

# CÉLULA DE GRÄTZEL: DE ENERGIA SOLAR À ENERGIA ELÉTRICA PELO MODELO DE POTENCIAL QUÍMICO

**Francisco Marcone Lima** – marcone@posmec.ufc.br

**Ana Fabíola Leite Almeida** – anfaleal@yahoo.com.br

**Francisco Nivaldo Aguiar Freire** – nivaldo@ufc.br

Universidade Federal do Ceará, Departamento de Engenharia Mecânica e de Produção

**Karine Pereira Bezerra** – karinepereira.bezerra@hotmail.com

**Maria Katiane Diógenes Marques** – katiannedm@hotmail.com

Universidade Federal do Ceará, Departamento de Engenharia Química

**Resumo.** Neste trabalho é apresentado o modelo teórico para estimar a potência elétrica de células fotovoltaicas de Grätzel sensibilizadas por corante, por meio da potência química. O modelo é a concatenação das idéias presente nos modelos de potencial químico e de potência química. O primeiro é usado para estimar a eficiência de capturar da energia radiante, emitida pelo sol ou uma fonte artificial, de uma superfície fotoexcitável genérica. O segundo é usado para estimar a potência química em uma célula combustível, conhecido o potencial químico dos reagentes e dos produtos. A partir da análise dos dois modelos tem-se o terceiro modelo que é direcionado à célula de Grätzel e que permite estimar a potência química e, por conseguinte a potência elétrica para essa célula em função dos parâmetros solares: ângulo sólido, temperatura da fonte de radiação, comprimento de onda e temperatura da superfície da célula. Como o corante fotossensível na célula de Grätzel é responsável pela geração de elétrons e o semicondutor o de transporte de elétrons, a condição de que a camada de corante é a superfície de absorção da luz incidente é usada. A potência elétrica estimada para a célula de Grätzel tem como base os princípios termodinâmicos aplicados à reação fotoquímica no corante e permite a compreensão de algumas limitações no processo de conversão da energia solar nesse tipo de célula.

**Palavras-chave:** Energia Solar, Célula de Grätzel, potência química, potência elétrica.

## 1. INTRODUÇÃO

Nas últimas décadas a sociedade tem aumentado o interesse por questões ligadas à proteção do meio ambiente e procura por recursos alternativos não poluentes. Os recursos renováveis oferecem várias vantagens, eles podem ser usados de muitas maneiras e geram problemas ambientais mínimos, por exemplo, a utilização de energia solar. A energia solar fotovoltaica consiste na conversão direta da radiação solar em eletricidade e tal transformação é um fenômeno físico denominado efeito fotovoltaico, obtida através de um dispositivo eletrônico denominado dispositivo fotovoltaico ou célula fotovoltaica.

O estudo da energia fotovoltaica e princípio de funcionamento de células fotovoltaicas são geralmente realizados pela fabricação da célula e utilização modelos de circuito elétrico para caracterização. Um modelo é uma representação simplificada da realidade, ou seja, consiste na representação de um sistema ou processo real. O modelo químico é uma formulação química do sistema físico real que é abstraído de forma a extrair somente os aspectos relevantes para a característica a ser analisada. Porém, a simplificação do sistema físico não deve comprometer a representatividade do modelo. O equacionamento do modelo baseia-se em princípios físicos e químicos estabelecidos; quando possível, também em relações obtidas experimentalmente.

O material mais usado para fabricação de células fotovoltaicas é o silício, mas este material torna as células caras. Devido ao crescimento das pesquisas sobre fontes de energias renováveis, há cada vez mais interesse no estudo dos processos físicos relevantes na conversão da radiação solar em energia elétrica de forma eficiente e barata. A célula de Grätzel é uma nova tecnologia para produção de células fotovoltaicas a custos menores quando comparados com as células de silício. A célula de Grätzel é composta por camadas de óxido condutor transparente (OCT), dióxido de titânio ( $\text{TiO}_2$ ); corante fotossensibilizador, eletrólito redox e contraeletro; tendo como suporte material transparente, por exemplo, o vidro, como na Fig. 1.

Basicamente, o processo de geração da fotocorrente na célula de Grätzel devido à absorção de energia radiante pela camada de corante e há a criação e difusão do estado excitado nas moléculas do corante, seguida da separação, transporte e coleta nos eletrodos (OCT: $\text{TiO}_2$  e contraeletro), ver Fig. 2. O par redox tem a função de regenerar o corante fotossensibilizador e assim tornar o processo de geração de fotocorrente reversível. O corante fotossensibilizador desempenha papel vital na célula de Grätzel, pois ele é a fonte de geração de elétrons que são injetados no semicondutor. O efeito fotoeletroquímico nas interfaces semicondutor-corante na célula de Grätzel tem sido alvo de pesquisas experimentais e teóricas. O objetivo das pesquisas é determinar as condições adequadas para a construção da célula de Grätzel em escala industrial, de forma que sejam eficientes e de baixo custo.

