

OTIMIZAÇÃO DAS PROPRIEDADES DE TRANSPORTE DE ELÉTRONS EM FILMES FINOS DE Nb_2O_5 PARA APRIMORA A EFICIÊNCIA DE CÉLULAS SOLARES DE PEROVSKITAS

INAIARA L. RODRIGUES¹; RAMON D. CARVALHO¹;
MARIO L. MOREIRA¹; PEDRO L.G. JARDIM¹; SERGIO S. CAVA²

¹Universidade Federal de Pelotas – IFM– inaiaraleite68@gmail.com;
ramondadaltocarvalho@gmail.com;mlucio3001@gmail.com; pedro.lovato@ufpel.edu.br

⁴Universidade Federal de Pelotas-CDTec – sergiocava@gmail.com

1. INTRODUÇÃO

O pentóxido de nióbio (Nb_2O_5), uma das estequiometrias dos óxidos de nióbio, apresenta alta absorção na região ultravioleta, transmitância óptica de 90% na faixa visível e diferentes fases cristalográficas que foram registradas ao longo dos anos (LOPES et al., 2015; NICO et al., 2016). Este óxido é classificado como um semicondutor, com um band gap variando entre 3,1 e 4 eV. Suas notáveis propriedades químicas e físicas desempenham um papel importante em diversas aplicações, por exemplo, em células solares sensibilizadas por corante (DSSC) (VALERIO et al., 2020) e células solares de perovskita (PSC's) (FERNANDES et al., 2019). Este último tem recebido bastante atenção devido à demanda energética e à busca por maior eficiência no campo das energias renováveis (NOH et al., 2018;).

Uma típica célula de PSC segue uma arquitetura regular, composta pelos seguintes componentes: Óxido de Estanho Dopado com Flúor (FTO), camada de transporte de elétrons (ETL), perovskita (camada ativa), camada de transporte de buracos (HTL) e um eletrodo de metal (Valadi et al., 2021). As PSC's têm sido notáveis por atingirem eficiências de conversão de energia (PCE) superiores a 20% em sete anos de pesquisa intensiva (NOH et al., 2018), competindo com células solares de silício comercial (FENG et al., 2017). Apesar dos avanços significativos nas pesquisas em PSC, ainda são necessárias melhorias, especialmente na estabilidade e reprodutibilidade de cada componente da PSC (NOH et al., 2018).

Cada componente da PSC afeta seu desempenho, especialmente a ETL, que atrai os elétrons após a incidência da radiação na perovskita e os direciona para os eletrodos, evitando a recombinação de cargas (NOH et al., 2018; VALADI et al., 2021). Um dos materiais inorgânicos comumente utilizados como ETL em PSC's é o dióxido de titânio (TiO_2), juntamente com outros semicondutores de óxido metálico, como óxido de zinco (ZnO), sulfato de zinco (Zn_2SO_4) e Nb_2O_5 (VALADI et al., 2021).

A utilização de filmes finos de Nb_2O_5 tem mostrado uma influência significativa na PCE, alcançando valores entre 17,2% e 18,59% (WANG et al., 2019), o que evidencia seu potencial como ETL. Explorar o Nb_2O_5 como opção de ETL para PSC's é uma valiosa iniciativa que permite a adoção de estratégias de melhoria, como a modificação da estrutura da ETL, a dopagem com materiais de melhores propriedades ópticas e elétricas, entre outras (NOH et al., 2018).

Diante desse contexto, torna-se imprescindível continuar a investigação das propriedades estruturais e optoeletrônicas do Nb_2O_5 , bem como evidenciar seu potencial no aprimoramento da eficiência em PSC. Este trabalho fornece uma visão sucinta dos estudos recentes que abordam a utilização do Nb_2O_5 como ETL em PSC's, destacando as contribuições desse material para a obtenção de melhores parâmetros fotovoltaicos.

