

Análise da superfície de filmes finos de semicondutores orgânicos para aplicações em dispositivos fotovoltaicos

Beatriz M. Guerra^{1*} (PG), Clara M. da S. Almeida² (PQ), Joyce R. de Araújo² (PQ), Rogério Valaski² (PQ), Roberto Jakomin¹ (PQ), Maria Luiza M. Rocco¹ (PQ)

*biaguerra@pos.iq.ufrj.br

¹Universidade Federal do Rio de Janeiro, ²Instituto Nacional de Metrologia, Qualidade e Tecnologia

Palavras Chave: Semicondutores orgânicos, células solares, non-fullerene small molecules, spin coating, XPS, AFM.

Introdução

As células solares orgânicas se destacam como uma alternativa de energia limpa por serem feitas com materiais leves e baratos, podendo ser flexíveis e com cores e dimensões variadas. Contudo, sua eficiência e tempo de vida são menores que os de células inorgânicas¹. Apesar disso, sua eficiência em laboratório teve um aumento significativo na última década graças à síntese de *non-fullerene small molecules (NFSM)*, dentre outros fatores. As NFSM são moléculas orgânicas poliaromáticas, policonjugadas e com cerca de 150 átomos que podem ser moldadas para funcionar tanto como doadores ou aceptores de elétrons na camada ativa da célula². Neste trabalho, foi feita uma análise de superfície comparando a morfologia de filmes feitos com o polímero doador PBDB-T e com NFSM (ITIC e o-IDTBR) ou com PC₇₁BM, derivado de fulereno muito utilizado anteriormente, como aceptores.

Resultados e Discussão

Os filmes finos foram confeccionados por *spin coating* e em seguida tratados termicamente. As amostras foram estudadas por Espectroscopia de Fotoelétrons de Raios X (XPS) e Microscopia de Força Atômica (AFM). Na Tabela 1, comparam-se as porcentagens elementares experimentais quantificadas pelos espectros *survey* de XPS com o valor teórico, considerando as proporções dos componentes da solução que foi depositada sobre o *spin coater*. Esses valores referem-se a elementos que estão presentes apenas em uma das moléculas da blenda. Cada amostra foi identificada de acordo com o seu aceptor, acrescida do sufixo “-f” para diferenciá-las do composto puro.

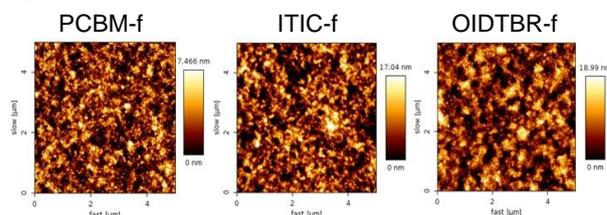
Tabela 1. Comparação dos elementos diferenciais.

Amostra	Elemento diferencial	% elementar experimental	% elementar teórica
ITIC-f	N (aceptor)	1,39	2,02
OIDTBR-f	N (aceptor)	1,44	3,27
PCBM-f	S (doador)	9,41	11,61

As amostras apresentaram comportamento antagônico de acordo com a natureza do seu

aceptor. Tanto o ITIC-f quanto o OIDTBR-f possuem menor quantidade de nitrogênio do que o teórico. Uma vez que as moléculas de origem desse elemento são os aceptores, temos que a superfície está mais rica no polímero doador. No caso do PCBM-f, o enxofre está presente apenas no doador. Como esse elemento possui menor valor experimental que o teórico, temos menos doador na superfície e mais aceptor. Tal comportamento também foi verificado no AFM. A média da RMS para a amostra PCBM-f foi $1,71 \pm 0,07$ nm, valor bem menor do que o medido para o ITIC-f e para o OIDTBR-f, $3,9 \pm 0,2$ nm e $4,3 \pm 0,3$ nm, respectivamente. Na Figura 1, nota-se um aspecto mais granular e uniforme no PCBM-f, enquanto os demais com as NFSM exibem um aspecto mais contorcido e rugoso, que advém do envelhecimento da maior quantidade do doador na superfície.

Figura 1. AFM das amostras.



Conclusões

Devido às topologias, o PC₇₁BM tende a se depositar com maior concentração na superfície, enquanto as NFSM se concentram no *bulk* do material. Esses dados, junto com uma maior RMS, podem indicar uma segregação de fases que prejudica a eficiência da camada ativa e requer uma maior investigação do seu perfil de profundidade.

Agradecimentos

Ao INMETRO pelas instalações laboratoriais, à CAPES pela bolsa de estudo e à FAPERJ (Edital: E_12/2021 – Apoio a projetos científicos e tecnológicos em Geração e Armazenamento de Energia – 2021) pelo financiamento do projeto.

¹Bronstein, H *et al.* *Nat. Rev. Chem.* 2020, 4, 66-77.

²Letcher, T. M.; Fthenakis, V. M. 1 ed^a. London: Academic Press, 2018. p. 255-277.