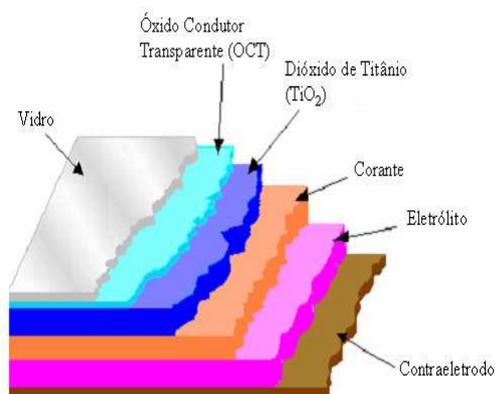


Figura 1- Esquema genérico da célula de Grätzel.



Figura 2- Processos envolvidos na geração de corrente elétrica na célula de Grätzel.

O modelo teórico para estimar a potência elétrica da célula de Grätzel é a concatenação das teorias de outros modelos teóricos. A análise das teorias presentes nos dois modelos gerou como externalidade o modelo teórico para estimar a potência elétrica da célula de Grätzel em função da variação de potencial químico. O primeiro modelo é destinado a estimar a eficiência teórica de conversão da energia solar em uma superfície genérica e o segundo a potência química em uma célula combustível, ambos em função da variação de potencial químico. Ao considerar a superfície genérica como sendo a célula de Grätzel, a eficiência teórica de conversão da energia pode ser obtida com base nos princípios termodinâmicos aplicados a reação fotoquímica. Como o corante fotossensível na célula de Grätzel é responsável pela geração de elétrons e o semiconductor o de transporte de elétrons, a eficiência obtida é a eficiência termodinâmica da célula baseada no corante.

Este trabalho tem como proposta apresentar o modelo teórico para estimar a potência elétrica por meio da potência química que é função da variação do potencial químico e indicar alguns fatores que limitam a conversão de energia solar na célula de Grätzel. O modelo teórico baseia-se na camada de corante e nos princípios termodinâmicos aplicados a reações fotoquímicas. Como a célula de Grätzel é formada por camadas, as condições adotadas pelo modelo são: a camada de corante é a única superfície fotossensível, o potencial químico é gerado durante a reação fotoquímica e a variação dele é estimada usando-se parâmetros solares, por exemplo, permite estimar a variação do potencial químico ( $\mu_{A^*} - \mu_A$ ) em função dos parâmetros solares comprimento onda ( $\lambda$ ), ângulo sólido ( $\Omega$ ), temperatura da fonte de radiação ( $T_R$ ) e outros parâmetros; na reação fotoquímica não há formação de subprodutos, a reação é reversível e a célula é exposta à radiação monocromática e policromática.

## 2. MODELO TEÓRICO

### 2.1. Condição de potencial químico

A radiação solar que é composta por vários comprimentos de onda é a forma de energia recebida pela Terra. A luz solar emite radiação com comprimentos de onda que vão desde o ultravioleta, passando pelo visível, até o infravermelho. A luz proveniente de fonte natural (o sol) ou artificial quando incide sobre um objeto, três fenômenos diferentes podem ocorrer: absorção, reflexão e transmissão. A transmissão está relacionada com a translucidez do objeto, enquanto que os fenômenos de absorção e reflexão estão relacionados à percepção da cor do objeto. Este fato decorre da capacidade de absorver ou refletir comprimentos de onda específicos que é uma característica específica de cada material.

A energia solar é responsável por diversos processos de transformação energética que ocorrem na Terra, desde a fotossíntese, energia solar fotovoltaica, célula combustível (Fig. 3); vários fenômenos atmosféricos e até mesmo na formação dos combustíveis fósseis. O sol emite radiação em vários comprimentos de onda e às vezes é mais conveniente analisar a radiação eletromagnética a partir da perspectiva da mecânica quântica, no qual a radiação é

composta de pacotes de energia. A energia destes pacotes, também chamados de fótons, é função da velocidade da luz, do comprimento de onda e da constante universal chamada de constante de Planck.

