



Síntese e caracterização de óxido de zinco utilizando a rota do poliol para aplicação em células solares

RESUMO

Jaqueline Alves Coelho
Jaque_ac@yahoo.com.br
Universidade Tecnológica Federal
do Paraná, Curitiba, Paraná, Brasil

Eduardo Ferreira Barbosa
eduardoferreirab@hotmail.com
Universidade Tecnológica Federal
do Paraná, Curitiba, Paraná, Brasil

Paula Cristina Rodrigues
Paulac_r@yahoo.com.br
Universidade Tecnológica Federal
do Paraná, Curitiba, Paraná, Brasil

Com o aumento da necessidade de obter energia por meios menos poluentes cresceu o estudo direcionado na produção de energia limpa, como por exemplo, em células solares. O óxido de zinco é um exemplo de material que pode ser utilizado para esta aplicação, pois apresenta transparência quando na forma de filmes finos, é atóxico, tem alto *band gap* e apresenta baixo custo. Esse óxido é facilmente sintetizado através de métodos hidrotérmicos, como por exemplo, a rota do poliol. O objetivo desse trabalho foi estudar influência do poliol na morfologia e propriedades espectroscópicas do ZnO. Para isto, foi utilizado no meio reacional etilenoglicol (EG) e polietilenoglicol (PEG). Através da espectroscopia Raman e infravermelho foi possível verificar que o produto obtido foi o óxido de zinco, o qual se encontra passivado pelo poliol. Medidas de fotoluminescência indicam que quando o ZnO é sintetizado na presença do poliol a quantidade de defeitos superficiais é baixa. A análise morfológica, realizada através de microscopia eletrônica de varredura (MEV) e de transmissão (TEM), indicaram que a morfologia apresenta uma grande dependência em relação ao meio reacional. Observou-se a formação de partículas esféricas e na forma de bastões nas sínteses com EG (com adição e sem adição de água, respectivamente) e de poliedros na síntese com PEG.

PALAVRAS-CHAVE: Óxido de zinco, Poliol, síntese hidrotérmica

INTRODUÇÃO

Energia elétrica provida através de combustíveis fósseis vem sendo substituída, com o passar dos anos, por fontes de energia mais sustentável como energia solar. Os dispositivos mais conhecidos e que tem um maior poder de conversão são de silício, porém são rígidos e pesados não podendo ser carregados. Entretanto, com a possibilidade de utilizar polímeros condutores como camada ativa, pode se produzir células solares flexíveis¹.

As células solares poliméricas possuem uma estrutura contendo um metal como catodo, um polímero condutor como camada ativa, uma camada transportadora de elétrons, um ânodo e um substrato transparente². Porém, esse tipo de configuração apresenta algumas desvantagens como a utilização do óxido de estanho e índio (ITO), devido à escassez do índio³ e a utilização de um metal com baixa função trabalho com catodo, pois este pode ser facilmente oxidado pelo ar atmosférico, assim, diminuindo a eficiência do dispositivo⁴.

A utilização de uma estrutura do tipo invertida pode diminuir o efeito da oxidação provocada pelo ar, pois pode utilizar o ITO como cátodo e alumínio como ânodo. Para esta arquitetura também utiliza-se ZnO como camada transportadora de elétrons⁴. O óxido de zinco é um semicondutor do tipo *n* cristalino que possui a estrutura wurtzita como a mais estável. A wurtzita apresenta superfícies polares (apresentando uma superfície terminada em Zn^{2+} e outra em O^{2-}) e apolares, as quais podem ser modificadas via reação química, permitindo controlar o crescimento e a morfologia do material. Uma rota sintética utilizada para o controle de morfologia é a rota do poli-ol. Nesta rota o poli-ol adere na superfície do cristal controlando o tamanho a morfologia do óxido⁶.

METODOLOGIA

O ZnO foi sintetizado de acordo com o procedimento experimental descrito por Chieng e Loo⁷. Na Tabela 1 estão identificadas as amostras de ZnO que foram sintetizadas neste trabalho.

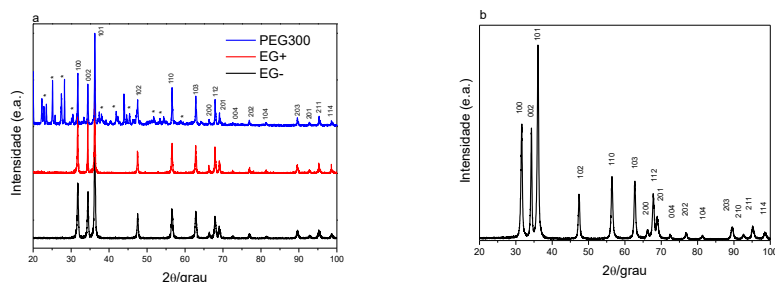
Tabela 1: Código de identificação das amostras.

