

Simulações de dinâmica molecular da interface heterogênea eletrólito-TiO₂ para aplicação em células solares de corantes.

Robson da Silva* (PG)¹, Luis G. C. Rego (PQ)². *rooliboni@gmail.com*.

¹Departamento de Química, Universidade Federal de Santa Catarina, Florianópolis, SC, 88040-900. ²Departamento de Física, Universidade Federal de Santa Catarina, Florianópolis, SC, 88040-900.

Palavras Chave: células solares, Alq3, dinâmica molecular.

Introdução

As células solares de Grätzel são formadas por um filme nanoporoso de dióxido de titânio (TiO₂), contendo moléculas de corante adsorvidas na superfície, uma solução contendo solvente (usualmente acetonitrila, ACN) e um eletrólito, geralmente o par redox I⁻/I₃⁻, que é responsável por regenerar o corante oxidado.

Foram realizadas simulações de dinâmica molecular de diversos sistemas com o objetivo de estudar efeitos de interface em células solares sensibilizadas por corantes (CSSC) contendo o complexo Alq3.

Resultados e Discussão

Para a análise da interface, foram estudados o efeito do solvente e um importante aditivo utilizado nas CSSC, piridina. As propriedades calculadas para a molécula de solvente, ACN, como a densidade (760.21 kg/m³), ΔH_{vap} (7.93 kcal/mol) assim como funções de distribuição radial (FDR) tiveram resultados similares aos obtidos na literatura¹.

No estudo da interface semicondutor/solvente, funções de distribuição linear (FDL) demonstraram que há uma primeira camada de solvente organizada e com orientação paralela entre as moléculas, seguida de uma camada bem menos organizada. Na presença de defeitos (ausência do oxigênio bicoordenado (O_{2c}) e tricoordenado (O_{3c}) na superfície) há diferentes efeitos: no sistema O_{2c} observa-se um pico por volta de 1 Å, não observado na superfície normal, e no caso O_{3c} tem uma FDL bastante semelhante ao sistema normal. A presença de defeitos na superfície de TiO₂ (vacâncias de O_{2c}) constituem um centro de transferência específica de carga entre a superfície e o eletrólito.

A molécula de piridina é utilizada na solução eletrolítica para evitar corrente de fuga nas células solares sensibilizadas por corantes, impedindo a aproximação do íon I₃⁻ da superfície de dióxido de titânio. Sistemas envolvendo piridina demonstram que há dois mínimos que correspondem a orientação oblíqua e alinhada da molécula na

superfície do semicondutor, para uma solução de 0.5 M (Figura 1).

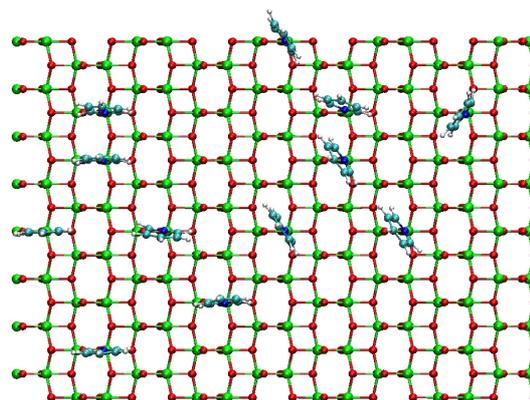


Figura 1. Piridina adsorvida na superfície de TiO₂.

A presença da molécula de piridina pode ter efeitos sobre a configuração do complexo derivatizado de Alq3 (Alq2L) adsorvido na superfície de TiO₂,² interferindo em suas propriedades ópticas e no processo de transferência eletrônica interfacial.

Realizamos estudos envolvendo também o íon I₃⁻, para investigar como o elétron foto injetado no semicondutor reduz o íon dissolvido na solução, produzindo a corrente de fuga na célula.

Conclusões

As propriedades calculadas referente às interfaces semicondutor/solvente concordam bem com a literatura. A presença do aditivo piridina na superfície do semicondutor pode ter conseqüentes efeitos no processo de injeção de carga.

Agradecimentos

Agradecemos ao CNPq pelo auxílio financeiro.

¹ Nikitin, A. M.; Lyubartsev, A. P. *J. Comput. Chem.* **2007**, *28*, 2020.

² Rego, L. G. C.; Silva, R.; Freire, J. A.; Snoeberger, R. C.; Batista, V. S. *J. Phys. Chem. C* **2010**, *114*, 1317.