VII EAITI 2017 ENCONTRO ANUAL DE INICIAÇÃO TECNOLÓGICA E INOVAÇÃO
UNIVERSIDADE ESTADUAL DE PONTA GROSSA | 09 e 10 de novembro de 2017

SÍNTESE DE PORFIRINAS *MESO*-FENIL-β-SUBSTITUÍDAS PARA USO EM DISPOSITIVOS FOTOVOLTAICOS

Larissa Portugal (PIBITI/Fundação Araucária/UEPG), Anderson Gomes (PG), Jacqueline Aparecida Marques (Orientadora), e-mail: jmarques@uepg.br.
Universidade Estadual de Ponta Grossa/Departamento de Química.

Química Orgânica/Síntese Orgânica

Palavras Chave: *Filmes de SnO_2, células fotovoltaicas, DSSCs*

Resumo

O desenvolvimento de novos materiais para a produção de células fotovoltaicas do tipo DSSCs, que é o objetivo deste trabalho, possui grande importância econômica, substituindo matérias-primas pouco abundantes atualmente utilizadas. Neste trabalho foi realizada a síntese de um derivado porfirínico, utilizando-se técnicas e reagentes de fácil acesso para produção de corantes para uso em células fotovoltaicas. Partiu-se da vanilina, e o produto foi caracterizado por espectroscopias de UV-Vis e RMN de H-1 e C-13 e foi avaliado em sua eficiência como corante.

Introdução

A busca por fontes alternativas de energia tem sido impulsionada tanto pela crescente demanda mundial por eletricidade quanto pela redução do impacto ambiental. Há vários projetos em operação para o aproveitamento da energia solar no Brasil, por meio de sistemas fotovoltaicos de geração de eletricidade. Muitos compostos modelos contendo porfirinas têm sido preparados para entender o sistema de fotossíntese e os processos de aproveitamento de energia solar destes. Os derivados porfirínicos mostram-se bastante promissores, pois podem ser obtidos em grande escala, e acessíveis a produção comercial das células solares de terceira geração. Assim, este trabalho tem também como objetivo a síntese de porfirinas *meso*-fenil-β-substituídas do tipo *push-pull* e incorporação dessas em filmes finos de SnO_2, visando a utilização em células fotovoltaicas.[1-2]

Material e Métodos

Todas as reações foram monitoradas por CCD. Foi realizada a síntese do aldeído precursor, partindo-se da vanilina e do brometo de *n*-butila, assim, realizou-se a síntese da porfirina (TBMPP), através do método de Adler-Longo com adaptações[3]. Posteriormente a síntese, purificação e caracterização (UV-Vis e RMN) da base livre, TBMPP, realizou-se a metalação[4] utilizando-se o $Zn(OAc)_2.2H_2O$, clorofórmio e metanol, mantendo-se a reação sob agitação magnética e refluxo. Ao final, o solvente foi removido em rotoevaporador, o sólido foi dissolvido em diclorometano e lavou-se com água destilada. A fase orgânica foi seca com sulfato de sódio anidro, filtrada e concentrada em rotoevaporador. Em seguida foi realizada a reação de beta-nitração[5] da ZnTBMPP, utilizando-se clorofórmio, metanol, anidrido acético e $Cu(NO_3)_2.3H_2O$, mantendo-se a reação sob agitação magnética e refluxo. Resfriou-se a mistura reacional, lavou-se com água destilada, solução de amônia diluída (1:1), e água destilada. A fase orgânica foi seca com sulfato de sódio anidro, filtrada e removeu-se o solvente em rotoevaporador obtendo-se, assim, o composto desejado, β-NO_2-ZnTBMPP. O produto foi caracterizado por UV-Vis para a determinação da absortividade molar.

Resultados Obtidos

Para a β-NO_2-ZnTBMPP foi realizada a caracterização espectroscópica (UV-Vis) em diclorometano. Foram observadas a banda *Soret* em 420 nm e duas bandas Q na região de 500 a 700 nm confirmando que ocorreu a reação de metalação, pois houve uma diminuição no número de bandas Q.

Para os comprimentos de onda em 420 nm (Soret) e 541 nm (Q1) determinou-se as absortividades molares de $2{,}79.10^5$, e $1{,}73.10^4$ L cm^{-1} mol^{-1}, respectivamente. As absortividades molares obtidas estão em ordem de grandeza semelhante às porfirinas comercias, e como esperado. Todos os dados iniciais de caracterização por espectroscopia de RMN, UV-Vis e dados cromatográficos foram conclusivos[3-5] na caracterização dos compostos obtidos.

Conclusão

A síntese de uma nova porfirina, a β-NO_2-ZnTBMPP, à partir de uma matéria-prima considerada de baixo custo como a vanilina foi efetuada utilizando-se reações de fácil execução e com bom rendimento. Os estudos terão sequencia com análise das condições experimentais para incorporação do derivado em filmes de SnO_2. Para a otimização dessa etapa serão analisados: tempo de imersão, temperatura de imersão e concentração da solução do produto.

Agradecimentos

A UEPG; ao Grupo de Síntese e Caracterização Espectroscópica de Compostos Orgânicos e Materiais – GSCECOM; aos órgãos de fomento: SETI-FUNDO PARANÁ, a Capes/PROAP, e a Fundação Araucária pelo apoio financeiro.

[1] Mathew, S. et al. *Nature Chemistry*. **2014**, 6, 242-246.
[2] Jacoby, M. *Chemical & Engineering News*. **2016**, 94 (18), 30-34.
[3] Bega, P. C.; Marques, J. A. *Semina. Ciências Exatas e Tecnológicas*. **2013**, 34 (2), 171-184.
[4] Prakash, K.; Kumar, R.; Sankar, M. *Royal Society of Chemistry*. **2015**, 5, 66824-66832.
[5] Ostrowski, S.; Szerszeń, D.; Ryszczuka, M. *Synthesis*. **2005**, 5, 819-823.