

PREPARAÇÃO E ESTUDOS DE COMPÓSITOS POLIMÉRICOS HÍBRIDOS BASEADOS EM NANOESTRUTURAS DE TITANATO

Anderson Gomes Vieira (Bolsista – PIBIC/UFPI), Bartolomeu Cruz Viana Neto (Orientador, Depto de Física – UFPI), Maria Letícia Vega (Co-orientadora, Depto de Física), Angel Alberto Hidalgo (Colaborador, Depto de Física) e José Milton Elias de Matos (Colaborador, Depto de Química)

1. Introdução

Polímeros são moléculas longas cuja estrutura é resultado do processo de polimerização de unidades estruturais menores e idênticas chamadas monômeros. Estes são, geralmente, denominados semicondutores orgânicos com um grande potencial de aplicação tecnológica. O Poly (2-methoxy-5-(2'-ethyl-hexyloxy)-1,4-phenylene vinylene), o MEH-PPV, derivado do PPV, é um dos polímeros mais aplicados na indústria de dispositivos eletrônicos devido as suas propriedades semicondutoras e boa solubilidade em solventes orgânicos. O óxido de titânio (TiO_2) e seus derivados são materiais semicondutores inorgânicos dos mais utilizados para aplicações relacionadas à conversões de energia solar. Porém, suas aplicações são fortemente dependentes da estrutura cristalográfica, morfológica e do tamanho das partículas [1]. No presente trabalho abordaremos o estudo das características estruturais, ópticas e elétricas de dispositivos fotovoltaicos com camada ativa formada por filme fino de MEH-PPV + nanotubos de titanato de sódio (nanoestruturas derivadas do TiO_2) [2].

2. Procedimentos Experimentais

Foram feitas várias soluções com diferentes concentrações contendo polímero (MEH-PPV) juntamente com as nanoestruturas (NTTiO_2). As soluções foram feitas utilizando o solvente orgânico, Clorobenzeno. Para a obtenção dos filmes finos de MEH-PPV + NTTiO_2 , usamos a técnica “spin-coating” que resume-se em depositar gotas de solução inicial do polímero sobre um substrato que apresenta um movimento de rotação. Esta técnica é um dos processos mais bem sucedidos na produção de filmes finos uniformes. Utilizando um rotor (spinner) para substrato os filmes poliméricos da ordem de 100 a 200 nm podem ser obtidos com alto grau de uniformidade e homogeneidade, através do controle de aceleração e velocidade angular (ω). Entretanto esta técnica depende de fatores tais como: volatilidade do solvente, viscosidade e concentração do solvente-soluto, tempo e velocidade angular de rotação. A produção dos filmes é feita pelo gotejamento em excesso de material no centro do substrato que colocado a girar com velocidade angular e tempo de rotação pré-definidos.

3. Resultados e Discussão

O espectro de absorção no UV-Vis indica que há um aumento na distribuição de conformação dos cromóforos levando a uma distribuição larga de tamanhos de segmentos conjugados que podem absorver em diferentes comprimentos de onda. O alargamento não foi devido ao solvente já que o filme estava completamente seco. Na espectroscopia de fotoluminescência, a titulação de NTTi na solução de MEH-PPV, mostrou claramente a supressão da fotoluminescência, indicando a existência de transferência de energia entre o

polímero e as nanopartículas, possivelmente através da transferência de elétrons. A banda que representa a transição puramente eletrônica em ~565 nm (banda vibrônica 0-0) não muda com a adição do NTTi mais a intensidade da banda 0-1 (~612nm) apresenta uma pequena diminuição na intensidade a medida que se aumenta a concentração de nanotubos.

No espectro FT-Raman da mistura do MEH-PPV + NTTi não foi possível observar a presença das nanopartículas na mistura, pois suas bandas mais intensas estão próximas a 280 e 450 cm^{-1} , então encobertas pelo sinal do vidro BK7. Não se observou mudanças em suas bandas vibracionais, se comparado com o espectro FT-Raman do MEH-PPV puro. Isto indica que a interação entre os nanotubos de titanato e o polímero MEH-PPV é de natureza fraca, ou seja, eletrostática. o espectro de FTIR para o filme fino do polímero conjugado MEH-PPV e do compósito MEH-PPV/Na-NTTiO2 sobre substrato. Não foi observado a presença do espectro característico do NTTi devido ao sinal do MEH-PPV e do vidro serem bem mais intensos do que os dos nanotubos de titanato. Porém observamos alguns deslocamentos no espectro característico do MEH-PPV, na região entre 1500 e 1700 cm^{-1} , que pode caracterizar uma transferência de carga dos nanotubos para o polímero e encurtamento de algumas ligações que provoca um aumento da energia das mesmas.