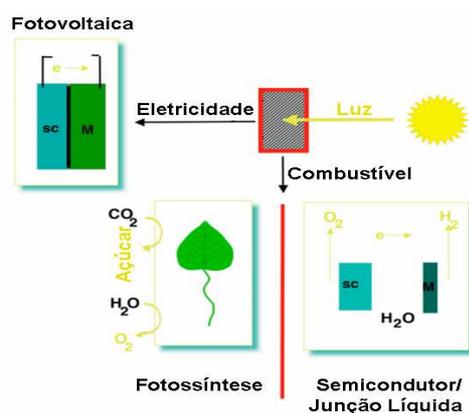


Figura 3- Tipos de conversão da energia solar.

A energia pode ser definida como a medida da capacidade de realizar trabalho, sendo freqüentemente associada ao conceito de potência, fluxo de energia ao longo do tempo. Ela pode ser encontrada sob várias formas, radiação solar, química, nuclear, térmica, mecânica e elétrica, dentre outras. A linha do crescimento sustentável argumenta que o caminho mais rápido, eficiente e barato para prover a energia necessária para o futuro é uma combinação vários fatores, entre eles aumentar a eficiência do uso de energia e aumentar o emprego de recursos energéticos solares diretos e indiretos. As energias renováveis são consideradas energias alternativas ao modelo energético tradicional, tanto pela sua disponibilidade, presente e futura, como pelo seu menor impacto ambiental.

De toda energia solar que entra na Terra, uma parte é elevada em sua qualidade pelo sistema terrestre, mas a maior parte é degradada, passa pelo sistema e sai dele na forma de energia calórica de baixa qualidade. “De acordo com Grätzel (2003), a propriedade importante das células de Grätzel é a possibilidade de fótons, energia recebida em forma de radiação incidente, com energia maior do que a energia da banda proibida excitar elétrons para a banda de condução. Isso ocorre por meio da injeção de elétrons a partir de uma camada de corante fotossensível na banda de condução do semicondutor”. “Grätzel e Moser (2001) mostram que a fotoquímica associada aos princípios da termodinâmica fornece contribuição para o entendimento dos fatores que determinam as limitações no processo de conversão de luz em reações fotoquímicas”.

“De acordo com Grätzel e Moser (2001), nas reações químicas o propósito é converter os químicos em energia e nas reações fotoquímicas é converter a radiação eletromagnética em potencial químico. No entanto, os princípios da termodinâmica impõem limitações para o processo de conversão da radiação incidente (luz) em potencial químico. A perda de energia durante o processo fotoquímico tem diversas origens, dentre elas”:

- entropia da luz;
- condição de não equilíbrio no sistema;
- aumento da entropia devido ao espalhamento ou absorção da radiação;
- baixa eficiência de conversão para radiação policromática comparada com a monocromática.

A taxa e a conversão no equilíbrio de uma reação química dependem da temperatura, da pressão e da composição dos reagentes. No sistema envolvendo reações químicas a energia de Gibbs(G) associado ao sistema é função da temperatura (T), pressão (P), potencial químico ( $\mu$ ), dentre outros;  $G=g(T,P,\mu,...)$ . A energia de Gibbs de um sistema fechado diminui durante um processo irreversível, a T e P constantes, e que a condição de equilíbrio é alcançada quando G atinge seu valor mínimo. Assim, se uma mistura não está em equilíbrio, qualquer reação a T e P constantes leva a uma diminuição na energia de Gibbs do sistema. Ao considerar que existe uma única variável  $\lambda$  que caracteriza o processo de reação, consequentemente a energia de Gibbs do sistema, com os demais parâmetros constantes, é determinada pela variável  $\lambda$ .

Ao considerar que a variável  $\lambda$  representa o conhecimento do valor do potencial químico numa reação química com os demais parâmetros que permitem estimar a energia de Gibbs constantes, significa conhecer a energia de Gibbs do sistema. Uma vez que segundo a literatura, a variação da energia de Gibbs pode ser interpretada como energia disponível para realizar trabalho, a variação do potencial químico permite estimar a energia disponível para realizar trabalho. “Segundo Grätzel e Moser (2001), para uma reação fotoquímica numa superfície genérica as moléculas do corante (A) tem um potencial químico ( $\mu_A$ ) associado. Elas ao receberem luz ( $h\nu$ ) passam para o estado excitado ( $A^*$ ) com potencial químico ( $\mu_{A^*}$ )”, ou seja;



no qual  $\mu_R$  representa a fração molar do quanta de luz absorvido ou o potencial químico da radiação, em analogia ao potencial químico;  $h$  é a constante de Planck ;  $v$  é a velocidade da luz;  $k_d$  e  $k_i$  são respectivamente as constante das velocidades direta e inversa da reação.