2. METODOLOGIA

Este trabalho é uma pesquisa de natureza qualitativa, seguindo uma abordagem de Análise Documental (MINAYO, 2009; GODOY, 1995). A metodologia busca artigos recentes sobre o uso do Nb_2O_5 como *ETL* em *PSC*'s, focando naqueles que apresentaram melhores resultados nos parâmetros fotovoltaicos (V_{oc} , J_{sc} e FF), influenciando a *PCE*. A pesquisa bibliográfica utilizou o Portal Periódico da CAPES, SciELO e Banco de Dados Scopus, com ênfase em publicações dos últimos 5 anos.

3. RESULTADOS E DISCUSSÃO

O Nb_2O_5 tem se destacado como um material ideal para a *ETL* em *PSC*s devido à sua excelente transmitância óptica, boa mobilidade eletrônica, estabilidade química, entre outros atributos (VALADI et al., 2021), como será apresentado a seguir.

No trabalho de HOSEN et al., (2023), os autores utilizaram o software de simulação SCAPS-1D para modelar e analisar as características do dispositivo de perovskita, com o objetivo de melhorar o desempenho da *PSC* à base de FASnI_3 , encontrando uma *ELT* mais eficiente. Foram introduzidos diferentes *ETL*'s, como Nb_2O_5 , TiO_2 , ZnO e GaN , para uma análise comparativa dos parâmetros fotovoltaicos. A arquitetura invertida (*ITO/HTL/Perovskita/ETL/Ag*) proposta para a *PSC* foi avaliada por meio da variação da espessura e dopagem do *ETL* e absorvedor, considerando também defeitos de interface e resistências em série e paralelo. Os resultados indicam uma eficiência aprimorada ao otimizar as espessuras, com Nb_2O_5 como *ETL* de 50nm, demonstrando uma melhor *PCE* de 22,24%.

Já em LEMOS et al., (2023), foram obtidas *PSC* com uma *PCE* de até 19,46%, utilizando uma bicamada de transporte de elétrons e mantendo uma estabilidade de 96% da *PCE* original após 500 horas. O alcance dessa performance foi graças à adição do MXene Ti_3C_2 (Carboneto de Titânio) às *ETL*'s de Nb_2O_5 . O desempenho aprimorado dos dispositivos com filme compacto de Nb_2O_5 - Ti_3C_2 (0,4% em peso) pode ser atribuído ao alinhamento adequado da banda de energia entre as camadas de perovskita e *ETL*, favorecendo o transporte e extração de elétrons. As melhorias no *PSC* se devem às modificações dopantes no *ETL*, tornando-o mais condutivo.

Em CHAVAN et al. (2021), estudou-se a modificação da superfície do *ETL* de TiO_2 mesoporoso (ms- TiO_2) com Nb_2O_5 usando deposição por camada atômica (ALD) para obter *PSC*'s com melhor desempenho e menor histerese. Foram preparadas amostras com 5, 10, 15 e 20 ciclos de ALD, resultando em filmes com espessuras de 0,7nm, 1,4nm, 2,1nm e 2,8nm.. A densidade de portadores e a mobilidade dos elétrons aumentaram gradualmente até 2,1 nm de espessura da camada de Nb_2O_5 em comparação com o ms- TiO_2 original. O dispositivo ms- TiO_2 / Nb_2O_5 com espessura de 2,1nm apresentou excelente *PCE* de 21,04%. Os espectros de fotoluminescência confirmaram que a fina camada de Nb_2O_5 melhorou a transferência de carga e reduziu a recombinação na interface *ETL*/perovskita.

