

# JORNADA PCI

## APRESENTAÇÃO DE PROJETO – 2021/2022

**BOLSISTA:** SANTUNU GHOSH  
**SUPERVISOR:** ALEXANDRE MELLO DE PAULA SILVA  
**MODALIDADE:** PCI-DA

### CRESCIMENTO, CARACTERIZAÇÃO, PROPRIEDADES ÓPTICAS E DE TRANSPORTE DE FILMES FINOS $Sb_2Se_3$ PARA APLICAÇÃO EM CÉLULAS SOLARES DE BAIXO CUSTO

#### INTRODUÇÃO

Nos últimos anos, o seleneto de antimônio ( $Sb_2Se_3$ ) emergiu como um candidato promissor para células solares de filme fino devido às suas propriedades optoeletrônicas atraentes como o intervalo de banda desejável (1-1,2 eV) [2]. Além disso, o baixo custo de Sb e Se, naturalmente abundantes, alto coeficiente de absorção óptica (acima de  $10^5 \text{ cm}^{-1}$ ) na região do visível, propriedades químicas estáveis e longa vida útil do portador tornam o  $Sb_2Se_3$  um material absorvente sofisticado para aplicação de dispositivos fotovoltaicos de alta eficiência de conversão de energia [1]. Neste trabalho, quatro filmes finos de  $Sb_2Se_3$  foram depositado em diferentes temperaturas de substrato (temperatura ambiente (RT),  $150^\circ\text{C}$ ,  $250^\circ\text{C}$  e  $350^\circ\text{C}$ ) fabricados por magnetron sputtering. Os picos de difração de raios X garantem que os filmes são de natureza policristalina. As medidas XPS fornecem uma estimativa da quantificação elemental de Sb (57,8%) e Se (42,2%). A configuração do superstrato das células solares  $Sb_2Se_3$  é mostrada na Fig. 1.

#### METODOLOGIA

- Quatro amostras de filme fino de  $Sb_2Se_3$  foram depositados em substrato de Si(100).
- Os filmes de 600 nm foram depositados em diferentes temperaturas do substrato (RT,  $150^\circ\text{C}$ ,  $250^\circ\text{C}$  e  $350^\circ\text{C}$ ) por 45 minutos.
- As propriedades estruturais foram estudadas por difratometria de raios X de incidência de Grazing (GIXRD).
- A composição química dos filmes foi estimada usando espectroscopia de fotoelétrons de raios X (XPS).
- Todos os ajustes de picos de XPS para as medidas de alta resolução para os picos Sb 3d, Se 3p e C1s foram realizados com o software CASA-XPS.

