

ISBN: 978-987-754-185-4



UNIVERSIDAD  
NACIONAL  
DE TUCUMÁN

*naifq*

ASOCIACIÓN ARGENTINA DE  
INVESTIGACIÓN EN FÍSICOQUÍMICA  
Pensocoria Jurídica 2048

XXI CONGRESO ARGENTINO  
DE FÍSICOQUÍMICA Y  
QUÍMICA INORGÁNICA

LIBRO DE RESÚMENES



**TUCUMÁN**  
ARGENTINA



XXI CONGRESO ARGENTINO DE FISIQUÍMICA Y QUÍMICA INORGÁNICA  
TUCUMÁN- ABRIL 2019

**B34 - MODULACIÓN DE LAS PROPIEDADES FISIQUÍMICAS DE NUEVOS  
COMPLEJOS BIPIRIDÍNICOS DE RUTENIO(II)  
PARA SU APLICACIÓN EN CELDAS SOLARES FOTOVOLTAICAS**

Salomón Fernando F.<sup>1</sup>, Vega Nadia C.<sup>1</sup>, Morán Vieyra Faustino E.<sup>2</sup>, Cattaneo  
Mauricio<sup>1</sup>, Borsarelli Claudio D.<sup>2</sup> y Katz Néstor E.<sup>1</sup>

<sup>1</sup>INQUINOVA (UNT-CONICET), Facultad de Bioquímica, Química y Farmacia,  
Universidad Nacional de Tucumán, Ayacucho 471, (T4000INI) San Miguel de  
Tucumán, Argentina

<sup>2</sup>INBIONATEC (UNSE-CONICET), Universidad Nacional de Santiago del Estero, RN9,  
Km 1125, (G4206XCP) Santiago del Estero, Argentina

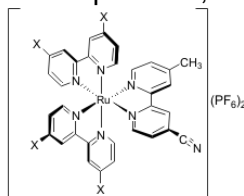
[nkatz@fbqf.unt.edu.ar](mailto:nkatz@fbqf.unt.edu.ar)

### Introducción

Los complejos bipyridínicos de Ru(II) presentan propiedades fisicoquímicas apropiadas para su uso en celdas solares sensibilizadas por colorantes (DSCs).<sup>1</sup> Se propone en este trabajo modular esas propiedades mediante modificaciones químicas que permitan controlar la eficiencia del proceso de conversión de energía en dichas celdas.

### Resultados

Se sintetizaron nuevos complejos de fórmulas  $[\text{Ru}(4,4'\text{-X}_2\text{-bpy})_2(\text{Mebpy-CN})](\text{PF}_6)_2$ , donde bpy = 2,2'-bipyridina, Mebpy-CN = 4-metil-2,2'-bipyridina-4'-carbonitrilo, X = CH<sub>3</sub> (**1**), X = OCH<sub>3</sub> (**2**) y X = N(CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub> (**3**), cuyas estructuras se muestran en la Figura, y se caracterizaron mediante técnicas electroquímicas, espectroscópicas y fotofísicas.



X = CH<sub>3</sub> (**1**), X = OCH<sub>3</sub> (**2**), X = N(CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub> (**3**)

A medida que aumenta la fuerza donante de electrones del grupo X en el ligando 4,4'-X<sub>2</sub>-bpy para los complejos (**1**) al (**3**), se observa un corrimiento catódico de los potenciales de las cuplas Ru<sup>III</sup>/Ru<sup>II</sup> ( $E_{1/2} = 1,23, 1,06$  y  $0,72$  V, en CH<sub>3</sub>CN, vs. SCE) y desplazamientos hacia menores energías de los máximos de absorción y emisión en CH<sub>3</sub>CN ( $\lambda_{\text{max}}/\lambda_{\text{em}} = 475/666, 485/707$  y  $530/800$  nm), en consistencia con los cálculos mecano-cuánticos. Los rendimientos cuánticos de emisión y los tiempos de vida de los estados excitados en CH<sub>3</sub>CN saturado con Ar ( $\tau = 672, 322$  y  $21$  ns) disminuyeron en el mismo orden, de acuerdo a la ley del salto de energía.

Los 3 complejos fueron anclados mediante el grupo nitrilo a la superficie de nanohilos de ZnO, que fueron crecidos en FTO mediante una técnica hidrotermal, y presentaron propiedades fotosensibilizantes promisorias para el diseño de celdas solares.

### Conclusiones

Los nuevos complejos sintetizados y caracterizados fueron aplicados en la fabricación de celdas solares fotovoltaicas cuya eficiencia puede modularse mediante la fuerza donante de electrones de los sustituyentes en los ligandos bipyridínicos.

### Referencias

- 1) Hagfeldt A., Boschloo G., Sun L., Kloo L., Pettersson H., *Chem. Rev.*, **2010**, *110*, 6595–6663.