Em LI et al. (2021), foi utilizado o Nb_2O_5 como revestimento em matrizes de nanobastões de TiO_2 (TNRA's) sintetizados pelo método hidrotérmico. Diversas concentrações (0,005, 0,02, 0,08, 0,16 M) de soluções de NbCl_5 foram aplicadas por *spin-coating* nas camadas de TNRA's para formar a camada de revestimento de Nb_2O_5 a ser utilizada como *ETL* em *PSC*'s. Os resultados indicam que a adição de Nb_2O_5 pode influenciar nas características da perovskita, como o tamanho de grão e a cristalinidade, e inibir os defeitos gerados no filme de perovskita. Em seguida, obtiveram um filme de perovskita ideal com alta cristalinidade e tamanho médio de

grão a partir de uma solução de NbCl_2 a 0,005 M, resultando em uma eficiência de 16,50%. Em suma, destacaram as vantagens do Nb_2O_5 , incluindo a criação de uma barreira de energia entre a camada de perovskita e as TNRA's.

Em SUBBIAH et. al (2020) foi utilizada uma combinação de cinco diferentes camadas de *ETL* sobre substratos de vidro *FTO* para comparar o desempenho dos dispositivos. As diferentes camadas de *ETL* incluem: éster metílico do ácido fenil-C61-butírico (PCBM), TiO_2 , TiO_2 -PCBM, ALD- Nb_2O_5 e ALD- Nb_2O_5 -PCBM. No dispositivo baseado na camada dupla *ETL* ALD- Nb_2O_5 -PCBM, a *PCE* máxima foi de 15,4%. Enquanto que na arquitetura com *ELT* puro de Nb_2O_5 , a *PCE* foi de 14,2%. A inserção do PCBM na camada de interface do óxido melhorou a dinâmica de injeção de elétrons e reduziu a recombinação, tornando a combinação ALD- Nb_2O_5 -PCBM mais eficaz.

Em Ye et al.,(2020), os autores realizaram a dopagem de Nb_2O_5 com Zinco (Zn) com o objetivo de aprimorar as propriedades físicas e utilizá-lo como *ETL* em *PSC*'s. Eles empregaram o método de combustão em solução de baixa temperatura para obter filmes de Nb_2O_5 e $\text{Zn:Nb}_2\text{O}_5$. Foram feitas *PSC*'s com *ETL* contendo o filme puro de Nb_2O_5 e com pequenas concentrações de Zn: 0%, 2,5%, 5%, 10% e 15%. Como resultado, o dispositivo baseado no *ETL* de Nb_2O_5 alcançou *PCE* de 16,40%. Enquanto isso, com a *ETL* com 5% de $\text{Zn:Nb}_2\text{O}_5$ atingiu 17,70 % de eficiência. Isso indica que a dopagem de Zn no Nb_2O_5 melhorou as propriedades optoeletrônicas do material. Além disso, relatam que houve uma redução dos estados de armadilha nos filmes de perovskita em *ETL*s de Nb_2O_5 e 5% mol de $\text{Zn:Nb}_2\text{O}_5$, resultando em superfícies mais lisas quando comparadas às do *ETL* de m- TiO_2 .

Em Fernandes et al. (2019), as propriedades físicas do filme de Nb_2O_5 foram modificadas ao alterar a taxa de fluxo de oxigênio por meio da deposição por pulverização catódica reativa. O estudo investigou diversas taxas de fluxo de oxigênio, variando de 3 a 10 sccm, durante o processo de deposição do Nb_2O_5 , que posteriormente seria utilizado como camada *ETL*. Após a montagem da *PSC*, os parâmetros fotovoltaicos foram medidos e analisados. Dentre as camadas de Nb_2O_5 avaliadas, a célula com a camada 3.5NbO (correspondente ao fluxo de 3,5 sccm) apresentou o melhor desempenho fotovoltaico com 16,1% de *PCE*. A redução da taxa de fluxo de oxigênio induziu vacâncias de oxigênio, o que resultou no aumento da condutividade do filme.

Os estudos apresentam diversas abordagens para aprimorar a eficiência das *PSC*s utilizando Nb_2O_5 como *ETL*. Através da modelagem e análise das características do dispositivo, bem como da dopagem com outros materiais e técnicas de deposição que permitem otimizar as propriedades elétricas, como a condutividade, sem adicionar impurezas ao sistema.

