

Modificação estrutural de nanotubos de carbono de parede simples com derivado de tiofeno e sua aplicação em células solares orgânicas

Bruno S. Lomba (PG)^{1*}, Mauro A. Soto-Oviedo¹ (PQ), Paulo Meira¹ (PQ), Carlos Roque D. Correia¹ (PQ), Clascídia A. Furtado² (PQ) e Ana F. Nogueira (PQ)¹ E-mail: blomba@iqm.unicamp.br

¹ Laboratório de Nanotecnologia e Energia Solar - Instituto de Química – Universidade Estadual de Campinas – UNICAMP, CEP 13084-971, CP 6154, Campinas-SP. ² Centro de Desenvolvimento da Tecnologia Nuclear, Campus UFMG, CEP 31270-901, Belo Horizonte-MG.

Palavras Chave: SWNT, Poli(3-octiltiofeno), dispositivos fotovoltaico.

Introdução

A dissolução de SWNT (nanotubos de carbono de paredes simples) e sua compatibilidade com diferentes matrizes poliméricas são muito importantes para a aplicação desses materiais nas diversas áreas tecnológicas. Modificações químicas nas paredes exteriores, interiores e nas extremidades dos SWNT têm um papel fundamental nas propriedades mecânicas e eletrônicas dos materiais. O efeito fotovoltaico em células solares baseadas em polímeros intrinsecamente condutores (PIC) pode ser significativamente aumentado com a introdução de SWNT¹, devido à introdução de junções polímero-nanotubo. O campo elétrico estabelecido nesta junção promove a dissociação do éxciton, formado no polímero, transferindo o elétron para o nanotubo de carbono.

O presente trabalho apresenta a modificação estrutural de SWNT com 2-2'-tieniletanol (SWNT-TIOF) e sua aplicação com um derivado de tiofeno, o poli(3-octiltiofeno) (POT), na confecção de uma célula solar de heterojunção dispersa.

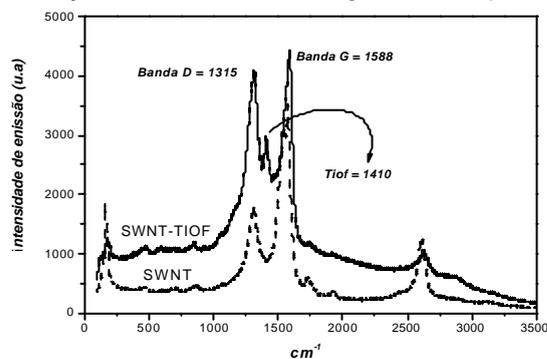
Resultados e Discussão

A modificação do SWNT foi realizada primeiramente através da introdução de grupos COOH ao nanotubo de carbono pela reação com HNO₃/H₂SO₄ (50/50 v/v) sob agitação por 2 horas. Em seguida, o SWNT-COOH foi tratado com cloreto de tionila, originando o cloreto ácido que em seguida sofreu reação de esterificação com o derivado de tiofeno, 2-2'-tieniletanol. O produto foi então lavado com água para remoção do tiofeno em excesso e seco sob atmosfera à vácuo. O SWNT-TIOF foi então caracterizado através de medidas de espectroscopia na região UV-Vis, Infravermelho, Raman e fluorescência.

Através da análise dos espectros Raman (Figura 1), o SWNT apresenta um diâmetro de ~1,40 nm e suas principais bandas são o modo de respiração radial, em torno de 160 cm⁻¹, banda D em 1309 cm⁻¹, banda G (grafítica) em 1575 cm⁻¹ e a banda G' próxima a 2630 cm⁻¹. A modificação nas paredes do nanotubo

com o derivado de tiofeno causa uma quebra das ligações π , acarretando em um aumento na desordem estrutural do SWNT e, portanto, um aumento da intensidade da Banda D relativa à Banda G. A presença do grupo tiofenico foi confirmada pelo aparecimento de uma banda em 1410 cm⁻¹, referente ao estiramento C=C do anel tiofênico do 2-2'-tieniletanol, e pelo efeito hipercromico da banda D com relação a banda G, indicando o aumento do grau de desordem do nanotubo após-modificação.

Os dispositivos fotovoltaicos utilizando o nanocompósito SWNT-TIOF/POT apresentaram uma corrente de curto circuito (I_{sc}) de 0,65 μ A/cm². Esse valor é muito superior ao valor de I_{sc} do dispositivo baseado em POT puro (I_{sc} = 0,05 μ A/cm²). A maior eficiência para a célula de heterojunção polímero-nanotubo ocorre devido a presença de junções SWNT-TIOF/POT, que agem como centros de dissociação dos éxcitons foto gerados no polímero,



aumentando assim a geração de portadores de carga na célula.²

Fig. 1. Espectros Raman do SWNT e SWNT-TIOF.

Conclusões

Os resultados mostram que a presença de SWNT modificado em compósitos com polímeros condutores, nesse caso, o poli(3-octiltiofeno), aumenta a geração de portadores em células fotovoltaicas orgânicas de heterojunção dispersa.

Agradecimentos

A FAPESP, CNPq e CAPES pelo apoio financeiro.

¹ Valentini, L.; Armentano, I.; Biagiotti, J.; Marigo, A.; Santucci, S.; e Kenny, J.M. *Diamond Relat. Mater.* **2004**, 13,.250.

² Kymakis, E.; Amaratunga, A.G.J.; *Appl. Phys. Lett.*, **2002**, 80, 113.