

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

*João Victor Barbosa Moura (Bolsista - PIBIC/UFPI), Bartolomeu Cruz Viana Neto (Orientador, Depto de Física – UFPI), Angel Alberto Hidalgo (Co-orientador, Depto de Física-UFPI), Cleânio da Luz Lima (Colaborador, Depto de Física-UFPI)*

## 1. Introdução

A razão dos polímeros terem se tornado tão relevantes advém da maleabilidade de suas propriedades ópticas, elétricas e mecânicas. Uma simples modificação estrutural transforma o polímero em um material com propriedades bastante diferentes, tornando-o útil para uma faixa ampla de aplicações [1]. O Poly(2-methoxy-5-(2'-ethyl-hexyloxy)-1,4-phenylene vinylene), o MEH-PPV, é um dos polímeros mais estudados como dispositivos eletrônicos, apresentando boa solubilidade em solventes orgânicos. O MEH-PPV vem sendo bastante estudado devido às suas propriedades elétricas e ópticas semicondutoras. Apresenta grande mobilidade em comparação a outros polímeros conjugados, resultando numa grande densidade de corrente, sendo assim um ótimo material para construção de dispositivos fotovoltaicos [2].

O óxido de titânio ( $\text{TiO}_2$ ) é um dos semicondutores mais utilizados para aplicações relacionadas à conversões de energia solar. Nanotubos baseados em  $\text{TiO}_2$ , particularmente os de titanatos, tem recebido uma grande atenção, pois tais nanomateriais possuem uma grande área superficial levando a um grande número de aplicações nas áreas que envolvem fenômenos superficiais. A maioria das estruturas baseadas em  $\text{TiO}_2$ , possuem absorção luminosa na região do ultra-violeta, impossibilitando sua utilização como fotocatalisador para luz visível. Para isto a troca iônica do sódio formado nos nanotubos de titanato por metais que absorvam luz visível, vem possibilitando a fotocatalise com luz visível. Conseguindo assim, um semicondutor ajustado à absorção no visível [3,4].

Neste trabalho tivemos o objetivo de sintetizar e caracterizar experimentalmente compósitos de filmes finos poliméricos híbridos, nanotubos de titanato trocados iônica e (Ce-NTi) + polímero (MEH-PPV), com a intenção de uma possível melhora nas características físicas dos dispositivos em relação aos polímeros puros. Gerando assim, o desenvolvimento de dispositivos fotovoltaicos combinando materiais orgânicos e inorgânicos de custo relativamente baixo.

## 2. Procedimentos experimentais

Devido à morfologia do dispositivo tipo sanduíche, para não ocorrer curto-circuito entre os eletrodos durante a etapa de estabelecimento de contato externo, realizou-se a decapagem do substrato de vidro recoberto com uma fina camada de ITO deixando apenas 1/3 recoberta.

As limpezas dos substratos de vidro foram feitas através do método de hidrofilição usando a parte básica (hidróxido de amônio e peróxido de hidrogênio).

Foram feitas várias soluções com diferentes concentrações contendo polímero (MEH-PPV) juntamente com as nanoestruturas trocadas iônica e (Ce-NTi). As soluções foram preparadas utilizando o solvente orgânico, clorobenzeno.

Para obtenção dos filmes finos de MEH-PPV + Ce-NTi, usamos a técnica "spin-coating". A estrutura do dispositivo ficou do tipo ITO/ PEDOT:PPS/ MEH-PPV + Ce-NTi/ Al.

### 3. Resultados e Discussões

No espectro de infravermelho foi possível observar mudanças estruturais significativas. Pode-se observar no espectro que os picos situados em  $1464\text{ cm}^{-1}$  e em  $1506\text{ cm}^{-1}$  ficam deformados (dividem-se em dois) nas concentrações 8:1 e 8:2, com isso temos que os nanotubos modificados por troca iônica interagiram com o MEH-PPV, que pode caracterizar uma suposta transferência de carga entre o MEH-PPV e o Ce-NTi. Conseguimos identificar picos que representam vibrações do Ce-NTi, como pode ser observado o pico em  $910\text{ cm}^{-1}$  que é característico dessas estruturas de titanato.

No espectro Raman do compósito não se observou mudanças nas suas bandas, se comparado com o espectro Raman do MEH-PPV puro.