Devido à absorção da luz por substâncias fotossensíveis há a geração de uma reação química e, por conseguinte a formação de um potencial químico associado ao produto. “Grätzel e Moser (2001) consideram que numa reação fotoquímica com velocidade de reação  $J$ , a energia extraída da luz na reação fotoquímica ( $E$ ) ou a potência de conversão da reação está relacionada à geração de produto  $A^*$ , no qual há geração de potencial químico associado ( $\mu_{A^*}$ ) que pode ser representado pela Eq. (2). Em condições ideais, a variação do potencial químico no processo de reações fotoquímicas espontâneas pode ser dada pela isotérmica de Van’t Hoff”, representado pela Eq. (3.1):

$$E = J \cdot \mu_{A^*} = J \cdot (\mu_A + \mu_R + \Delta\mu) \quad (2)$$

$$\Delta\mu = \mu_{A^*} - \mu_A - \mu_R = R.T \ln(1 - \varphi) \quad (3.1)$$

no qual  $R$  e a constante universal dos gases,  $T$  a temperatura em Kelvin no sistema reacional e  $\varphi$  é o fator adimensional, que relaciona a velocidade global da reação ( $J$ ) com a da reação direta ( $j_d$ ), dado por:

$$\varphi = \frac{J}{j_d} \quad (3.2)$$

A variação de potencial químico pode ser interpretada como a exportação de energia armazenada pela superfície fotossensível extraída da fonte radiante. “Ainda de acordo com Grätzel e Moser (2001), o potencial químico para a radiação ( $\mu_R$ ) em processos de absorção com reação fotoquímica associada, pode ser estimado em função do fator adimensional  $\varphi$ ”. Isso é possível, ao obter a derivada, Eq. (2), à máxima potência de conversão e considerar potencial químico de  $A$  como referência zero. De outra forma, a Eq. (4) pode ser usada para estimar o potencial químico para a radiação ( $\mu_R$ ) com reação fotoquímica associada:

$$\frac{\mu_R}{R.T} = \frac{\varphi}{1 - \varphi} - \ln(1 - \varphi) \quad (4)$$

## 2.2. Condição de radiação monocromática

“Grätzel e Moser (2001), a máxima eficiência de conversão da luz é limitada pela máquina de Carnot aplicada à radiação, com entropia associada. A quantidade máxima de energia solar por mol ( $Q_R$ ) que pode ser utilizada na produção de trabalho na temperatura ambiente obedece a eficiência de Carnot”. Ao se considerar que o material está à temperatura ambiente  $T_A$  e a fonte de radiação a  $T_R$ , o potencial químico máximo da radiação é dado por:

$$\mu_R = \frac{Q_R(T_R - T_A)}{T_R} \quad (5)$$

onde  $Q_R$  energia de radiação e  $T_R$  é a temperatura efetiva de radiação.

Ao considerar a fonte de radiação o sol, estudos mostram que existem fortes variações de temperatura ao longo das várias regiões interiores e na própria atmosfera solar. Os estudos da temperatura do corpo negro, através das leis de Planck, Stefan-Boltzmann e Wien, conduzem a valores diferentes, pois dependem dos procedimentos utilizados. A diferença entre os valores estimados demonstra que o sol não emite como um corpo negro e, por isso, não é possível atribuí-lhe um único valor para a temperatura. Além disso, o sol emite radiação em vários comprimentos de onda, mas para a condição de radiação monocromática a comprimento de onda específico  $\lambda$ , a energia recebida por mol ( $Q_R$ ) pode ser expressa na forma:

$$Q_R = \frac{N.h.c}{\lambda} \quad (6)$$

onde  $N$  é o número de Avogadro,  $h$  constante de Planck,  $c$  a velocidade da luz.

Há dois importantes teoremas relacionados ao rendimento termodinâmico do ciclo de Carnot, de forma reduzida de acordo com o primeiro: não é possível a construção de um motor que trabalhe entre dois reservatórios térmicos e que seja mais eficiente que um motor reversível operando entre os mesmos dois reservatórios. O segundo afirma que todos os motores que operam pelo ciclo de Carnot e entre dois reservatórios de temperatura constante tem o mesmo

rendimento térmico. “Smith *et al.* (2007), pelos princípios da termodinâmica a eficiência máxima de conversão é obtida pela máquina térmica de Carnot”. “Grätzel e Moser (2001) a eficiência máxima de conversão da energia solar ( $\eta_r$ ) pode ser representada pela fórmula de Carnot aplicada à radiação”, representado pela Eq. (7).

