SÍNTESE E CARACTERIZAÇÃO DE PORFIRINAS OBTIDAS DE FONTES NATURAIS VISANDO APLICAÇÃO EM DISPOSITIVOS FOTOVOLTAICOS

Elvis Luan Alves (PIBIC/ FA/UEPG), Alex Vieira Pedroso, Jarem Raul Garcia (Orientador), e-mail: jarem.garcia@gmail.com

Universidade Estadual de Ponta Grossa/Departamento de Química

Química, Físico-química.

Palavras-chave: Células solares, cardanol, porfirina

Resumo

Atualmente quando se trata de fontes renováveis para obtenção de energia elétrica, voltam-se as discussões para o sol, este aparece como uma das soluções mais viáveis para a problemática relacionada aos combustíveis fósseis e seus malefícios ao meio ambiente, como liberação de gases ligados ao efeito estufa e também prejudiciais à saúde humana, além do esgotamento de fontes de energia em sua grande parte não renováveis. Baseando-se nisso inicia-se uma nova busca pelo desenvolvimento de células fotovoltaicas, componentes que convertem a energia solar em energia elétrica. Materiais dessa categoria vem sendo desenvolvidos na categoria de células solares orgânicas devido a vantagens como: baixo custo, facilidade de produção e possibilidade de se construir equipamentos flexíveis, quando comparados à equipamentos baseados em semicondutores inorgânicos. Sendo assim, este projeto tem como objetivo, sintetizar materiais orgânicos eletricamente ativos visando aplicá-los em dispositivos fotovoltaicos aspirando um melhor rendimento e redução de custo na produção de células solares.

Introdução

Sendo o sol uma fonte imensa de energia térmica e um dos maiores emissores de radiação no espectro, estuda-lo torna-se cada vez mais viável quando se refere a assuntos relacionados aos impactos causados pelos combustíveis fósseis e assim busca-se cada vez mais conhecimento de formas para utilizá-lo como solução em termos de fontes de energias renováveis. Em sua grande maioria os materiais existentes na área são confeccionados usando-se materiais inorgânicos em sua composição, destacando-se o silício, que mesmo possuindo desvantagens como sua extração ser prejudicial a vida marinha, acarreta também erosão nas dunas onde se encontra a matéria prima do mesmo. Ainda assim, o silício se destaca devido as suas propriedades de condução térmica e elétrica, além disso quando utilizado numa célula solar fornece ao material uma maior durabilidade.[1,2,3]

Focando-se neste fato, iniciou-se algumas pesquisas visando materiais economicamente viáveis e mais favoráveis ao meio ambiente, substituindo então compostos inorgânicos pelos orgânicos. Este tipo de material possui vantagens e desvantagens com relação aos tipos de dispositivos atuais, como por exemplo possui sua estabilidade e fator de conversão menores que no dispositivo inorgânico. Porém possuem menor custo e materiais tendem a ser mais flexíveis o que desperta interesse em otimizar tais procedimentos de modo a buscar fontes de matéria orgânica que possuíssem as características necessárias para se encaixarem no padrão de uma célula fotovoltaica. [4,5]

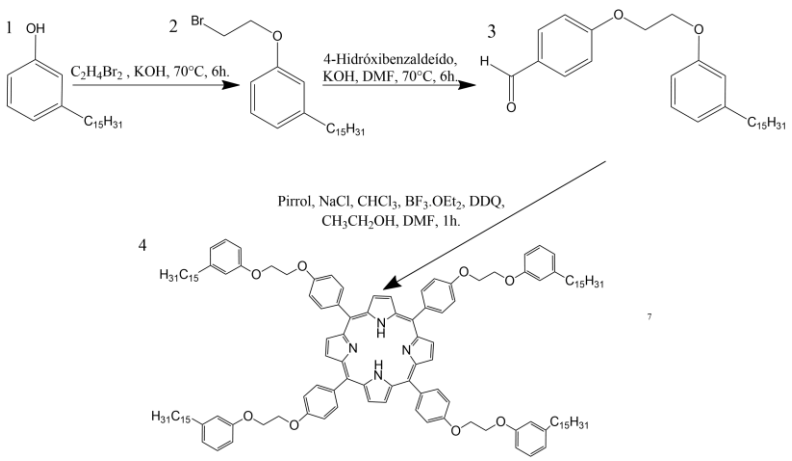
Também observa-se um material mais leve e também de fonte renovável facilitando-se assim a sua confecção por meio também de um processo de síntese simples,

barato e que gere uma quantidade ínfima de resíduos para o meio ambiente. Desta forma abre-se espaço para estudos de porfirinas dentro deste ramo, uma vez que são moléculas que absorvem energia na região do visível, auxiliando na eficiência e na absorção dos dispositivos fotovoltaicos .[6,7,8]

