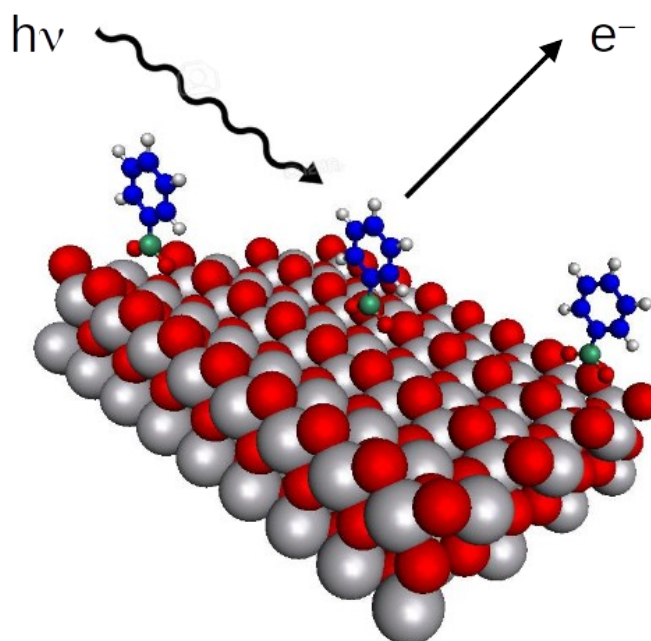


Estudios fundamentales sobre la interacción de moléculas fotosensibilizadoras con superficies semiconductoras

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

La producción de energía desde fuentes renovables impulsada por la demanda creciente de energía y el calentamiento global se encuentra en la frontera de las investigaciones científicas actuales. Las celdas solares funcionalizadas con fotosensibilizadores han sido estudiadas extensamente debido a que ofrecen una tecnología flexible, poseen una eficiencia razonable para la conversión de energía solar en energía eléctrica y tienen un bajo costo de producción. Estos dispositivos están basados en la adsorción de moléculas que actúan como fotosensibilizadores adsorbidas sobre semiconductores como el TiO_2 . Las moléculas se unen a la superficie de TiO_2 usando diversos grupos de anclaje. El grupo más comúnmente utilizado es el ácido carboxílico, aunque los ácidos fosfónicos e incluso los ácidos hidroxámicos han sido estudiados recientemente. El grupo de anclaje afecta el modo de unión y la geometría de adsorción molecular que a su vez pueden limitar la transferencia de carga y la recombinación de cargas en la interface molécula/semiconductor afectando la eficiencia de conversión de fotón a electrón. Por lo tanto es de suma importancia conocer la interacción entre los diversos grupos de anclaje y la superficie de TiO_2 .

En este proyecto proponemos estudiar la interacción de una serie de moléculas cuidadosamente seleccionadas funcionalizadas con ácidos borónicos con superficies de $\text{TiO}_2(110)$. La novedad del proyecto reside en el uso de los ácidos borónicos como grupos de anclaje y los estudios estarán centrados en el uso de las espectroscopías fotoelectrónicas de rayos X y de rayos UV. Esperamos determinar el modo de unión y la estructura electrónica de la interface molécula / semiconductor contribuyendo al conocimiento en este campo de investigación.



Adsorción del ácido bencenoborónico sobre superficies de $\text{TiO}_2(110)$.