

Investigação da Orientação Molecular e da Dinâmica de Transferência de Carga da Blenda PTB7-Th:ITIC

Wilken A. Misael¹ (PG), Luana Cristina Wouk de Menezes² (PQ), Lucimara Stolz Roman² (PQ), Maria Luiza M. Rocco¹(PQ)*

¹Instituto de Química – Universidade Federal do Rio de Janeiro – Av. Athos da Silveira Ramos, 149 Cidade Universitária–Rio de Janeiro, RJ - Brasil

²Departamento de Física– Universidade Federal do Paraná – Avenida Coronel Francisco H. dos Santos, 100 – Jardim das Américas - Curitiba, PR – Brasil

*luiza@iq.ufrj.br

Palavras Chave: Espectroscopia de Fotoabsorção, Espectroscopia Auger ressonante, Método Core-Hole Clock, Polímeros, Células Solares Orgânicas, Química Verde.

Introdução

Em comparação com células fotovoltaicas baseadas em compostos inorgânicos, as células orgânicas possuem vantagens, como baixo custo de processamento, são flexíveis e mais leves.¹

Uma das desvantagens da utilização destas células está no poder de rendimento de conversão, cujos valores (~13%) ainda estão abaixo das células baseadas em compostos inorgânicos (>20%).²

Ao se obter informação sobre como os componentes destes se organizam e como ocorrem os processos de transferência de carga é possível melhorar os valores de conversão de luz em energia, e assim aumentar a aplicabilidade destes sistemas. Assim, diversas técnicas espectroscópicas são ferramentas-chave nesse tipo de desenvolvimento.¹

Contudo, outra contraposição no uso dessas células se apresenta no atual modo de processamento, que utiliza solventes aromáticos e/ou halogenados, compostos altamente tóxicos, carcinogênicos e altamente poluentes.³

Dentro de um panorama de crise em diversas questões ambientais, nos últimos anos, parte da literatura se dedicou a busca de solventes menos agressivos. Bons resultados vêm sendo obtidos, como no aumento de poder de eficiência do filme PffBT4T-C9C13:PC71BM de 6,4% para 11,7% se usado um solvente não halogenado.³

Como continuidade dessa busca, o estudo da blenda PTB7-Th:ITIC, conhecida por sua eficiência⁴, em diferentes solventes e sob diferentes processamentos é mais um passo no desenvolvimento desse objeto de estudo, para que futuramente estas células solares possam ser implementadas em larga escala e sem afetar o meio ambiente.

Resultados e Discussão

Utilizando a linha SXS do Laboratório Nacional de Luz Síncrotron (LNLS), medidas utilizando as Espectroscopias NEXAFS e RAS na região da

borda K do enxofre (2471,7 eV) foram feitas para se conhecer a morfologia do sistema, e a partir do método *Core-Hole Clock* o tempo de transferência de carga do sistema de estudo avaliado com dois solventes – anisol e *o*-diclorobenzeno (*o*-DCB), a diferentes temperaturas.

Os resultados de NEXAFS para ambas as amostras estão de acordo com a literatura⁴ e mostram uma estrutura organizada e com direção preferencial de absorção: normal à superfície do substrato. Os resultados da Espectroscopia Auger ressonante são apresentados na Tabela 1.

Tabela 1. Valores de tempo de transferência de carga (fs) para a principal ressonância no espectro na borda K do enxofre (2471,7 eV).

	Anisol	<i>o</i> -DCB
25°C	3,27	4,22
100°C	4,52	2,99
200°C	3,02	2,66

Conclusões

A substituição do *o*-DCB pelo anisol possui valores de transferência de carga próximos, mostrando que a substituição de solvente halogenado pelo solvente verde não provoca nenhuma alteração considerável na transferência de carga.

Agradecimentos

CAPES, CNPq, FAPERJ, LNLS.

¹Rand, B. P.; Richter, H. *Organic Solar Cells: fundamentals, devices, and upscaling*. Pan Stanford, **2014**.

²Polman, A. et al. Photovoltaic materials: Present efficiencies and future challenges. *Science*, v. 352, n. 6283, **2016**, p. aad4424.

³Zhao, J. et al, *Nature Energy*, **2016**, *1*, p. 1-7.

⁴Lin, Y. et al, *Advanced Materials*, **2015**, *27*, p. 1170-1174.