$$\eta_r = \frac{\mu_R}{Q_R} = \frac{T_R - T_A}{T_R} \quad (7)$$

Todo corpo quente irradia em comprimentos de onda do espectro eletromagnético. As leis para a emissão são formuladas na forma mais simples para o corpo negro a temperatura T. A fórmula de Planck é a lei central para um radiador térmico e pode ser representada de várias formas. “Grätzel e Moser (2001), a temperatura do corpo negro ( $T_R$ ) não considerando o espalhamento ou absorção da luz é dada pela Eq. (8a). Ao considerar o espalhamento da luz tem-se a chamada efetiva ( $T_{Rs}$ ), ver Eq. (8b), que torna as Eqs. (5) e (7) mais representativas, isto é, valores fornecidos próximos de valores experimentais. Além disso, para massa de ar AM = 1,5 pode-se considerar a temperatura do corpo negro sem espalhamento da luz ( $T_R$ ) de 5200K”.

$$T_R = \frac{h.c}{k_B \cdot \lambda} \cdot \left( \frac{1}{\ln \left( 1 + \frac{2 \cdot \pi \cdot h.c^2 \cdot \Omega}{\lambda^5 \cdot I_\lambda} \right)} \right) \quad (8a)$$

$$T_{Rs} = \frac{h.c}{k_B \cdot \lambda} \cdot \left( \frac{1}{\ln \left( 1 + \frac{8 \cdot \pi \cdot h.c^2}{\lambda^5 \cdot I_\lambda} \right)} \right) \quad (8b)$$

no qual  $I_\lambda$  trata-se da potência irradiada por unidade d’área de um corpo negro na temperatura T por unidade de comprimento de onda ou irradiação espectral, cuja unidade é  $W \cdot m^{-2} \cdot nm^{-1}$ ;  $\Omega$  é o ângulo sólido e  $k_B$  é a constante de Boltzmann.

“Grätzel e Moser (2001) mostram que a condição ideal, à máxima energia extraída da luz com radiação monocromática, a eficiência global de conversão da luz ( $\eta_g$ ) com reação fotoquímica associada que equivale à eficiência global da reação fotoquímica pode ser expressa em função da variação do potencial químico e da energia da incidente”. De forma que o uso das Eqs. (9a) e (9b) permite estimar a eficiência de conversão da radiação monocromática de comprimento  $\lambda$  em processos fotoquímicos, em função dos potenciais químicos associado aos estados fundamental e excitado.

$$\frac{(\mu_{A^*} - \mu_A)}{N \cdot h.c / \lambda} = 1 - \frac{T_A}{T_R} - \frac{R \cdot T_A \cdot \lambda}{N \cdot h.c} \cdot \ln(4\pi / \Omega) + \frac{R \cdot T_A \cdot \lambda}{N \cdot h.c} \cdot \ln(1 - \phi) \quad (9a)$$

$$\eta_g = \frac{\lambda \cdot (\mu_{A^*} - \mu_A)}{N \cdot h.c} \quad (9b)$$

Os últimos três termos do lado direito na Eq. (9a) representam as perdas devido à entropia da luz, o aumento da entropia devido à absorção ou o espalhamento da luz e as perdas causadas pelas condições de não equilíbrio do sistema reacional. “Segundo Grätzel e Moser (2001), no processo de conversão da energia solar em energia elétrica deve-se considerar a influência da fração da energia absorvida da radiação policromática ( $\theta$ )”. A eficiência máxima em processos fotoquímicos, considerando fonte de luz policromática é dada por:

$$\eta = \eta_g \cdot \theta \quad (9c)$$

### 2.3. Potência elétrica

Uma célula combustível é similar em alguns aspectos a uma célula eletrolítica ou bateria, a célula é o dispositivo pelo qual o combustível é oxidado eletroquimicamente para produzir potência elétrica. Células que usam o hidrogênio como combustível são os dispositivos mais simples desse tipo. As células combustíveis têm características de bateria

por possuir dois eletrodos separados por um eletrólito, mas nelas não há armazenamento do eletrólito como ocorre na baterias. Os reagentes (eletrólito) são alimentados continuamente e os produtos da reação são também retirados continuamente.

A célula combustível não recebe uma carga elétrica inicial e em operação, ela não perde carga elétrica, operando em sistema contínuo desde que combustível e oxigênio sejam fornecidos. A operação em regime contínuo produz uma corrente elétrica contínua estacionária. “Segundo Job e Herrmann (2006) em uma célula combustível trabalhando reversivelmente a potência química ( $P_q$ ) é igual à potência elétrica ( $P$ ). A potência química é obtida em função da variação do potencial químico ( $\mu_{\text{Produto}} - \mu_{\text{Reagente}}$ ) e da velocidade de reação química ( $J_a$ ) e potencia elétrica em função da variação do potencial elétrico ( $\phi_2 - \phi_1$ ) e a corrente elétrica ( $I$ )”.