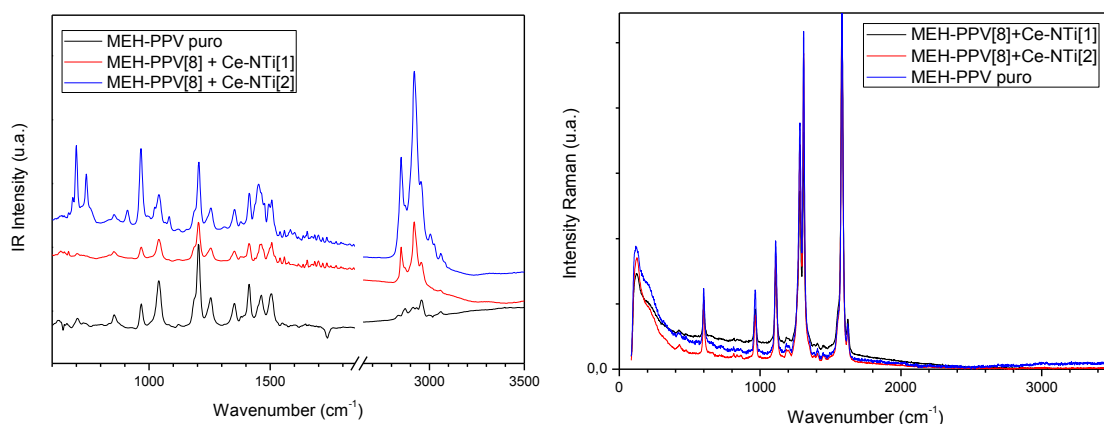
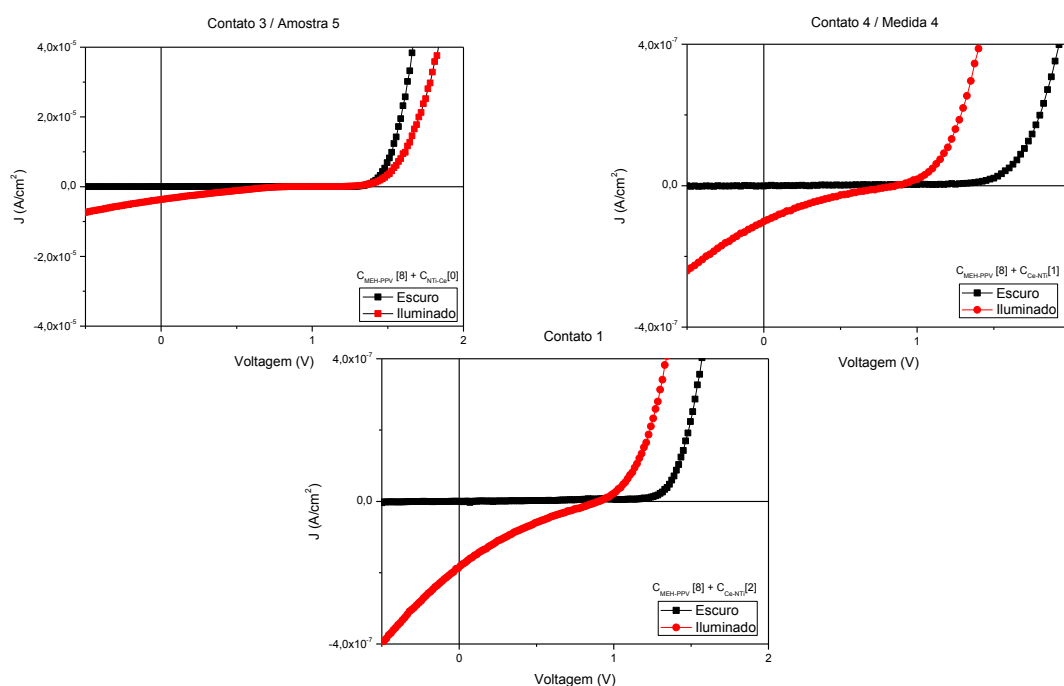


Figura 1. Espectros de infravermelho e Raman do compósito em diferentes concentrações.

Com a análise das curvas  $J \times V$  observamos que alguns parâmetros que caracterizam os dispositivos melhoram em alguns aspectos com a adição dos nanotubos, sendo que o fator de preenchimento (FF) é maior para a concentração 8:2 e as características como tensão de circuito aberto ( $V_{OC}$ ) e corrente de curto-circuito ( $J_{SC}$ ) são melhores para o dispositivo obtido através do polímero puro 8:0. Observando os valores de resistência em série ( $R_S$ ) e paralela ( $R_P$ ) vemos valores muito altos em todas as amostras (da ordem de  $\text{M}\Omega/\text{cm}^2$ ).



*Figura 2. Curva J x V para os dispositivos sob iluminação e no escuro nas concentrações especificadas.*

#### **4. Conclusão**

Neste trabalho, foram estudadas as propriedades ópticas e elétricas do compósito MEH-PPV/Ce-NTi com o intuito de ver o potencial uso como camada ativa em células fotovoltaicas. Para tanto estudamos a interação dos nanotubos com o polímero conjugado analisando o compósito em solução e na forma de filmes finos obtidos pela técnica de spin-coating. O espectro de infravermelho trouxe informações no que diz respeito interação entre polímero e nanotubo modificado por troca iônica, que pode caracterizar transferência de carga entre o MEH-PPV e o Ce-NTi. No espectro Raman não se observa mudança nos picos quando comparados com o espectro do MEH-PPV puro. As propriedades elétricas através de medidas JxV no claro e no escuro nos deram resultados satisfatórios. No entanto podemos observar que os altos valores das resistências em série ( $R_s$ ) podem estar ligados com baixas mobilidades das cargas. Uma possibilidade é que a presença dos nanotubos provoca a separação de cargas (dissociação do éxciton), no entanto estas cargas apresentam baixa mobilidade, ficando presas em armadilhas. Porém uma possibilidade de diminuir as resistências em série dos dispositivos é diminuir a área ativa dos mesmos sendo que a condição para obter bons filmes é que  $R_s < 0,5/\text{Área}$ .

#### **5. Apoio**

UFPI, FAPEPI, INEO, Grupo de polímeros Bernhard Gross – IF São Carlos – USP.

#### **6. 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] HUNG, L.S.; C.H. CHEN. Recent progress of molecular organic electroluminescent materials and devices. *Materials Science and Engineering*, p. 143, 2002.
- [3] SUN, X. M.; LI, Y. D. Synthesis and characterization of ion-exchangeable titanate nanotube. *Chemistry-A European Journal*, v. 9, n.10, p. 2229-2238, 2003.
- [4] VIANA, B. C. et AL. Decorating Titanate Nanotubes with CeO<sub>2</sub> Nanoparticles. *J. Phys. Chem. C*, 113, p. 20234-20239, 2009.

**Palavras-chave:** MEH-PPV, Nanotubos de Titanato, Dispositivos fotovoltaicos.