



Evento	Salão UFRGS 2015: SIC - XXVII SALÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA UFRGS
Ano	2015
Local	Porto Alegre - RS
Título	Estudo teórico de características fotofísicas de corantes C9131 e suas variantes
Autor	GABRIEL MODERNELL ZANOTTO
Orientador	PAULO FERNANDO BRUNO GONCALVES

Estudo teórico de características fotofísicas de corantes C9131 e suas variantes, para uso em células solares: influência do solvente e descrição por diferentes funcionais.

Bolsista: Gabriel M. Zanotto^a
Orientador: Paulo F. B. Gonçalves^a

^a *Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Instituto de Química, Grupo de Química Teórica. Av. Bento Gonçalves, 9500, Porto Alegre-RS.*

A busca por células solares eficientes, de baixo custo e isentas de metais tem despertado um grande interesse dos pesquisadores em células solares sensibilizadas por corantes. Uma vez que é o corante que absorve a luz, gera e transporta a carga, os estudos têm se concentrado em novos corantes orgânicos conjugados. Neste trabalho, a classe de corante orgânico C9131, com variações nos grupos doadores e receptores, tem sido estudada computacionalmente e as suas propriedades fotofísicas foram avaliadas.

O objetivo é estudar a influência do efeito dos solventes, dos diferentes grupos doadores e receptores nas propriedades fotofísicas de interesse. Para isto, utilizou-se da Teoria do Funcional da Densidade Dependente do Tempo (TD-DFT), método da química quântica computacional, no programa Gaussian 09. Os funcionais utilizados nesse estudo foram o PBE1PBE e o CAM-B3LYP. Os efeitos do solvente foram avaliados utilizando o Modelo do Continuum Polarizável (PCM), com Etanol, Acetonitrila, Diclorometano e 1,4-Dioxano, solventes de diferentes constantes dielétricas.

É possível verificar o efeito do solvente ao comparar a diferença entre os comprimentos de onda da mesma molécula. Desvios para o azul na absorção e desvios para o vermelho na emissão têm sido observados em todas as moléculas conforme aumentamos a constante dielétrica do solvente, alterando sua polaridade. Efeitos semelhantes podem ser observados quando os grupos doador e receptor são alterados. Comparando as mudanças de grupo doador, desvios para o vermelho podem ser observados conforme o grupo torna-se mais rígido. Aumentar a polaridade do grupo receptor provoca desvios para o vermelho no comprimento de onda de absorção e para o azul na emissão. Estes comportamentos podem ser explicados pelas mudanças das variáveis que alteram a localização do HOMO e do LUMO, que influenciam diretamente sobre o momento de dipolo da molécula.

Os resultados adquiridos pela pesquisa teórica foram comparados com os obtidos experimentalmente. Dos dois funcionais utilizados, ambos mostraram resultados satisfatórios, no entanto, o funcional híbrido de troca e correlação PBE1PBE apresentou maiores erros relativo nas determinações de comprimento de onda, tanto para absorção quanto emissão. A melhor descrição do funcional CAM-B3LYP pode ser explicada por este ser um funcional híbrido de troca e correlação com correções de longo alcance¹.

¹Takeshi Yanai a,*, David P. Tew b, Nicholas C.; - Chemical Physics Letters 393 (2004) 51–57