Portanto, este projeto tem como objetivo o desenvolvimento de materiais fotoativos para aplicação em células solares orgânicas, com foco na obtenção de porfirinas derivadas do cardanol. Tal área é de grande interesse, devido ao tema poder gerar inovações em tecnologias de processos de preparação de dispositivos fotovoltaicos comerciais, tornando desta forma viável a utilização da energia solar como fonte de energia renovável.[9]

Material e Métodos

Figura 1- Rota sintética para obtenção do 5,10,15,20tetra- [4- (2- (3-pentadecil) fenoxi) etoxi] fenilporfirina.



Fonte: O autor

Resultados e Discussão

Sintese do 1- (2-bromoetoxi)-3-pentadecilbenzeno ou Bromoetano Cardanol

Na etapa de funcionalização do cardanol utilizando o 1,2- dibromoetano, o produto da síntese foi o composto 1- (2-bromoetoxi) -3-pentadecilbenzeno. A reação 1 (figura 1) ocorre através de uma reação de substituição nucleofílica de segunda ordem, onde a hidroxila do cardanol é transformada em um alcóxido e a mesma atua como nucleófilo atacando o eletrófilo, o 1,2-dibromo etano, onde o bromo atua como um bom grupo de saída formando da ligação C-O. O composto foi purificado utilizando o método de recristalização com etanol e caracterizado por meio de FTIR.

Observou-se no espectro referente ao composto o desaparecimento do estiramento em 3650-3600 cm^{-1} referente a ligação O-H obtendo-se uma nova ligação C-O onde na literatura esta se apresenta entre 1300-1000 cm^{-1} e no espectro foi situada na região de 1261 cm^{-1}. Houve também o surgimento da ligação C-Br onde no espectro localizou-se a mesma em duas regiões uma em 569 cm^{-1} e outra para ligação do tipo CH_2-Br localizada em 1159 cm^{-1} sendo a primeira um estiramento e a segunda um dobramento, tendo seus valores teóricos situados entre 650-510 e 1250-1190 cm^{-1} respectivamente. A ausência de C=O no espectro também é um fato importante para se confirmar a ligação simples entre carbono e oxigênio nesta estrutura.

ISSN 1676-0093

Sintese do 4- [2- (3-n-pendacilfenoxi) -etoxi] benzaldeído ou Fenóxicardanol Benzaldeido

Realizou-se na etapa seguinte, a reação do composto formado, o 1- (2-bromoetoxi) -3-pentadecilbenzeno, em meio básico bem como na etapa anterior. Diferenciando-se agora pela reação do mesmo com o 4-hidroxibenzaldeio visando a obtenção do produto 4- [2- (3-n-pendacilfenoxi) -etoxi] benzaldeído. Onde o 4-hidróxibenzaldeido quando em meio básico tem sua hidroxila desprotonada e assim realiza um ataque nucleofilico ao carbono ligado ao bromo da extremidade da cadeia do composto 2, formando assim uma nova ligação O-C situada na região de 1300-1000 cm^{-1} no espectro e também há o surgimento de uma banda larga em 3650-3600 cm^{-1} referente a um estiramento dado pela ligação O-H.

Sintese do 5 ,10,15,20-tetra- [4- (2- (3-pentadecil) fenoxi) etoxi] fenilporfirina ou Porfirina Cardanol

Já para a terceira etapa realizou-se a porfirinização do composto 3 juntamente de pirrol e outros reagentes necessários já citados na figura 1, obtendo então o composto 5,10,15,20-tetra- [4- (2- (3-pentadecil) fenoxi) etoxi] fenilporfirina. Observou-se no espectro o desaparecimento da carbonila situada geralmente na região de 1800-1630 cm^{-1} na molécula 4. Tal informação corrobora com a comprovação da eficiência da síntese, uma vez que a nova ligação formada se deu sobre a ligação C=O do composto 3. A banda larga na região de 3571 cm^{-1} referente a ligação N-H, evidencia a formação da porfirina em questão. Outras bandas características ao material também foram observadas como por exemplo em 1246 cm^{-1} o estiramento devido a ligação C-N onde seu valor teórico se apresenta entre 1350-1000 cm^{-1}. Estiramento do tipo C=C de aromático, C-H sp^2 e sp^3 também foram observados no espectro. Também realizou-se a avaliação da porfirina perante a absorção de luz na região do ultravioleta e do visível. Esta apresentou absorção característica de porfirinas em 425 nm. Obteve-se a molécula de interesse como comprovado pelos métodos espectroscópicos e esta apresentou absorção em uma região interessante para possível aplicação em dispositivos fotovoltaicos.[10,11,12,13]

