

Funcionalização covalente de nanotubos de carbono para aplicação em camada ativa de células fotovoltaicas orgânicas

Ana Paula P. Alves¹ (PG)*, Hélio Ribeiro (PG)¹, Hállen D. R. Calado¹ (PQ), Glaura G. Silva¹ (PQ)

anappa@ufmg.br

¹ Grupo de Materiais Poliméricos Multicomponentes, Universidade Federal de Minas Gerais, UFMG.

Palavras Chave: nanotubos de carbono, funcionalização covalente, células fotovoltaicas orgânicas.

Introdução

Células solares orgânicas (OPVs) baseadas em nanomateriais de carbono e em polímeros conjugados (PC) tem sido alvo de pesquisas em escala mundial na busca por fontes alternativas de energias renováveis que sejam eficientes. Um fator limitante para a inserção destes dispositivos no mercado é ainda sua baixa eficiência de conversão de energia (~12%)¹ que está relacionada com diversos parâmetros internos das células, como a mobilidade de cargas e a morfologia do material.

Os nanotubos de carbono (NTC) incorporados em uma matriz polimérica podem aumentar a eficiência de uma OPV pelo aumento do transporte de elétrons e minimização da recombinação. Neste trabalho NTC de paredes múltiplas foram funcionalizados com três diferentes grupos amídicos que permitirão em etapa posterior a incorporação direta de monômeros derivados do tiofeno na superfície dos tubos², favorecendo a obtenção "in situ" de nanocompósitos com PC, com aplicação potencial em OPV de eficiência energética ampliada. Os NTC foram caracterizados por FTIR-ATR, termogravimetria (TG/DTG), microscopia eletrônica de transmissão (MET) e varredura (MEV), espectroscopia por emissão de raios X (XPS) e espectroscopia Raman.

Resultados e Discussão

A funcionalização dos NTC constou de 3 etapas. Na etapa 1 os NTC foram oxidados em H₂SO₄:HNO₃ (3:1), obtendo-se o NTC-ox. A etapa 2 envolveu a reação com cloreto de tionila e na etapa final, foi realizada a reação de amidação com 1,3-diaminopropano (amina1), hexametilendiamina (amina2) e tetraetilenopentamina (TEPA), obtendo-se as amostras: NTC-COamina1, NTC-COamina 2 e NTC-COTEPA. Os produtos formados em cada etapa foram caracterizados por Raman e FTIR, figura 1. O espectro Raman dos NTC possui a banda D em 1330 cm⁻¹, a banda G em 1560 cm⁻¹ e banda G' em 2460 cm⁻¹. A razão entre as intensidades das bandas D e G fornece informações sobre o grau de funcionalização de nanotubos³. As razões ID/IG observadas foram de 1,2; 1,7; 1,4; 1,5 e 1,6 para as amostras NTC, NTC-ox; NTC-COamina1, NTC-COamina2 e NTC-COTEPA. A

razão ID/IG em geral aumentou, quando compara-se o NTC e os NTC-modificados, indicando o aumento da presença de grupos ligados covalentemente ao NTC. Nos espectros FTIR-ATR dos NTC aminados foram observados os modos vibracionais da ligação NH (1525, 805 e 620 cm⁻¹), bem como a banda em 1125 cm⁻¹ atribuída ao CN da molécula de TEPA. Foram também identificadas quatro bandas de baixa intensidade atribuídas ao estiramento simétrico e assimétrico da ligação N-H do grupo amida e C-H dos grupos metilenos, figura 1b.

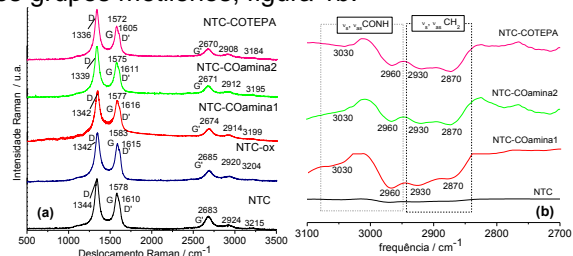


Figura 1. (a) Espectros Raman. Linha 514 nm e (b) Espectros FTIR-ATR para os NTC em estudo.

A análise TG mostrou a presença 7,6% em massa de grupos oxigenados na amostra de NTC-ox. Após a funcionalização com as aminas as percentagens foram de 9,4% (NTC-COamina1), 10,2% (NTC-COamina2) e 9,9% (NTC-COTEPA), Figura 2.

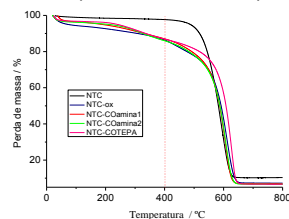


Figura 2. Análise TG dos NTC em estudo.

Conclusões

NTC foram funcionalizados com três diferentes grupos, e as caracterizações indicam que as aminas estão ligadas covalentemente aos NTC.

Agradecimentos

CNPq, Fapemig, PRPq, Centro de Microscopia da UFMG, Petrobras, CTNanotubos

¹ Peach, M. [publicado em 23 Jan 2013, acessado em 01/2014.

Disponível em < <http://optics.org/news/4/1/36>>.

² Shen, J.; et al. *Mat. Sci. Eng. A*. **2007**, 464, 151.

³ Conturbia, G. et al. *J. Nanosci. Nanotechnol.* **2009**, 9, 5850.