

Estudo Espectroscópico e Eletroquímico do Complexo [Ru(c-ph-terpy)(Hq)NCS] Aplicado a Células Solares Fotoeletroquímicas

Juliano A. Bonacin(PG)*, Sérgio H. Toma(PG), Henrique E. Toma (PQ)

Instituto de Química -USP-SP -Av Prof. Lineu Prestes 748, Butantã - São Paulo-SP. *jbonacin@iq.usp.br

Palavras Chave: rutênio, modelagem molecular, Células Solares.

Introdução

A síntese de novos complexos polipiridínicos de rutênio como sensibilizadores em células solares tem sido impulsionada pela busca de uma maior eficiência na fotoconversão de luz solar em energia. Este trabalho apresenta o comportamento fotoeletroquímico do complexo [Ru(c-ph-terpy)(Hq)NCS], em que c-ph-terpy, Hq e NCS são 4'-(4-carboxifenil)2,2':6,2''-terpiridina, 8-oxiquinolinato e tiocianato, respectivamente, utilizado como sensibilizador em células solares sensibilizadas por corante (DSSC).

Resultados e Discussão

A presença do ligante Hq no complexo [Ru(c-ph-terpy)(Hq)NCS] resulta no surgimento de bandas de absorção na região de baixa energia do espectro visível ideais para a sensibilização em DSSCs. As transições eletrônicas do complexo e suas respectivas atribuições teórico-experimental estão apresentadas tabela 1.

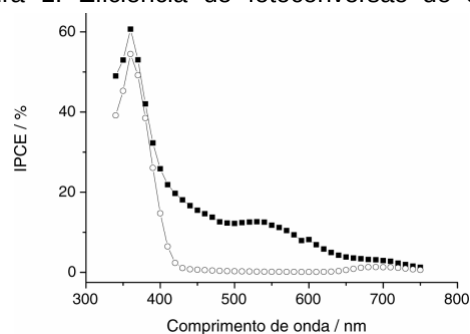
Tabela 1: Atribuições das transições eletrônicas do complexo [Ru(c-ph-terpy)(Hq)NCS]

λ_{exp}	λ_{teor}	$\log \epsilon$	F O	Transição	Atribuição
291	283	3,66	0,23	103 $\rightarrow$ 113	TCML Ru $\rightarrow$ c-ph-terpy
				97 $\rightarrow$ 104	c-ph-terpy $\rightarrow$ c-ph-terpy
316	315	3,45	0,42	98 $\rightarrow$ 104	TCML Ru $\rightarrow$ c-ph-terpy
				97 $\rightarrow$ 104	c-ph-terpy $\rightarrow$ c-ph-terpy
406	438	3,15	0,44	102 $\rightarrow$ 106	TCML Ru $\rightarrow$ c-ph-terpy
571	637	3,04	0,13	103 $\rightarrow$ 105	TCML Ru $\rightarrow$ c-ph-terpy

As células solares sensibilizadas por corantes foram montadas com filmes nanoporosos de TiO₂ modificados com o complexo derivado de terpiridina carboxilada sobre eletrodo de FTO (SnO₂:F) e um contra eletrodo de Pt/FTO montados em camadas. Um eletrólito de preenchimento contido de 0,5M t-butilpiridina, 0,6M iodeto de tetrabutilamonio, 0,1M LiI, 0,1M I₂ em 10 mL de acetonitrila. A curva de eficiência de conversão fóton-corrente incidente (IPCE) em função do comprimento de onda mostra características do espectro de absorção do complexo em solução, exibindo uma banda em torno de 540 nm com máximo de 12,6 % de fotoconversão monocromática. A curva de corrente versus potencial do dispositivo sobre irradiação de luz branca 50

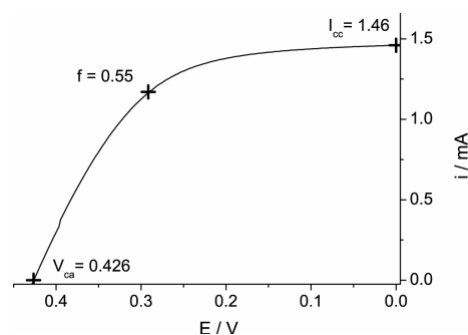
mW.cm⁻² apresentou potencial de circuito aberto (Voc), corrente de curto-circuito (Jsc) e fator de preenchimento (ff) igual a 0,426V, 1,46 mAcm⁻² e 0,55, respectivamente. Estes valores correspondem a uma eficiência total fotoconversão de 0,7 %.

Figura 1: Eficiência de fotoconversão do complexo



[Ru(c-ph-terpy)(Hq)NCS] () e do semicondutor TiO₂ (?) em função do comprimento de onda de excitação.

Figura 2: Comportamento I-V do dispositivo.



Conclusões

Os resultados de modelagem molecular ZINDO/S do complexo mostram que os estados excitados envolvidos na injeção de elétrons tem caráter predominantemente centrado no ligante terpiridínico. A baixa taxa de fotoconversão pode estar associado a presença de agregados como observado em compostos similares.¹

Agradecimentos

A CNPq, Fapesp, IMMC e RENAMI.

1 Z. S. Wang, C. H. Huang, Y.Y. Huang, B. W. Zhang, P. H. Xie, Y. J. Hou, K. Ibrahim, H. J. Quian and F. Q. Liu, *Sol. Energ. Mater. & Sol. Cells*, **2002**, 71, 261-271.