Para o RMN ^1H em 400 MHz e utilizando $CDCl_3$ como solvente , encontrou-se : δ, ppm 8.89 (s, 8H, posição β do pirrol), 7.44 (d,8H,Ar), 7.27 (t,4H), 4.65-4.55 (m,16H,O-CH2), 2.67 (t, 8H, Ar-CH2), -2,73 (s,2H, NH). A síntese de obtenção Porfirina Cardanol (4) teve rendimento de 21% onde o composto final adquiriu tonalidade roxa.

Conclusão/ões

Entende-se que as moléculas foram obtidas com sucesso, o que foi demonstrado pelos métodos espectroscópicos citados. A avaliação do material será realizada para verificar a possiblidade de acrescentar um centro metálico a porfirina. Sequencialmente serão realizados testes da molécula de interesse perante um dispositivo fotovoltaico.

Agradecimentos

Ao GGAETS, ao LabMu, ao GDEM, a UEPG, a Fundação Araucária.

Referências

1 LIN, Y; ZHANG, Z; BAI, H; WANG, J; YAO, Y; LI, Y; ZHUA, D; ZHAN, X**. High-performance fullerene-free polymer solar cells with 6.31% efficiency.** *Energy Environmental. Science*, **8**, 2015, p. 610-616.

2 GONG, J; SUMATHY, K; QIAO, Q; ZHOU, Z. **Review on dye-sensitized solar cells (DSSCs): Advanced techniques and research trends.** Renewable and Sustainable Energy Reviews, 68, 2017, p. 234–246.

3 ,GLASNOVIĆ, Z., ROGOŠIĆ, M. & MARGETA, J. **A model for optimal sizing of solar thermal hydroelectric power plant**. *Sol. Energy* **85,** 794–807 (2011).

4 SHAAHID, S. M. **Review of research on autonomous wind farms and solar parks and their feasibility for commercial loads in hot regions**. *Renew. Sustain. Energy Rev.* **15,** 2011, p. 3877–3887.

5 LUO, G; REN, X; ZHANG, S; WU,H; CHOY, W.C.H; HE, Z; CAO, Y**. Recent Advances in Organic Photovoltaics: Device Structure and Optical Engineering Optimization on the Nanoscale.** Small, *12,* 2016, p. 1547–1571.

6 ETXEBARRIA, I; AJURIA, J; PACIOS, R. **Solution-processable polymeric solar cells: A review on materials, strategies and cell architectures to overcome 10%.** Organic Electronics,19, 2015, p. 34–60.

7 OSTROVERKHOVA, O. **Organic Optoelectronic Materials: Mechanisms and Applications**. Chemical Reviews, 116, 2016, p. 13279−13412 .

8 RIBEIRO, V.G.P.; MARCELO, A.M.P.; DA SILVA, K.T.; DA SILVA, F.L.F.; MOTA, J.P.F.; DO NASCIMENTO, J.P.C.; SOMBRA, A.S.B.; DA SILVA CLEMENTE, C.; MELE, G.; CARBONE, L.; ET AL. **New ZnO@Cardanol Porphyrin Composite Nanomaterials with Enhanced Photocatalytic Capability under Solar Light Irradiation**. Materials, 10,2017, p. 1114.

9 SCHARBER, M.C; SARICIFTCI, N.S**. Efficiency of bulk-heterojunction organic solar cells**. Progress in Polymer Science, 38, 2013, p. 1929– 1940.

10 JANSSE, R.A.J; NELSON, J. **Factors Limiting Device Efficiency in Organic Photovoltaics.** *Advanced Materials, 25*, 2013, p. 1847–1858.

11 CAO, W; XUE, J. **Recent progress in organic photovoltaics: device architecture and optical design.** Energy and Environmental Science, 7, 2014, p. 2123 –2144.

12 BENTEN, H; MORI, D; OHKITA, H; ITO, S. **Recent Research Progress of Polymer Donor/Polymer Acceptor Blend Solar Cells.** Journal of Materials Chemistry A, 4,2016, p. 5340-5365.

13 WANG, S; QU,Y; LI,S; YE, F; CHEN, Z, YANG, X. **Improved Thermal Stability of Polymer Solar Cells by Incorporating Porphyrins.** Advanced Functional Materials, 25, 2015, p. 748–757.