

# Estudos estruturais de complexos de Ru(II) para possíveis aplicações em CSSC.

Rafael C. Marchi<sup>1</sup>(PG), Rose M. Carlos<sup>\*1</sup>(PQ).

rosem@ufscar.br

<sup>1</sup>Departamento de Química, Universidade Federal de São Carlos, 13563-905, São Carlos, SP, Brasil

Palavras Chave: Célula solar, fotossensibilizador, dppz, complexos de Ru(II).

## Abstract

Structural studies from Ru(II) complexes for possible applications on DSSC. Herein we report some spectroscopic and photophysical properties of Ru(II) complexes with dppz and perylene for applications in dye sensitized solar cells (DSSC). The complexes were characterized by spectroscopic (UV-vis, IR, <sup>1</sup>H NMR) and electrochemical techniques. The results indicates that the complexes have the potential to be applied as photosensitizer in DSSC.

## Introdução

As células solares sensibilizadas por corantes (CSSC) são uma alternativa interessante frente as células solares de junção p-n<sup>1</sup>. Um dos requisitos necessários é que o fotossensibilizador seja estável tanto para reações fotoquímicas como térmicas ou seja, que não sofram processos de labilização de ligantes e de perda térmica como diminuição de intensidade de absorção ou emissão em solução. Neste trabalho é descrito a síntese, caracterização e propriedades térmicas, fotoquímicas, fotofísicas e eletroquímicas do novo complexo de fórmula geral [Ru(L)<sub>4</sub>(dppz-COOH ou PDi)]<sup>2+</sup> para aplicação em CSSC.

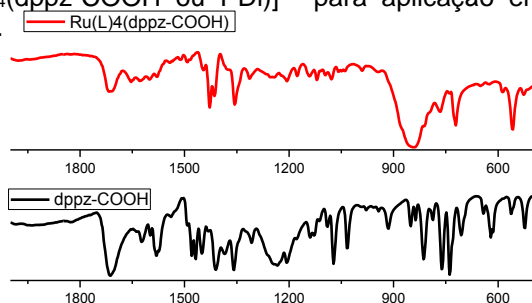


Figura 1. Comparação de absorção no IR.

## Resultados e Discussão

As técnicas espectroscópicas de caracterização dos complexos demonstram que os complexos preparados são hexacoordenados e apresentam geometria cis-. Pelo <sup>1</sup>H-RMN, pode-se notar a deslocação dos sinais devido ao ligante para maiores valores de ppm, indicando a coordenação. Apesar do espectro de IV não indicar uma deformação significativa no estiramento do CO a coordenação do ligante levou a uma mudança de intensidade da banda como mostrado na Figura 1. No espectro de absorção pode-se notar uma banda larga e intensa atribuída a transição eletrônica de

MLCT ( $\lambda_{Abs} = 440$  nm,  $\epsilon = 12400$  mol<sup>-1</sup> L cm<sup>-1</sup> (Ru(II)→ligante). É evidenciado pelo espectro de UV-vis que não há variação de intensidade das bandas mesmo sendo irradiado continuamente por 10 minutos com luz de 420 nm e intensidade igual a  $1,21 \times 10^{-8}$  Einstein.s<sup>-1</sup>, indicando a estabilidade fotoquímica.

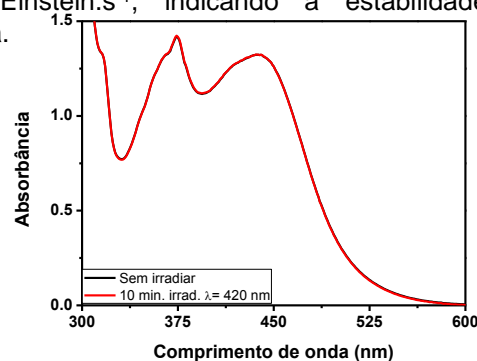


Figura 2. Espectro absorbância [Ru(L)<sub>4</sub>(dppz)]<sup>2+</sup>

O complexo apresenta emissão intensa e larga na região do visível alcançando a região do IV próximo, ainda com boa absorção para aplicação em CSSC. Segundo esses estudos, demonstrou-se ter um grande deslocamento de Stokes de 5594 cm<sup>-1</sup> que é um requisito importante, já que limita a auto-absorção e supressão.

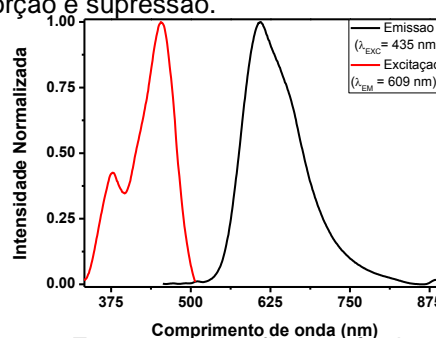


Figura 3. Espectros de fluorescência em MeCN [Ru(L)<sub>4</sub>(dppz)]<sup>2+</sup>

## Conclusões

Os resultados dos estudos estruturais são promissores, ressaltando que os complexos possuem uma banda de MLCT larga e na região do visível, diretamente responsável pela geração de corrente elétrica em dispositivos do tipo CSSC.

## Agradecimentos

CAPES, CNPQ e FAPESP

<sup>1</sup>J. Gong et al. *Renew. and Sustain. Energy Reviews*, 2012, 16, 5848