectrodo con platino (Pt), mientras que el relleno incluye una capa de nanopartículas de TiO_2 o $\text{TiO}_2\text{:Ga}$, un tinte especial que facilita la captura de luz y una solución electrolítica. Todo esto sellado con un polímero [5]. Este tipo de estructura como un nos permite una conversión eficiente y económica de la luz en energía eléctrica.

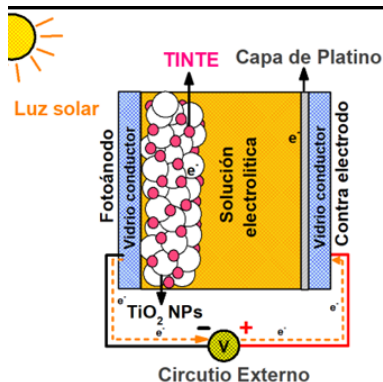


Fig.1 (Estructura típica de una DSSC).

La Fig.1 nos muestra un diagrama de la estructura típica de una DSSC mientras en Tabla 1: Funcionamiento de una DSSC.

Paso	Descripción y Funcionamiento
1	Cuando la luz solar incide sobre la celda, el tinte absorbe la luz.
2	La luz absorbida excita los electrones en las moléculas del tinte.
3	La luz hace que los electrones salten desde el tinte al semiconductor.
4	El flujo de electrones a través del TiO_2 genera electricidad.
5	El electrolito regenera los electrones excitados.
6	Los electrones regresan de nuevo al tinte y el proceso es constante.
7	Se tiene electricidad a partir de luz solar.

Esta es una manera general del funcionamiento de cada parte dentro de la estructura de la DSSC, en donde vemos que cada parte tiene una función específica,

y que en conjunto dan lugar al funcionamiento de este tipo de celda solar.

SÍNTESIS POR IRRADIACIÓN DE MICROONDAS

¿Es posible obtener nanopartículas de TiO_2 y $\text{TiO}_2\text{:Ga}$ mediante un horno de microondas?

¡La respuesta es Sí!

Aunque en este caso no le llamaremos cocinar nanopartículas de TiO_2 y $\text{TiO}_2\text{:Ga}$, científicamente le llamamos SÍNTESIS, sintetizar se refiere a la obtención de un compuesto o producto mediante un proceso químico. Esto implica combinar diferentes sustancias para crear una nueva sustancia (en este caso un material semiconductor), hacer este tipo de procesos en un horno de microondas puede ser peligroso si no se tiene el conocimiento adecuado para realizar estas actividades.

¡NO LO INTENTES EN CASA!

Esta investigación se enfoca en la creación de nanopartículas de dióxido de titanio, un material utilizado en tecnologías como las DSSCs. El TiO_2 puede existir en diferentes formas, siendo su fase anatasa la más común en aplicaciones debido a su estabilidad. Para este estudio, se utilizará $\text{TiO}_2\text{:Ga}$, con el objetivo de mejorar sus propiedades. El proceso para obtener estas nanopartículas involucra el uso de un microondas convencional, nada fuera de este mundo, comenzando con la preparación de una mezcla que contiene compuestos de titanio y galio. Esta mezcla se calienta en un microondas en ciclos controlados de calentamiento y enfriamiento, lo que ayuda a formar las nanopartículas de forma precisa.

Tras complementar el proceso de microondas, las nanopartículas se separan y se lavan para eliminar impurezas (proceso detallado en fig. 2.) Luego, se secan y finalmente se tratan a altas temperaturas para obtener su fase deseada (anatasa), adecuada para su uso y aplicación en dispositivos como las DSSCs. Este método de síntesis asegura que las nanopartículas tengan las características ideales

para aplicaciones en semiconductores [6].



Fig. 2 Proceso de síntesis por irradiación de microondas.

Para determinar si un material es adecuado para una aplicación específica, como las células solares sensibilizadas por colorantes (DSSCs), se utilizan métodos de caracterización. Estos métodos nos dan información importante sobre las propiedades de los materiales, como su estructura, morfología, capacidad para absorber luz, área superficial y composición química. Las técnicas más comunes incluyen la difracción de rayos X, la microscopía electrónica, la espectroscopía de reflectancia y la medición del área superficial. Estas herramientas son esenciales para garantizar que los materiales, como las nanopartículas de TiO_2 y $\text{TiO}_2\text{:Ga}$, tengan las características necesarias para optimizar el funcionamiento de las células solares [7].

El análisis de estos materiales permite asegurar que puedan absorber eficientemente la luz, transportar electrones de manera efectiva y tener una buena estabilidad a largo plazo. Además, evalúan factores como la porosidad, que mejora la interacción con el tinte en las DSSCs, y la composición química, que asegura la estabilidad del material. Los resultados de estos análisis son fundamentales para fabricar dispositivos solares más eficientes, con una mayor vida útil y un menor impacto ambiental. Las DSSCs se prefieren por su bajo costo, su capacidad para funcionar con luz débil y su mayor tolerancia a cambios de temperatura, lo que las convierte en una alternativa prometedora para el futuro de la energía solar [8].

