

# Síntese, Caracterização e Aplicação em Célula Solar de um Complexo bipiridínico de Rutênio com benzotriazol

André L. A. Parussulo\* (PG)<sup>1</sup>, Robson Raphael Guimarães (IC)<sup>1</sup>, Koiti Araki (PQ)<sup>1</sup> e Henrique E. Toma (PQ)<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Instituto de Química, Universidade de São Paulo, São Paulo-SP-Brasil. \*andrearaujo@usp.br

Palavras Chave: Benzotriazol, Rutênio, Célula Solar

## Introdução

Dentre as formas de aproveitamento da energia solar destacam-se as células solares fotoeletroquímicas sensibilizadas por corantes<sup>1</sup> (DSC), com a expectativa de proporcionarem uma forma eficiente e de baixo custo para converter energia solar em eletricidade.

Os fotosensibilizadores mais empregados em DSC e com maior rendimento de fotoconversão conhecido são os complexos polipiridínicos de rutênio. Neste trabalho foi realizado a síntese, caracterização e estudo fotoeletroquímico de um novo complexo bipiridil de rutênio, o [Ru(Hdcbipy)<sub>2</sub>(HBTz)<sub>2</sub>], onde dcbipy é a 4,4' dicarboxybipiridina e Btz é o benzotriazol.

## Resultados e Discussão

Para obtenção do complexo, foi solubilizado 0,545 mmol do ligante Btz em solução (2:1) etanol/água. Em seguida adicionado-se 0,227 mmol de [Ru(dcbpy)<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>] e refluxou-se o sistema por três horas no escuro. Após o final da reação, o composto foi rotaevaporado e precipitado com NH<sub>4</sub>PF<sub>6</sub> em solução de HCl 2M. CHN: C<sub>36</sub>H<sub>36</sub>F<sub>6</sub>O<sub>8</sub>N<sub>10</sub>PRu.4H<sub>2</sub>O Exp. (Calc.): %C 41,88(41,39): %H 3,41(3,28): %N 12,46(13,41). ESI-MS: íon molecular 827.

O complexo sintetizado possui quatro grupos ácidos-base (dois carboxilatos e dois benzotriazol) e consequentemente temos quatro espécies possíveis para este composto. Sendo assim, determinou-se o pKa do complexo pelo método de espectrofotometria UV-Vis. Os pKas encontrados foram 2,8, 6,8 e 12,1, atribuídos ao grupo carboxilato e aos dois ligantes benzotriazol respectivamente. Desta forma foi possível obter o espectro eletrônico das espécies puras (Fig. 1).

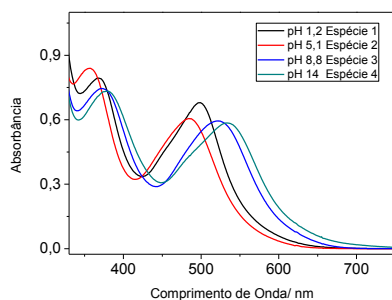


Fig. 1: Espectro eletrônico do [Ru(dcbipy)<sub>2</sub>(Btz)<sub>2</sub>] em diferentes pHs.

Ainda para caracterizar o composto, foi realizado a voltametria cíclica em pH 9,5. O voltamograma (Fig. 2) apresentou somente um processo reversível com E<sub>1/2</sub> = 0,8 V vs EPH, atribuído à oxidação do Ru<sup>2+</sup>.

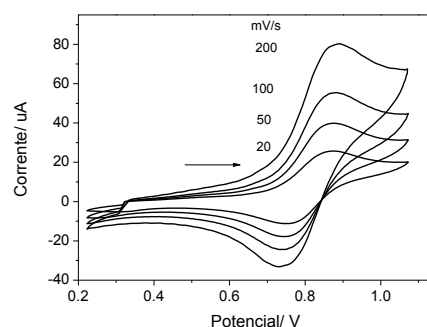


Fig. 2: Voltamograma cíclico obtido do complexo, 1x10<sup>-3</sup> M, em água pH 9,5. Eletrodo de trabalho carbono vítreo, KNO<sub>3</sub> como eletrólito.

Para avaliar o espectroação do composto (IPCE), o complexo foi ancorado em um filme mesoporoso de TiO<sub>2</sub> nanocristalino e uma célula fotoeletroquímica foi montada<sup>2</sup>. O composto apresentou um bom resultado de fotoinjeção (Fig. 3), chegando a 45 % de rendimento em 450 nm. Este resultado ainda pode ser melhorado, visto que a espécie ancorada está protonada, diminuindo o poder doador do benzotriazol.

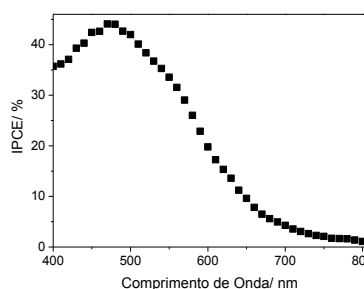


Fig.3: Espectroação do [Ru(dcbipy)<sub>2</sub>(Btz)<sub>2</sub>]

## Conclusões

O complexo [Ru(dcbipy)<sub>2</sub>(Btz)<sub>2</sub>] foi sintetizado, caracterizado e suas propriedades ácido-base e eletroquímica foram estudadas. O complexo, mesmo ancorado na forma benzotriazol, obteve um bom rendimento inicial de fotoinjeção.

## Agradecimentos

FAPESP, CNPq

- 1- B. Oregan and M. Gratzel, *Nature*, 353, 737, 1991.
- 2- A. F. Nogueira, et al., *Inorganic Chemistry*, 43, 396, 2004.