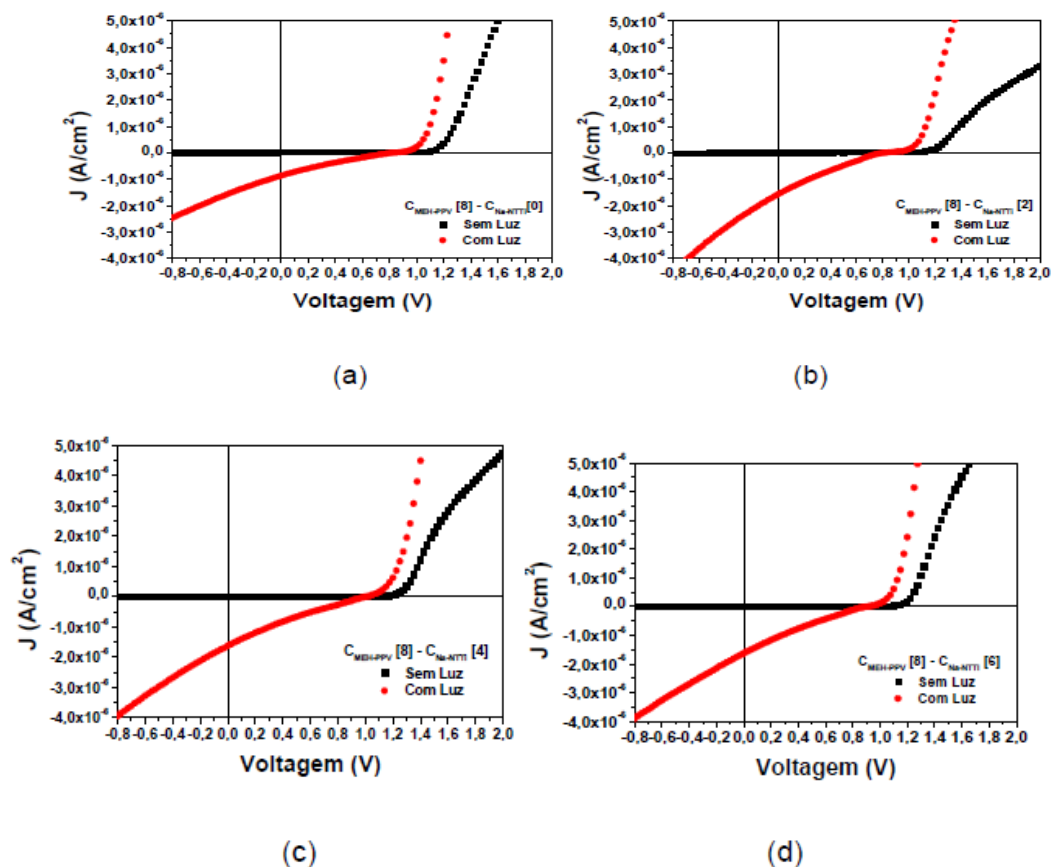


Figura 1: Curva JxV para os dispositivos sob iluminação e no escuro nas concentrações especificadas.

Na Figura 1 observamos um provável aumento de tensão de circuito aberto. Os deslocamentos observados nos gráficos no escuro e sob iluminação se devem ao aumento da tensão de circuito aberto devido a maior produção de éxcitons no filme fino de MEH-PPV + NTTi sob luz. Observamos que todos os parâmetros (tensão de circuito aberto - V_{oc} , corrente de curto circuito - J_{sc} e fator de preenchimento - FF) que caracterizam os dispositivos melhoram consideravelmente com a adição de nanotubos de titanato, no entanto as concentrações de 20% e 33% são as que apresentaram melhores resultados, sendo que o FF é maior para 20% e características como V_{oc} e J_{sc} são melhores para 33%.

4. Conclusão

O espectro de absorção no UV-Vis do compósito apresenta uma única banda característica das transições dos estados delocalizados dos segmentos conjugados. A insignificante variação do espectro nos indica que mesmo que os nanotubos interagindo com o polímero, como é observado nas medidas elétricas, ele não afeta as transições eletrônicas do polímero. A fotoluminescência mostrou que o compósito continua emitindo na região do visível, com uma banda que representa a transição puramente eletrônica em ~565 nm (banda vibrônica 0-0) não muda com a adição do NTTi mais a intensidade da banda 0-1 (~612nm) apresenta uma pequena diminuição na intensidade a medida que se aumenta a concentração de nanotubos. Todos os parâmetros que caracterizam os dispositivos melhoram consideravelmente com a adição de nanotubos de titanato, no entanto as concentrações de 20% e 33% são as que apresentaram melhores resultados, sendo que o FF é maior para 20% e características como V_{oc} e J_{sc} são melhores para 33%

5. Referências Bibliográficas

- [1] Nogueira, S. L. *Estudos das Propriedades Ópticas, Estruturais e Elétricas do Compósito MEH-PPV/SWNT*. Dissertação (Mestrado em Física) – Universidade Federal de Uberlândia, 2008.
- [2] Neto, B. C. V. *Propriedades Estruturais e Vibracionais de Nanotubos e Nanofitas de Titanato*. Tese de Doutorado, Universidade Federal do Ceará, UFC, 2009.

Palavras-chave: Polímeros. Nanotubos. Filmes finos.