Para a célula de Grätzel por analogia, pode-se inferir que a potência química para a célula de Grätzel também pode ser interpretado como sendo função da variação do potencial químico e velocidade da reação ( $J$ ). De forma que o produto é a molécula de corante no estado excitado ( $A^*$ ) e com potencial químico associado  $\mu_{A^*}$  e reagente é a molécula de corante no estado fundamental ( $A$ ) e com potencial químico associado  $\mu_A$ . Assim, a variação do potencial química é dada por ( $\mu_{A^*} - \mu_A$ ), a Fig. 1 ilustra o comportamento de uma célula de Grätzel, em analogia a uma célula combustível.

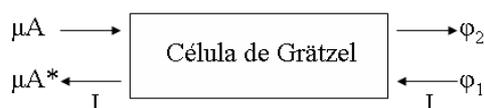


Figura 1- Esquema de funcionamento da célula de Grätzel relacionando à potência química (lado esquerdo) com a potência elétrica (lado direito).

Para a célula combustível e a célula de Grätzel a potência elétrica ( $P$ ) é obtida da mesma maneira, em função da diferença entre os potenciais elétricos ( $\phi_1 - \phi_2$ ) ou voltagem e da corrente elétrica ( $I$ ), ou seja,

$$P = (\phi_2 - \phi_1) \cdot I \quad (10)$$

A potência química ( $P_q$ ) para a célula de Grätzel, em analogia a potência química para a célula combustível, é obtida em função da diferença entre os potenciais químicos da molécula de corante nos dos estados possíveis durante o processo de operação da célula, ( $\mu_{A^*} - \mu_A$ ), e da velocidade da reação ( $J$ ), ou seja,

$$P_q = (\mu_{A^*} - \mu_A) \cdot J \quad (11)$$

O valor da velocidade da reação ( $J$  ou  $J_a$ ), geralmente é obtido com o auxílio da cinética química que permite deduzir a chamada equação da velocidade e por meio dessa equação é possível estimar a velocidade da reação química. “Job e Herrmann (2006) mostram que a relação entre a velocidade da reação ( $J_a$ ) e a corrente elétrica ( $I$ ) pode ser obtida com o auxílio do parâmetro  $z$  e da constante de Faraday, onde o parâmetro  $z$  é tanto função dos potenciais elétricos e quanto dos potenciais químicos”. As relações são representadas pelas Eq. (12a) e (12b) e ao reinterpretá-las para a células de Grätzel tem-se que  $J_a$  passa a ser  $J$  e ( $\mu_{\text{Produto}} - \mu_{\text{Reagente}}$ ) passa a ser ( $\mu_{A^*} - \mu_A$ ).

$$J_a = \frac{I}{z \cdot F} \quad (12a)$$

$$z = \frac{(\mu_{\text{Produto}} - \mu_{\text{Reagente}})}{F \cdot (\phi_2 - \phi_1)} \quad (12b)$$

A Eq. (12a) e a Eq. (12b) quando interpretada para a célula de Grätzel permitem estimar a velocidade da reação ( $J$ ), onde o retorno do corante do estado excitado ao estado fundamental implica a injeção de elétrons no semiconductor que compõe a célula de Grätzel e, por conseguinte a geração de corrente elétrica. Um rearranjo na Eq. (9a) permite estimar a variação do potencial químico ( $\mu_{A^*} - \mu_A$ ) em função dos parâmetros solares comprimento onda ( $\lambda$ ), ângulo sólido ( $\Omega$ ), temperatura da fonte de radiação ( $T_R$ ) e outros parâmetros. Pela Eq. 11 é possível estimar a potência química para uma fonte de radiação monocromática. Ao considerar-se que a potência química é igual à potência elétrica, então a potência química pode ser considerada a própria potência elétrica.

“Quaschining (2007) e Duffie (2006), a maior voltagem que uma célula solar pode atingir é a voltagem de circuito aberto ( $V_{ca}$ ) e a maior corrente elétrica é a corrente de curto-circuito ( $I_{cc}$ ). Tanto os valores de  $V_{ca}$  quanto de  $I_{cc}$  podem ser obtidos ou através de dados experimentais ou através de modelos de circuito elétricos.” Portanto, ao considerar a máxima voltagem e a máxima corrente, tanto a corrente quanto a voltagem nas Eq. (12a) e Eq. (12b) podem ser interpretadas como  $I_{cc}$  e  $V_{ca}$ .

