



COMPUESTOS FENÓLICOS COMO COLORANTES NATURALES EN CELDAS SOLARES SENSIBILIZADAS POR COLORANTE

Rody Soto¹, Jesús Baldenebro¹, Tomás Delgado¹, Rodolfo Alejos¹, Jorge Reyes¹ y Daniel Glossman^{2,3}

¹Facultad de Ingeniería Mochis, Universidad Autónoma de Sinaloa; México ²Departamento de Química, Universitat de les Illes Balears; España ³Centro de Investigación en Materiales Avanzados; México
e-mail: rody.soto@uas.edu.mx

Los colorantes naturales han sido utilizados como sensibilizadores en celdas solares sensibilizadas por colorante (DSSC). Estos pueden ser fácilmente extraídos de plantas y frutos para ser usados en la celda como una opción económica. Colorantes betalaínas, antocianinas y flavonoides han alcanzado eficiencias de conversión hasta por encima del 2% [1]. La mayor eficiencia alcanzada con colorantes naturales es de 2.7% usando extracto de betabel (principal contenido de betalaínas) [2], y empleando antocianinas y flavonoides ha sido de 1.17%, estas últimas contenidas en extracto de pericarpio de mangostán (cy-3-glc, cy-3-suforosida y rutina) [3]. El estudio resultó de suma importancia para mejorar los resultados de eficiencia en las celdas solares donde se emplean. Debido a lo anterior, se propuesó el análisis de un grupo de moléculas fenólicas flavonoides y otras involucradas en la biosíntesis de las mismas, todas ellas contenidas en la uva. El grupo está compuesto por el flavonoide rutina y epicatequina, y los compuestos fenólicos: vanillina, floridzina, resveratorl y los ácidos salicilico, cafeico y ferúlico. Se obtuvieron las geometrías optimizadas, niveles de energía del orbital molecular más alto ocupado (HOMO) y del orbital molecular más bajo desocupado (LUMO), y espectros de absorción ultravioleta-visible (UV-Vis) usando la Teoría de Funcionales de la Densidad (DFT) mediante la química modelo B3LYP/6-311G(d) con el código computacional Gaussian 09. Además se evaluaron los parámetros de reactividad química derivados de DFT conceptual. A pesar del tamaño pequeño de las moléculas, se observa que la mayoría presenta propiedades adecuadas para ser empleadas como sensibilizador.

Referencias:

- (1) Calogero, G.; Di Marco, G.; Caramori, S.; Cazzanti, S.; Argazzi, R.; Bignozzi, C. A. *Energy Environ. Sci.* **2009**, 2 (11), 1162.
- (2) Sandquist, C.; McHale, J. L. J. *Photochem. Photobiol. A Chem.* **2011**, 221 (1), 90–97.
- (3) Zhou, H.; Wu, L.; Gao, Y.; Ma, T. J. *Photochem. Photobiol. A Chem.* **2011**, 219 (2-3), 188–194.