código	Condição de síntese
EG-	Etilenoglicol sem adição de água
EG+	Etilenoglicol com adição de água (10 mL)
PEG300	Polietilenoglicol 300 sem adição de água
ZnO-b	Síntese com hidróxido de sódio

RESULTADOS E DISCUSSÕES

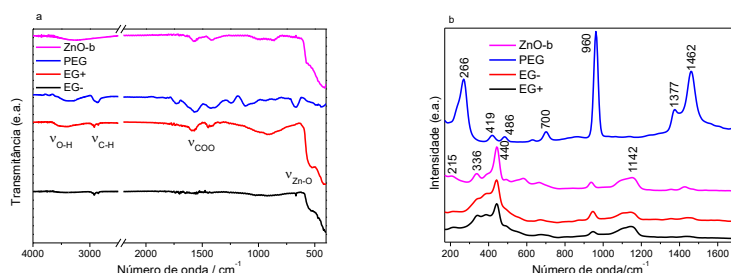
A caracterização cristalográfica da amostras foi realizada através da técnica de difração de Raio-X (Figura1). Observando-se os dados obtidos foi possível comprovar que a amostra sintetizada foi óxido de zinco (ZnO), pois os picos obtidos no difratograma correspondem aos picos descritos pela carta cristalográfica (JCPDS 36-1451).

Figura 11: Difratogramas do óxido sintetizado: a) PEG-300, EG+, EG-; b) ZnO-b .



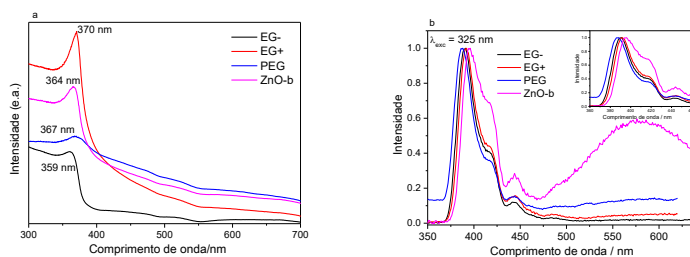
Os dados de IR apresentaram um pico em aproximadamente 450 cm^{-1} correspondente ao estiramento da ligação Zn-O e picos em 3400 cm^{-1} (ligação OH) e em 2800 cm^{-1} (ligação C-H) pertencentes ao poliol. A espectroscopia Raman foi utilizada para analisar a presença de defeitos estruturais. Os picos na região de 440 a 445 cm^{-1} correspondem a presença de ZnO. A presença de um pico em 1453 cm^{-1} indica a presença de acetato livre na superfície e a presença de pico em 581 cm^{-1} na amostra ZnO-b, mostra a existência de vacância de zinco.

Figura 2: Espectros de infravermelho (a) e Raman (b)



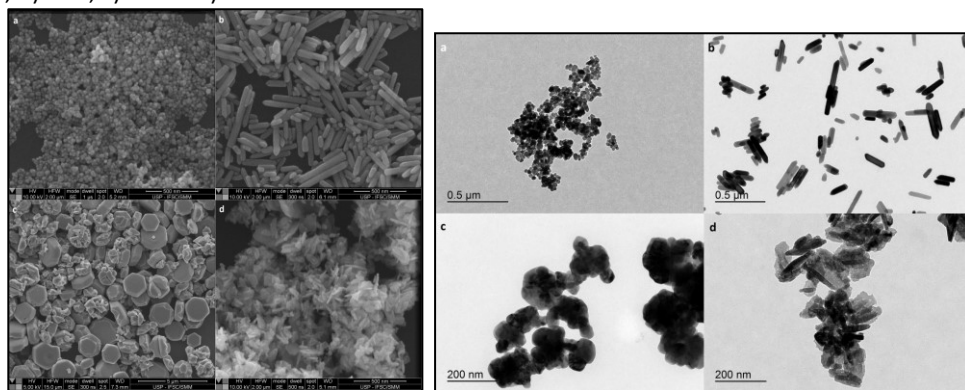
A espectroscopia de ultravioleta e visível (Figura 3 a) apresenta apenas uma banda de absorção ($359\text{--}370\text{ nm}$), a qual corresponde à transição HOMO-LUMO. Na espectroscopia de fotoluminescência (Figura 3 b) é possível analisar que todas as amostras possuem uma transição na região de $385\text{--}395\text{ nm}$ (HOMO-LUMO), um ombro em aproximadamente 417 nm (correspondente a presença de Zn intersticial) e um pico em 440 nm (correspondente a presença de vacâncias de Zn). Somente na amostra ZnO-b houve um aumento de intensidade na região de 475 nm (recombinação de elétrons na V_O).

Figura 3: a) Espectro de UV-Vis b) Espectro de PL



Através do MEV e MET pode-se verificar que com as modificações na síntese ocorreram modificações na morfologia do material. Utilizando apenas EG com solvente foi obtido apenas partículas esféricas e quando adicionado água, ela favoreceu a reação de hidrólise e condensação do precursor, favorecendo o crescimento da partícula e obtendo o ZnO no formato de bastões. Quando utilizado PEG300 como solvente a morfologia obtida foi de hexágonos; já a reação em NaOH causou uma nova mudança na morfologia, observando-se um crescimento irregular das partículas.

