

Complexos mistos de cobre (I) contendo 1,10-fenantrolina e ligantes dicarboxílicos para sensibilização em filmes nanoestruturados de TiO₂

Juliana S. de Souza (PG)*, Regina C. G. Frem (PQ), Adelino V. G. Netto (PQ), Antonio E. Mauro (PQ).

Departamento de Química Geral e Inorgânica – Instituto de Química de Araraquara – UNESP – Araraquara - SP

*julylaclos@hotmail.com

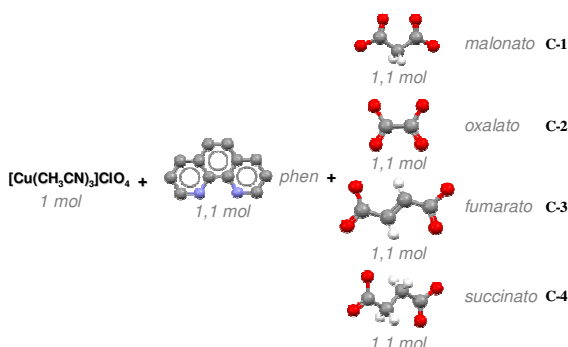
Palavras-chave: cobre (I), ligantes dicarboxílicos, corantes inorgânicos, células solares.

Introdução

Células solares são uma promissora fonte alternativa de energia em virtude da grande disponibilidade energética do Sol para a Terra. As células solares sensibilizadas por corante (DSSCs)¹ consistem em um tipo de célula solar que procura mimetizar a fotossíntese natural através do uso de corantes, incluindo complexos de metais de transição, na fotossensibilização de filmes semicondutores. Devido a possibilidade de uso de complexos de cobre monovalente como materiais fotofuncionais², este trabalho descreve a síntese, caracterização e impregnação em filmes de TiO₂ de uma série inédita de compostos do tipo Cu(I)-fenantrolina contendo dicarboxilatos como ligantes.

Resultados e Discussão

O Esquema 1 ilustra o fluxograma de preparação dos complexos, que foram obtidos sob atmosfera de N₂.



Esquema 1

Foram obtidos quatro complexos de cobre(I), estáveis ao oxigênio atmosférico, solúveis em DMSO e parcialmente solúveis em etanol e metanol. Atendendo a um outro requisito importante para aplicação em *dye-sensitized solar cells*, todos os compostos são coloridos, apresentando coloração roxa. Os espectros vibracionais no IV acusam a presença da fenantrolina e dos ligantes dicarboxílicos na esfera de coordenação dos complexos: 1645-1583, $\nu_{as}COO^-$; 1513-1498, ν_{CH} aromático; 1423-1408, ν_{CN} aromático; 1361-1207, ν_sCOO^- ; 852-835 cm^{-1} , δ_{CH} . Os espectros de reflectância difusa mostram uma banda larga

centrada em ~ 525 nm, e uma segunda absorção na região do IV próximo (~ 830 nm) associadas a transições MLCT do tipo $d\pi_{Cu} \rightarrow \pi^*_L$. A pancromaticidade observada é uma propriedade bastante desejável para um corante em células solares por possibilitar um maior aproveitamento da radiação solar. Exceto para o complexo **C-2**, os espectros de RMN de ¹H dos compostos exibem sinais alargados e pouco intensos na região característica da fenantrolina (~8-9 ppm), o que sugere a formação de espécies poliméricas. Experimentos de voltametria cíclica e de luminescência permitiram avaliar a energia dos níveis HOMO (~ 0,30 V) e LUMO (~ - 1,87 V), respectivamente. Esses resultados mostram, portanto, que os compostos possuem orbitais HOMO em níveis energéticos adequados para a regeneração do corante oxidado pelo par redox I³/I² (0,25V) usualmente utilizado nesses dispositivos, e que a energia do LUMO possibilita a injeção de elétrons na banda de condução do TiO₂ (- 0,79 V). Foram realizados, ainda, ensaios preliminares de sensibilização desses compostos em filmes nanoestruturados de TiO₂ (Figura 1), em etanol, e os resultados são promissores.

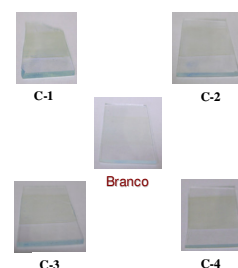


Figura 1. Impregnação dos compostos **C-1** a **C-4** em filmes de TiO₂.

Conclusões

Foram obtidos neste trabalho complexos inéditos de cobre (I) com características ópticas, eletrônicas e eletroquímicas adequadas para potencial emprego como corantes em células solares.

Agradecimentos

Os autores agradecem a CAPES, CNPq e FAPESP.

¹Grätzel, M. *Inorg. Chem.* **2005**, *44*, 6841.

²Yuanmin, W.; Feng, T.; Zheng, X.; Lei, Q.; Ting, Z.; Deang, L. *Progr. Nat. Sci.* **2004**, *14*, 745.