Todo lo mencionado anteriormente, de forma general se puede resumir a proceso resumido que se describe ilustrativamente en la Fig. 3.



Fig.3. Proceso de fabricación de DSSCs.

conclusiones

Esta investigación resume los avances positivos y los esfuerzos continuos en el campo de los DSSC, al tiempo que reconoce los retos y el enfoque colaborativo necesario para superarlos

Declaración de privacidad

Los datos de este artículo, así como los detalles técnicos para la realización del experimento, se pueden compartir a solicitud directa con el autor de correspondencia. Los datos personales facilitados por los autores a rd-icuap se usarán exclusivamente para los fines declarados por la misma, no estando disponibles para ningún otro

propósito ni proporcionados a terceros.

Agradecimientos

Los autores de esta publicación quieren expresar su más profundo agradecimiento al Instituto de Ciencias-BUAP por permitir la elaboración de esta publicación, al Instituto de Física “Ing. Luis Rivera Terrazas” BUAP por su apoyo y la facilitación de su infraestructura para obtención de resultados que respaldan esta información.

INTRODUCTION

According to the reports and predictions presented by the USA. The demand for renewable energy has risen drastically over the last few decades due to the environmental harm caused by fossil fuels like oil, gas, and coal. Solar cells, especially dye-sensitized solar cells (DSSCs), offer a promising solution because they offer a more affordable and efficient way to convert sunlight into electricity. This project seeks to improve DSSC by developing titanium dioxide (TiO₂) nanoparticles (NPs) doped with gallium (Ga). Using microwave irradiation, this process is expected to enhance the ability of Ga-doped TiO₂ to capture and transport electrons from sunlight. This process, called doping, means adding a small amount of another element (in this case, Ga) to modify the properties of the original material (TiO₂). Different techniques such as X-ray diffraction (XRD), Scanning Electron Microscopy (SEM), Diffuse Reflectance Spectroscopy (DRS), and BET surface area will be used to study the structure and the optoelectronic properties. The ultimate objective is to develop more efficient and affordable solar technology that contributes to a cleaner energy future. To measure how well the improved DSSCs perform, their efficiency will be evaluated by recording their I-V (current-voltage curves). This method helps assess how much electrical current the solar cell can generate when exposed to sunlight, and how that current changes with different voltages. Essentially, it shows how well the solar cell converts sunlight into electricity. By analyzing these curves, researchers can determine the overall performance and potential of the DSSCs.

DEVELOPMENT

In recent years remarkable progress has been made for humanity, especially in advancing solar cells as a clean renewable energy source. Michael Grätzel pioneered researching tiny semiconductor particles and special films made from oxide materials like TiO₂. His efforts resulted in a breakthrough solar cell technology called DSSC, significantly boosting the photoelectric conversion efficiency of

this type of cell. This innovation has generated substantial interest from academic and commercial sectors equally due to its high-efficiency potential, performance under diffuse light, and cost-effectiveness in manufacturing.

How does a Dye-Sensitized Solar Cell work?

A DSSC operates through a series of sequential components designed to convert sunlight into electricity efficiently. The key semiconductor in this structure is titanium dioxide (TiO₂), which plays a crucial role in the cell's function. Initially, a DSSC is constructed with several layers arranged in sequence: starting with a glass substrate, followed by a transparent conducting layer, TiO₂ nanoparticles (the semiconductor), a dye molecule layer, an electrolyte, and finally a counter electrode, all enclosed and sealed with a gasket. (The function and operation of the DSSC in general are explained in Table 1).

MICROWAVE IRRADIATION

Did you know you can cook Ga-doped TiO₂ NPs in a microwave oven? How exciting!

Well, instead of cooking, we can use another word like synthesise. It means to create or produce something by combining different substances or components. In this context, it refers to carefully mixing materials and using specific techniques (like heating in a microwave oven).

DO NOT TRY THIS AT HOME!

When we say microwave oven, we mean a commercial microwave like the one everyone uses to heat their food. This study focuses on synthesizing and preparing TiO₂ NPs, a semiconductor with a wide band gap of 3.2 eV in its anatase phase, a crystalline phase is when atoms or molecules are arranged in a highly ordered, repeating pattern, forming a crystal structure. TiO₂ has three main crystalline phases (rutile, anatase, and brookite). Each phase has distinct properties and applications, with anatase being commonly used in DSSC and other fields due to its unique properties. Renowned for its

stability and well-established research background. As the base material of solar cells, Ga-doped TiO₂ (TiO₂:Ga) will be utilized. The proposed method involves fabricating mesoporous TiO₂ NPs using microwave irradiation.

Before microwave irradiation, a precursor solution of TTIP (Titanium Tetraisopropoxide) while gallium nitrate hydrate (Ga(NO₃)₃·xH₂O) will be employed as Ga precursor and anhydrous ethanol of 99.9% (anhydrous refers to a substance that contains no water) is mixed with nitric acid (HNO₃) and stirred for 12 hours to avoid reacting with water. After this, the mixture is heated in cycles using a microwave at 20% of its high power (900 W), set to 180 W for 3 minutes, operating in cycles of 8 seconds on and 25 seconds off, repeated for four cycles with 10-minute breaks between each. This process ensures controlled nanoparticle synthesis by altering heating and cooling cycles.