4. CONCLUSÕES

Em suma, os estudos apresentados demonstraram que a escolha e otimização do *ETL* têm um impacto significativo no desempenho das *PSC*'s. O uso de diferentes materiais de *ETL*, como Nb_2O_5 , com a inserção de outros composto, como TiO_2 , Zn e outros, resultou em melhorias na eficiência das *PSC*'s, atingindo valores notáveis de eficiência fotovoltaica acima de 20%. O uso de *ETL*'s como Nb_2O_5 e suas modificações, como a adição de MXene Ti_2C_2 e a alteração do fluxo de oxigênio, resultou em maior condutividade e estabilidade das *PSC*'s, proporcionando uma melhor eficiência. O contínuo interesse na pesquisa sobre *ETL* para *PSC* é justificado pelas notáveis melhorias de desempenho. Portanto, o Nb_2O_5 emerge como uma opção

viável para desempenhar a função de *ETL* em *PSC*, o que ressalta a importância de perseverar na pesquisa deste composto.

5. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

Chavan, R. D., et al. (2021). Mesoscopic $\text{TiO}_2/\text{Nb}_2\text{O}_5$ electron transfer layer for efficient and stable perovskite solar cells. **A. M. I.** 8, 2100177.

Fernandes, S. L., et al. (2019). Exploring the properties of niobium oxide films for electron transport layers in perovskite solar cells. **Frontiers in Chemistry** 7.

Godoy, A. S. Pesquisa qualitativa tipos Fundamentais. **Revista de Administração de Empresas**. São Paulo, v. 35, n.3, p, 20-29, 1995.

Hosen, A., et al. (2023). Improving the performance of lead-free fasn_{I3} -based perovskite solar cell with Nb_2O_5 as an electron transport layer. **A. T. and S.** 6, 2200652.

Lemos, H. G., et al. (2023). Electron transport bilayer with cascade energy alignment based on $\text{Nb}_2\text{O}_5\text{--Ti}_3\text{C}_2$ mxene/ TiO_2 for efficient perovskite solar cells. **J. M. C. C.**

Li, R., et al. (2021). Facile synthesis of ordered Nb_2O_5 coated TiO_2 nanorod arrays for efficient perovskite solar cells. **Applied Surface Science** 542, 148728.

Lopes, O. F., et al. (2015). Óxidos de nióbio: Uma visão sobre a síntese do Nb_2O_5 e sua aplicação em fotocatalise heterogênea. **Quim. Nova**, Vol. 38, 106–117.

MINAYO, M. C. S. O desafio da pesquisa social. In: MINAYO, M. C. S. (Org.). Pesquisa social: teoria, método e criatividade. Rio de Janeiro, RJ: Vozes, 2009. p. 09-29.

Mohamad Noh, et al. (2018). The architecture of the electron transport layer for a perovskite solar cell. **J. Mater. Chem.** C 6, 682–712.

Nico, C., et al. (2016). Niobium oxides and niobates physical properties: Review and prospects. **Progress in Materials Science** 80, 1–37.

Subbiah, A. S., et al. (2020). Ultra-thin atomic layer deposited– Nb_2O_5 as electron transport layer for co-evaporated mapb_{I3} planar perovskite solar cells. **E. T.** ,8,

Valadi, K., et al. (2021). Metal oxide electron transport materials for perovskite solar cells: a review. **Environmental Chemistry Letters**, v.19, 2185–2207.

Valerio, T. L., et al. (2020). Minimizing of charge recombination by Nb_2O_5 addition in dye-sensitized solar cells. **Optical Materials** 109, 110310.

Wang, Z., et al. (2019). Solution processed Nb_2O_5 electrodes for high efficient ultraviolet light stable planar perovskite solar cells. **ACS- S. C. E.** 7, 187–194.

Ye, X., et al. (2020). Low-temperature solution-combustion-processed Zn-doped Nb_2O_5 as an electron transport layer for efficient and stable perovskite solar cells. **Journal of Power Sources** 448, 227419.