Ao considerar que  $V_{ca}$  e  $I_{cc}$  são obtidos sob a condição de radiação policromática, a velocidade da reação estimada pela Eq. (12a) está em função da radiação policromática, ou seja,  $J_0$ ; enquanto que a variação do potencial químico é

função da radiação monocromática. Pelo uso das Eqs. (9a) e (9c), a Eq. (11) pode ser reescrita de forma que possa representar a potência elétrica gerada com a utilização de uma fonte de radiação policromática, ou seja,

$$P_{\theta} = (\mu_{A^*} - \mu_A) \cdot \theta \cdot J = (\mu_{A^*} - \mu_A) \cdot J_{\theta} \quad (13)$$

Onde a variável  $J_{\theta}$  representa a velocidade da reação quando na superfície estiver incidindo radiação policromática.

#### 2.4. Potência elétrica em células de Grätzel com corante natural

“Chang *et al.* (2010) e Zhou *et al.* (2011) mostram alguns corantes naturais utilizados como corantes fotossensíveis em células de Grätzel e os principais parâmetros elétricos ( $V_{ca}$ ,  $I_{cc}$ , fator de forma e eficiência elétrica) da célula associados a cada corante que permitem conhecer a potência elétrica da célula de Grätzel sob radiação policromática artificial a AM 1,5”. Uma que são conhecidos  $V_{ca}$  e  $I_{cc}$  a velocidade da reação química ( $J$ ) pode ser estimada pelas Eqs. (12a) e (12b). A potência química pode ser estimada pela Eq. (13), que sob as hipóteses de trabalho reversível na célula, estado estacionário e célula trabalhando a temperatura ambiente; implica na própria potência elétrica.

A Tab. 1 contem os valores dos parâmetros e dimensões, usados no modelo e a Tab. 2 mostra os valores obtidos a partir do modelo, considerando o sol um corpo negro; AM 1,5 irradiância média  $1,16 \text{ W m}^{-2} \text{ nm}^{-1}$  e  $\Omega = 6,8 \times 10^{-5}$ ; e os fornecidos pela referência acima para três corantes naturais a AM 1,5.

Tabela 1. Tabela de constantes e fatores de conversão.

CONSTANTE	SÍMBOLO	VALOR	UNIDADE
Velocidade da luz	C	$2,997925 \times 10^8$	$\text{m.s}^{-1}$
Número de Avogrado	N	$6,022045 \times 10^{23}$	$\text{mol}^{-1}$
Constante de Planck	H	$6,626176 \times 10^{-34}$	J.s
Constante dos gases	R	$8,314126 \times 10^0$	$\text{J.mol}^{-1}.\text{K}^{-1}$
Constante de Boltzmann	$k_B$	$1,380662 \times 10^{-23}$	$\text{J.K}^{-1}$
Eletrón-volt	eV	$1,6602189 \times 10^{-19}$	J
Constante de Faraday	F	$9,56 \times 10^4$	$\text{C.mol}^{-1}$

Tabela 2. Valores para célula de Grätzel.

Extrato	$\lambda$ (nm)	Zhou <i>et al.</i> (2011)				Modelo		
		$I_{cc}$ ( $\text{mA cm}^{-2}$ )	$V_{ca}$ (V)	FF (%)	P ( $\text{W m}^{-2}$ )	$\mu A^* - \mu A$ ( $\text{J mol}^{-1}$ )	$J_{\theta}$ ( $\text{mol s}^{-1} \text{cm}^{-2}$ )	$P_{\theta}$ ( $\text{W m}^{-2}$ )
China loropetala	665	0,84	0,518	62,6	0,27	$1,297 \times 10^5$	$3,355 \times 10^{-6}$	0,44
Perilla	665	1,36	0,522	69,6	0,50	$1,297 \times 10^5$	$5,474 \times 10^{-6}$	0,71
Herba artemisiae scopariaea	669	1,03	0,484	68,5	0,34	$1,261 \times 10^5$	$3,952 \times 10^{-6}$	0,50

Observa-se que as diferenças entre os valores da potência elétrica mostrados na Tab. 2, têm como uma das causas o fato de que na construção do modelo optou-se por estimar um produto velocidade da reação ( $J$ ) e fração da luz absorvida para a fonte de radiação policromática ( $\theta$ ) em função dos parâmetros elétricos  $V_{ca}$  e  $I_{cc}$ . De forma a adequar o modelo aos valores experimentais, posteriormente uma equação química para estimar  $J$  em função da concentração do corante com o auxílio da cinética química poderá determinada e com auxílio da termodinâmica aplicada à radiação uma equação para estimar  $\theta$  também poderá ser encontrada. De fato, tendo-se  $J$  e  $\theta$  independentes dos parâmetros elétricos permitirá ao modelo maior flexibilidade para avaliação via sistema reacional de como as reações fotoquímicas em uma célula de Grätzel são influenciadas pelas condições de operação e por consequência a eficiência da própria célula.

