

## [Fe(dcbpy)<sub>2</sub>(NCS)<sub>2</sub>]: Síntese, Caracterização e Adsorção do Complexo sobre TiO<sub>2</sub>.

Antônio E. A. de Sousa (IC)\*, Tércio de F. Paulo (PG), Maria A. Silva (PG), Thiago dos S. Francisco (PG), Izaura C. N. Diógenes (PQ). [ederquimicaufc@hotmail.com](mailto:ederquimicaufc@hotmail.com)

Departamento de Química Orgânica e Inorgânica, Universidade Federal do Ceará, Cx Postal, 12200, 60455-760, Fortaleza, CE. [ederquimicaufc@hotmail.com](mailto:ederquimicaufc@hotmail.com)

Palavras Chave: dcbpy, TiO<sub>2</sub> e foto-sensibilizador

### Introdução

Células fotovoltaicas contendo substâncias fotocromáticas (foto-sensibilizadoras), além de serem uma estratégia de mercado face a sua definição como fonte alternativa de energia, são de forte interesse acadêmico. A literatura tem estudado como espécies foto-sensibilizadoras, dentre outras, compostos de metais de transição contendo grupos funcionais capazes de induzir a imobilização sobre superfícies de óxido de titânio, TiO<sub>2</sub><sup>1</sup>. Este trabalho apresenta a síntese, caracterização e adsorção no filme de TiO<sub>2</sub> do complexo [Fe<sup>II</sup>(dcbpy)<sub>2</sub>(NCS)<sub>2</sub>], onde dcbpy = 2,2'-bipiridina-4,4'-ácido carboxílico, com a finalidade de aplicação como foto-sensibilizador.

### Resultados e Discussão

O complexo [Fe<sup>II</sup>(dcbpy)<sub>2</sub>(NCS)<sub>2</sub>] foi sintetizado de acordo com procedimento descrito na literatura<sup>2</sup> com algumas modificações. O ligante dcbpy, após dissolução em meio básico, é adicionado (2dcbpy:1Fe) a uma solução contendo o sal (NH<sub>4</sub>)<sub>2</sub>[Fe(SO<sub>4</sub>)<sub>2</sub>] e excesso de tiocianato de sódio (NaSCN). Após 3h de reação, com a adição de H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>, obteve-se um precipitado que foi filtrado, lavado e estocado sob vácuo. O espectro vibracional na região do infravermelho apresentou bandas características do ligante dcbpy,  $\nu(\text{C}=\text{O})$  em 1616 cm<sup>-1</sup>,  $\nu(\text{C}=\text{C})$  1544 cm<sup>-1</sup> e  $\nu(\text{C}=\text{N})$  em 1375 cm<sup>-1</sup>. A banda em 2055 cm<sup>-1</sup>, atribuída ao modo  $\nu(\text{C}\equiv\text{N})$  do ligante NCS<sup>-</sup>, indica a coordenação deste através do átomo de nitrogênio já que é observada em região de menor frequência comparativamente ao ligante livre (2069 cm<sup>-1</sup>)<sup>3</sup>.

O espectro eletrônico nas regiões do visível e ultravioleta (UV-Vis), Figura 1, obtido em meio aquoso apresenta, além das bandas intraligantes, absorções em 379 e 543 nm atribuídas a transições de transferência de carga do tipo metal-ligante devido a dependência com a natureza do solvente.

A modificação da superfície de vidro condutor contendo o filme de TiO<sub>2</sub> foi feita por imersão em uma solução aquosa 10<sup>-5</sup> mol.L<sup>-1</sup> do complexo. O espectro do vidro modificado apresenta as bandas MLCT do complexo deslocadas para região de menor energia. Este resultado é atribuído a mudança de simetria após a adsorção sobre a superfície vítrea.

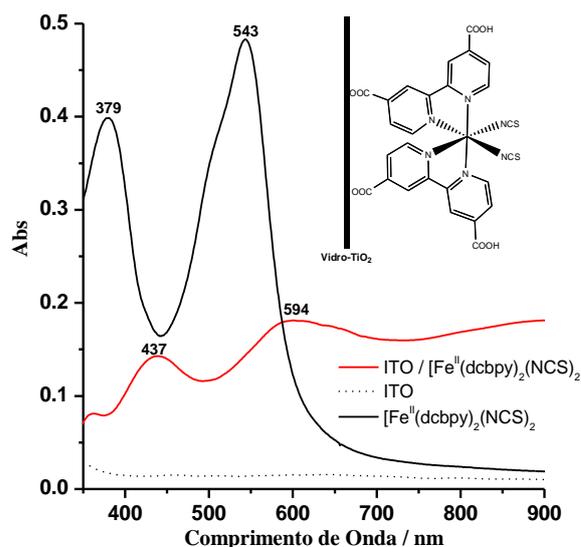


Figura 1. Espectro eletrônico do complexo [Fe<sup>II</sup>(dcbpy)<sub>2</sub>(NCS)<sub>2</sub>] em água e adsorvido sobre TiO<sub>2</sub> em vidro condutor.

### Conclusões

Os resultados de espectroscopia vibracional indicam que a coordenação do ligante NCS<sup>-</sup> ocorre através do átomo de nitrogênio. O espectro eletrônico UV-Vis do vidro condutor após imersão em solução do complexo [Fe<sup>II</sup>(dcbpy)<sub>2</sub>(NCS)<sub>2</sub>] indica que esta espécie modifica efetivamente a superfície. O processo de adsorção, todavia, altera os níveis de energia do composto afetando a energia das transições MLCT. Pode-se concluir que o complexo em estudo apresenta potencial aplicação como uma espécie foto-sensibilizadora.

### Agradecimentos

Os autores agradecem a UFC e aos órgãos de fomento CNPq, CAPES e FUNCAP

<sup>1</sup>. Nazeeruddin, M. K.; Zakeeruddin, S. M.; Lagref, J. J.; Liska, P.; Comte, P.; Barolo, C.; Viscardi, G.; Schenk, K.; Grätzel, M. *Coord. Chem. Rev.* 248, **2004**, 1317

<sup>2</sup> Ferrere S., Gregg B. A.; *J. Am. Chem. Soc.*, **1998**, 120, 843-844

<sup>3</sup>. Bailey, R. A., Kozak, S. L., Michelsen, T. W., Miils, W. N. *chem. Rev.*, 6, **1971**, 407-445