Figura 4: Micrografias de varredura e transmissão das amostras sintetizadas, onde: a) EG-, b) EG+, c) PEG e d) ZnO-b



CONCLUSÃO

Conclui-se que é possível sintetizar ZnO utilizando poliol como solvente. A morfologia do óxido está ligada a diretamente com a síntese utilizada e as partículas sintetizadas estão passivadas com poliol e tem presença de acetato.

Synthesis and characterization of zinc oxide using a polyol route for application in solar cells

ABSTRACT

The increase the needs to obtain energy by less polluting means also increased the studies directed at the production of clean energy, as for example in solar cells. Zinc oxide is a material that can be used for this application, because it presents transparency as thin films, non-toxic, has high band gap and presents low cost. This oxide is easily synthesized by hydrothermal methods, for example the polyol route. The objective of this work was to study the influence of polyol on the morphology and spectroscopic properties of ZnO. For this, ethylene glycol (EG) and polyethylene glycol (PEG) were used in the reaction medium. Through Raman and infrared spectroscopy it was possible to verify that the product obtained was the zinc oxide, which is passivated by the polyol. Photoluminescence measurements indicate that when ZnO is synthesized in the presence of the polyol the amount of surface defects is low. The morphological analysis, performed by scanning electron microscopy (SEM) and transmission (TEM), indicated that the morphology shows a great dependence on the reaction medium. Formation of spherical and rod-like particles was observed in the syntheses with EG (with addition and without addition of water, respectively) and polyhedra in PEG synthesis.

KEY WORD: Zinc Oxide, Polyol, Hydrothermal Synthesis

REFERÊNCIAS

1. DECHAN Angmo , SUREN A. Gevorgyan , THUE. T. Larsen-Olsen, ROAR R. Søndergaard, MARKUS Hösel, MIKKEL Jørgensen, RITU Gupta, GIRIDHAR U. Kulkarni e FREDERIK C. Krebs. **Scalability and stability of very thin, roll-to-roll processed, large area, indium-tin-oxide free polymer solar cell modules.** *Organic Electronics* 14 (2013) 984–994.
2. ZHOU, Huaxinmg, YANG, Liqiang, YOU, Wei. **Rational Design of High Performance Conjugated Polymer for Organic Solar Cell.** *Macromolecules*, 2012, 45 (2), pp 607–632].
3. LEI, Po-Hsun, HSU, Chia-Ming e FAN, Yu-Siang. **Flexible organic light-emitting diodes on a polyestersulfone (PES) substrate using Al-doped ZnO anode grown by dual-plasma-enhanced metalorganic deposition system.** *Organic Electronics* 14 (2013) 236–249.
4. HAO, Xia, WANG, Shenghao, FU, Wei, SAKURI, Takeaki, MASUDA, Shigeru, AKIMOTO, Katsuhiko. **Novel cathode buffer layer of Ag-doped bathocuproine for small molecule organic solar cell with inverted structure.** *Organic Electronics* 15 (2014) 1773–1779.
5. LEE, Jung Han, SHIN, Jeong-Ho, SONG, Jae Yong, WANG, Wenfeng, SCHLAF, Rudy, KIM, Kyung Joong, e YI Yeonjin. **Interface Formation Between ZnO Nanorod Arrays and Polymers (PCBM and P3HT) for Organic Solar Cells.** *J. Phys. Chem. C* 2012, 116, 26342–26348.
6. H. Dong, Y.-C. Chen and C. Feldmann. **Polyol synthesis of nanoparticles: status and options regarding metals, oxides, chalcogenides, and non-metal elements.** *Green Chem.*, 2015, 17, 4107.
7. CHIENG, Buong Woei e LOO, Yuet Ying. **Synthesis of ZnO nanoparticles by modified polyol method.** *Materials Letters*. 2012, 73. p. 78-82

Recebido: 31 ago. 2017.

Aprovado: 02 out. 2017.

Como citar:

COELHO, J. A. et al. Síntese e caracterização de óxido de zinco utilizando a rota do poliol para aplicação em células solares . In: SEMINÁRIO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA E TECNOLÓGICA DA UTFPR, 22., 2017, Londrina. **Anais eletrônicos...** Londrina: UTFPR, 2017. Disponível em: <<https://eventos.utfpr.edu.br/sicite/sicite2017/index>>. Acesso em: XXX.

Correspondência:

Jaqueline Alves Coelho

Rua Olho d'Água, 451, Bairro Jardim Ipê, Almirante Tamandaré, Paraná, Brasil.

Direito autoral:

Este resumo expandido está licenciado sob os termos da Licença Creative Commons-Atribuição-Não Comercial 4.0 Internacional.