O modelo de potencial químico permite o entendimento de fatores que afetam a eficiência de conversão da célula de Grätzel. Entretanto, no processo de conversão da energia solar em energia elétrica deve-se considerar além da influência da radiação policromática e da velocidade outros fatores. A influência da espessura camada e o tipo de corante, bem como as demais camadas que compõem a célula de Grätzel são fatores que posteriormente serão incluídos no modelo para torná-lo mais representativo.

### 3. CONCLUSÃO

O benefício resultante do desenvolvimento do modelo é o entendimento obtido sobre os fatores que influenciam o sistema físico sem a necessidade de ter que construir a célula de Grätzel. O posterior aperfeiçoamento do modelo a partir da análise através de várias condições, por exemplo, espessura da camada de corante e demais camadas na célula de Grätzel permitirá espelhar adequadamente o comportamento destas células. De forma que, conseguindo-se um modelo representativo o aperfeiçoamento do modelo implicará também no aperfeiçoamento da célula de Grätzel.

O estudo dos fatores que influenciam a eficiência de conversão de energia solar nas células de Grätzel auxiliado por um modelo representativo permite o desenvolvimento de células de Grätzel mais eficientes e de menor custo para aplicação em escala industrial. A vantagem do uso de um modelo representativo possibilita testar diversas condições tanto do sistema físico quanto das condições ambientais durante o processo de conversão de energia solar, pois atualmente isso é economicamente inviável.

### **Agradecimentos**

Os autores agradem a Valdi de Matos de Almeida Junior e Juliana Arruda Lima do Departamento de Engenharia Mecânica e de Produção da Universidade Federal do Ceará e, também a Fundação Cearense de Apoio ao Desenvolvimento Científico e Tecnológico (FUNCAP) e a Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES).

### **REFERÊNCIAS**

- Chang, H., Wu, H.M., Chen, T.L., Huang, K.D., Jwo, C.S. & Lo, Y.J., 2010. Dye-sensitized solar cell using natural dyes extracted from spinach and ipomoea, *Journal of Alloys and Compounds* (495), pp. 606–610.
- Duffie, J.A., Beckman, W.A., 2006. *Solar engineering of thermal processes*, John Wiley & Sons.
- Grätzel, M., Moser, J.E., 2001. *Solar Energy Conversion*. In: Balzani, Vincenzo. *Electron Transfer in Chemistry*, vol. 5, Wiley-Vch Verlag GmbH, pp. 589-595.
- Grätzel, M., 2003. Dye-sensitized solar cells, *Journal of Photochemistry and Photobiology C: Photochemistry Reviews* (3), pp. 145-153.
- Job, G., Herrmann, F., 2006. Chemical potential-a quantity in search of recognition, *European Journal of Physics* (27), pp. 353-371.
- Quaschnig, V., 2007. *Understanding Renewable Energy Systems*, Ed. Earthscan.
- Smith, J.M., Van Ness, H.C. & Abbott, M.M., 2007. *Introdução à Termodinâmica da Engenharia Química*, LCT-Livros Técnicos e Científicos Editora S.A.
- Zhou, H., Wu, L., Gao, Y. & Ma, T., 2011. Dye-sensitized solar cells using 20 natural dyes as sensitizers, *Journal of Photochemistry and Photobiology A: Chemistry* (219), pp. 188–194.

## **CELL GRÄTZEL: SOLAR ENERGY TO ELECTRICITY BY CHEMICAL POTENTIAL MODEL**

**Abstract.** *This paper presents the theoretical model to estimate the electric power of solar cells dye-sensitized Grätzel, through the chemical power. The model is the concatenation of ideas present in models of chemical potential and chemical power. The first is used to estimate the efficiency of capture of radiant energy emitted by the sun or an artificial source, a surface photo-excitabile generic. The second is used to estimate the power chemistry in fuel cell, known chemical potential of the reactants and products. From the analysis of the two models has a third which is directed to the cell and Grätzel it possible to estimate the chemistry power and therefore electric power, it as a function of solar parameters: solid angle, temperature source, radiation wavelength and temperature of the cell surface. The photosensitive dye in cell Grätzel is responsible for the generation of electrons and the semiconductor electron transport, provided that the dye layer is the surface of absorption of incident light is used. The electrical power estimated for the Grätzel cell is based on thermodynamic principles applied to the photochemical reaction in the dye and allows the understanding of some limitations in the process of conversion of solar energy in this cell type.*

**Key words:** *Solar Energy, Grätzel Cell, Chemistry Power, Electric Power*