After the irradiation cycles, the mixtures cool, and the white precipitates are collected using centrifugation. These NPs will be washed with ethanol and deionized water and then dried at 70°C to form white powders. The powders were then thermally treated at 500°C for 2 hours to achieve the stable anatase phase of TiO₂, which is suitable for semiconductor applications.

How do we know if the obtained material is what we expect, according to science?

This can be simple and complicated to express in this article, but to determine if a material is what we expect it to be, or if it is suitable for a specific application (DSSCs in this case), certain techniques are used, called characterization methods. Characterization methods are used to identify materials, determine crystalline phases, analyze structure and size, measure electrical and optical properties, and evaluate suitability for specific applications.

The analysis provided by the characterization methods mentioned in Table 2 earlier is essential for determining the suitability of TiO₂ and TiO₂:Ga nanoparticles for applications in dye-sensitized solar cells (DSSCs). These materials play a critical role in DSSCs by facilitating

efficient electron collection and transport, effective light absorption across a large surface area, and optimal photon capture.

This investigation highlights key considerations for TiO₂ nanoparticles in DSSCs.

1. **Electron Transport and Collection:** XRD and SEM analyze crystalline structure and morphology, influencing electron transport efficiency.
2. **Light Absorption and Optical Properties:** DRS and UV-Vis spectroscopy measure the absorption spectrum and band gap energy, essential for solar energy conversion efficiency.
3. **Surface Area and Porosity:** BET analysis evaluates surface area and pore characteristics, improving contact with dye and semiconductors.
4. **Chemical Composition and Elemental Analysis:** EDS combined with SEM provides elemental composition data, important for understanding gallium doping and ensuring chemical stability.
5. **Stability and Longevity:** Characterization methods assess material stability under operating conditions, offering insights into degradation mechanisms and enhancing device lifespan.

After analyzing the relevant factors (key considerations), the fabrication of DSSCs will proceed using TiO₂ and TiO₂:Ga nanoparticles to make a thin film, following the steps detailed in Table 1. Like assembling a sandwich, each step in the process is crucial to ensure the proper formation of the DSSC structure, as illustrated in Fig. 1.

Why dye-sensitized solar cells?

DSSCs are favored over other solar cell types for their cost-effectiveness in manufacturing, versatility in design, ability to perform well in low or diffuse light conditions, tolerance to heat fluctuations, and reduced environmental impact during production.

Conclusions

This investigation summarizes the positive advancements and ongoing efforts in the field of DSSC while acknowledging the challenges and the collaborative approach needed to overcome them.

1. International energy outlook 2023 - U.s. energy Information Administration (EIA) [Internet]. Eia.gov. [citado el 9 de octubre de 2024]. Disponible en: <https://www.eia.gov/outlooks/ieo/>
2. Kaddachi Z, Belhi M, Gharbi R, Ben Karoui M. Effect of Ga doped TiO₂ photoanode on photovoltaic performances of natural dye-sensitized solar cells. En: 2019 19th International Conference on Sciences and Techniques of Automatic Control and Computer Engineering (STA). IEEE; 2019. p. 90–4.
3. Parisi ML, Maranghi S, Basosi R. The evolution of the dye-sensitized solar cells from Grätzel prototype to up-scaled solar applications: A life cycle assessment approach. *Renew Sustain Energy Rev* [Internet]. 2014;39:124–38. Disponible en: <http://dx.doi.org/10.1016/j.rser.2014.07.079>
4. Hagfeldt A, Graetzel M. Light-induced redox reactions in nanocrystalline systems. *Chem Rev* [Internet]. 1995;95(1):49–68. Disponible en: <http://dx.doi.org/10.1021/cr00033a003>
5. Grätzel M. Photoelectrochemical cells. *Nature* [Internet]. 2001;414(6861):338–44. Disponible en: <http://dx.doi.org/10.1038/35104607>
6. Peralta M de LR, Serrano JG, Pal U. Morphology defined ZnO nanostructures through microwave-assisted chemical synthesis: Growth mechanism, defect structure, and emission behaviors. *Adv Sci Lett* [Internet]. 2012;6(1):159–66. Disponible en: <http://dx.doi.org/10.1166/asl.2012.1998>
7. Nazeeruddin MK, Liska P, Moser J, Vlachopoulos N, Grätzel M. Conversion of light into electricity with trinuclear ruthenium complexes adsorbed on textured TiO₂ films. *Helv Chim Acta* [Internet]. 1990;73(6):1788–803. Disponible en: <http://dx.doi.org/10.1002/hlca.19900730624>
8. Hagfeldt A, Boschloo G, Sun L, Kloo L, Pettersson H. Dye-sensitized solar cells. *Chem Rev* [Internet]. 2010;110(11):6595–663. Disponible en: <http://dx.doi.org/10.1021/cr900356p>