

Derivados metalados de ftalocianina para aplicação em células solares sensibilizadas por corante

Weverson R. Gomes^{1*} (PG), Diesley M. S. Araújo¹ (PG), Antonio E. H. Machado^{1,2} (PQ).
*gomeswr@gmail.com

¹Universidade Federal de Uberlândia, Instituto de Química – Laboratório de Fotoquímica; Caixa Postal 593 CEP 38400-902 Uberlândia, Minas Gerais.

²Universidade Federal de Goiás, Campus Catalão, Departamento de Química; Catalão, Go.

Palavras Chave: DFT, metal-ftalocianinas, CSSC, fotofísica.

Introdução

Ftalocianinas pertencem a uma classe de compostos que possuem potencial aplicação em diferentes campos, como em Terapia Fotodinâmica, dispositivos ópticos não-lineares, sistemas para conversão de energia, etc e ainda possuem grande estabilidade na sucessiva oxidação e redução, o que implica sua possível aplicação como sensibilizadores fotoredox.

Nesta comunicação, são apresentados resultados relativos ao estudo teórico de três derivados de ftalocianina, [{{(2,9-bis(dietielamino)-16,23-dicarboxi)Pc}Zn)}] (FtZn), [{{(2,9-bis(dietielamino)-16,23-dicarboxi)Pc}Al(Cl))} (FtAlCl), [{{(2,9-bis(dietielamino)-16,23-dicarboxi)Pc}Ru(py)₂)} (FtRu), visando avaliar uma possível aplicação em células solares sensibilizadas por corante (CSSC).

Resultados e Discussão

As três moléculas foram otimizadas utilizando a Teoria do Funcional de Densidade (DFT), empregando o funcional híbrido B3LYP e o conjunto de bases atômicas LANL2DZ para todos os átomos, e considerando sua solvatação em DMSO, empregando o método de contínuo dielétrico IEFPCM. Os estados T₁ foram otimizados usando a abordagem CIS, enquanto que as energias das transições eletrônicas e orbitais foram calculadas utilizando a abordagem dependente do tempo da DFT, empregando os mesmos parâmetros descritos anteriormente.

FtZn e FtRu apresentaram estrutura planar, enquanto que a FtAlCl mostrou-se com o Al(III) ligeiramente fora do plano.

Para os três compostos, a transição S₀→S₁ ocorre na região do vermelho e infravermelho próximo (759 nm para a FtZn, 785 nm para a FtRu, e 815 nm para a FtAlCl), requisito essencial para a aplicação destes compostos em CSSC. Resultados de cálculo NBO sugerem que o maior deslocamento batocrômico da FtAlCl não se relaciona a uma maior deslocalização eletrônica.

Para que uma CSSC seja energeticamente favorável na conversão de energia luminosa em elétrica, é necessário que o LUMO do corante tenha energia superior à da banda de condução (BC) do semicondutor (TiO₂), pois o elétron precisa ser injetado nesta banda, e o HOMO tenha energia superior à do potencial redox do eletrólito, pois este oxidará o corante reduzido.

Na **Figura 1** estão esboçados os níveis energéticos dos estados singleto não relaxados e tripleto relaxado para esses compostos. A FtZn e FtAlCl apresentaram energias do HOMO suficientemente menores que a do potencial redox, enquanto E(LUMO) > E(BC-TiO₂). Na FtRu, tanto para o estado singleto quanto o estado tripleto, E(LUMO) > E(BC-TiO₂), embora o HOMO tenha energia bem próxima do potencial redox.

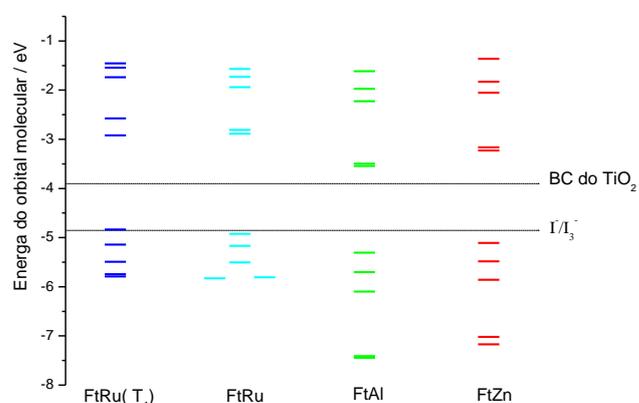


Figura 1. Níveis de energia dos orbitais moleculares dos compostos solvatados.

Conclusões

Os resultados sugerem que esses compostos possuem as energias dos orbitais HOMO e LUMO que favorecem sua aplicação em CSSC, e podem ter grande eficiência em reações de transferência de carga.

Agradecimentos

CAPES, CNPq e FAPEMIG.