

THE UV-VIS, IR, AND RAMAN STUDY OF CARAJURINE APPLIED AS ORGANIC SOLAR CELLS

Mauro José Guerreiro Veloso¹, Ivana F. Cunha¹, José Augusto dos Santos Cardoso²,
Tais Souza Sá Pereira¹, Marinaldo Carvalho Lobato⁴, José Francisco Silva Costa³,
Antonio M. J. C. Neto^{1,2,*}

¹ Laboratory of Preparation and Computation of Nanomaterials -ICEN, Universidade Federal do Pará, POBOX. 479, 66075-110, Belém, PA, Brazil.

² Mestrado Nacional Profissional de Ensino de Física, Universidade Federal do Pará, C.P. 479, 66075-110, Belém, PA, Brazil.

^{3,4} Universidade Federal do Pará, Abaetetuba, PA, Ramal Manoel de Abreu, S/n - Mutirão, Abaetetuba - PA, 68440-000, Brasil.

Abstract

Este trabalho propõe à utilização de um corante orgânico carajurina (CAJ), em células solares sensibilizadas por corante. Através dos métodos computacionais Gaussian 09W, foram feitos os estudos teórico do espectro de absorção UV-vis, densidade de estado, Raman e infravermelho utilizando density functional theory utilizando a base B3lyp/6-311++g(d,p). Na região de 400 nm a 550 nm, o corante absorve na região do anil ao verde com o maior pico verificado na região do azul. Observa-se que o corante CAJ pode ser utilizada como uma célula solar fotovoltaica, com maior eficiência na faixa de 450 nm (azul) para absorção de energia. Os valores de HOMO e LUMO correspondentes a -6,40eV e -3,80eV, respectivamente. Apresentando um valor de 2,60 eV, pertencendo ao intervalo visível da faixa de absorção da luz (3.15eV a 1.68eV) o que possibilita que o a carajurina pode ser utilizado como uma potencial célula solar, a transição eletrônica por intermédio dos raios solares que estão inseridos no intervalo UV-vis. A análise dos espectros IR e Raman serão úteis para investigar a qualidade da CAJ e pode ser empregada como corante natural para a síntese de células solares Para os espectros IR, a molécula de CAJ apresentou picos de absorção no intervalo de 1600 a 1000 cm⁻¹ nos anéis benzênicos e em suas ligações químicas entre os átomos com maior atividade de absorção em 1640.2 cm⁻¹. Neste caso aconteceu nos anéis benzênicos vibrações planares onde as ligações H(27)-O(13)=C(11) e H(31)-O(22)-C(1) tiveram vibração tesoura. Para a absorção na faixa infravermelha, o composto variou bastante os valores de absorção em comparação com os valores absorvidos e nos diferentes anéis e nas ligações dos átomos. Observou-se que esta molécula possuía geometria planar e com ramificações metila, nos carbonos 20C e 29C trans-clinal.

Palavras chave: Carajurin, Solar cell dye sensitized, IR, Raman, UV-vis.