

Materia: Laboratorio de Química 2018, primer cuatrimestre

Tutor: Federico Williams (fwilliams@qi.fcen.uba.ar)

Proyecto: Adsorción de porfirinas sobre superficies de $\text{TiO}_2(110)$

Motivación:

El diseño de catalizadores, sensores, dispositivos optoelectrónicos, de almacenamiento de datos y celdas solares que están basados en la interacción entre una superficie sólida activa con otra fase requiere la funcionalización química de superficies. Las porfirinas son particularmente atractivas para modificar las superficies debido a su capacidad para enlazar y liberar moléculas con alta especificidad, a que pueden actuar como centros activos en reacciones catalíticas y a que pueden mediar procesos de transferencia de energía que involucren fotones en el visible. Por lo tanto, el estudio de la interface porfirina/sólido es de gran importancia tanto académica como tecnológica.

Las celdas solares sensibilizadas (dye-sensitized solar cells) constituyen una tecnología muy importante para la conversión eficiente de energía solar a electricidad con un mínimo impacto ambiental [1]. Los diseños más recientes están basados en la adsorción de porfirinas sobre TiO_2 [2]. La interacción entre la molécula y la superficie es muy importante ya que influye en la inyección y recombinación de electrones afectando la eficiencia de conversión de energía. A su vez la orientación molecular modifica la dirección del momento dipolar y también modifica la inyección y recombinación de electrones. Por cierto, estudios recientes sugieren que la adsorción vertical brinda mayores eficiencias [3]. Por lo tanto, es necesario realizar estudios fundamentales sobre los factores que controlan la geometría de adsorción de porfirinas sobre superficies de TiO_2 para mejorar su diseño futuro.

Objetivo:

El objetivo de este proyecto es el estudio de la adsorción de porfirinas con grupos carboxílicos sobre superficies de $\text{TiO}_2(110)$. La interacción entre la molécula y la superficie se estudiará empleando las espectroscopías fotoelectrónicas de rayos X (XPS) y rayos UV (UPS). La geometría de adsorción molecular se estudiará con la estructura fina de la absorción de rayos X cercana al borde (NEXAFS).

Referencias:

1. O'Regan, B.; Grätzel, M. A Low-Cost. *Nature* 1991, 353, 737–740.
2. Li, L. L.; Diau, E. W. Porphyrin-Sensitized Solar Cells. *Chem. Soc. Rev.* 2013, 42, 291–304.
3. Harima, Y.; Fujita, T.; Kano, Y.; Imae, I.; Komaguchi, K.; Ooyama, Y.; Ohshita, J. J. *Phys. Chem. C* 2013, 117, 16364–16370.