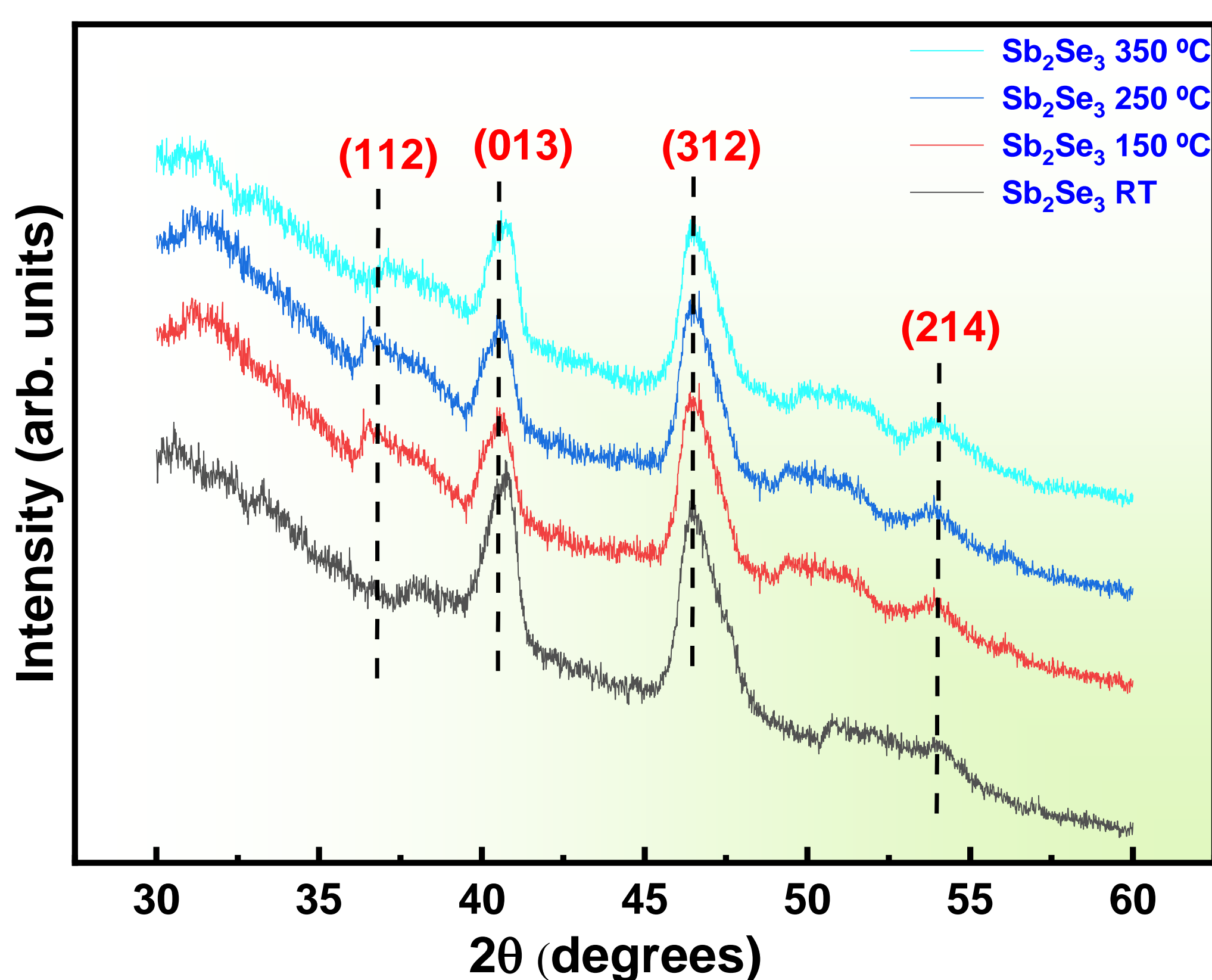


Fig. 2 –DRX de filmes  $Sb_2Se_3$

#### Referências:

- [1] Wang et al. Nat. Energy **2**, 17046 (2017);  
[2] Ghosh et al. Sol. Energy **211**, 613-621 (2020);

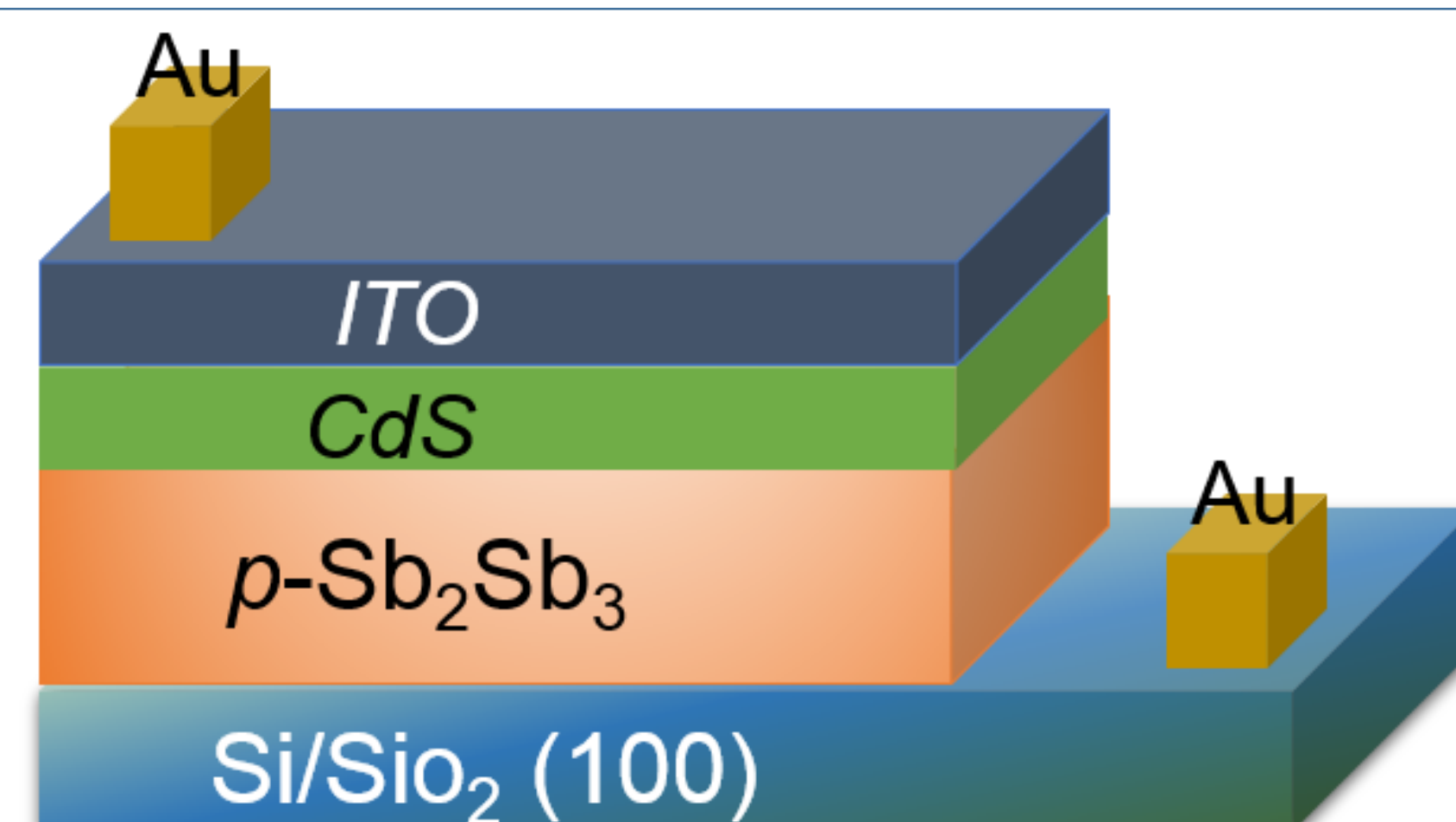


Fig. 1 –Diagrama esquemático de células solares de  $Sb_2Se_3$

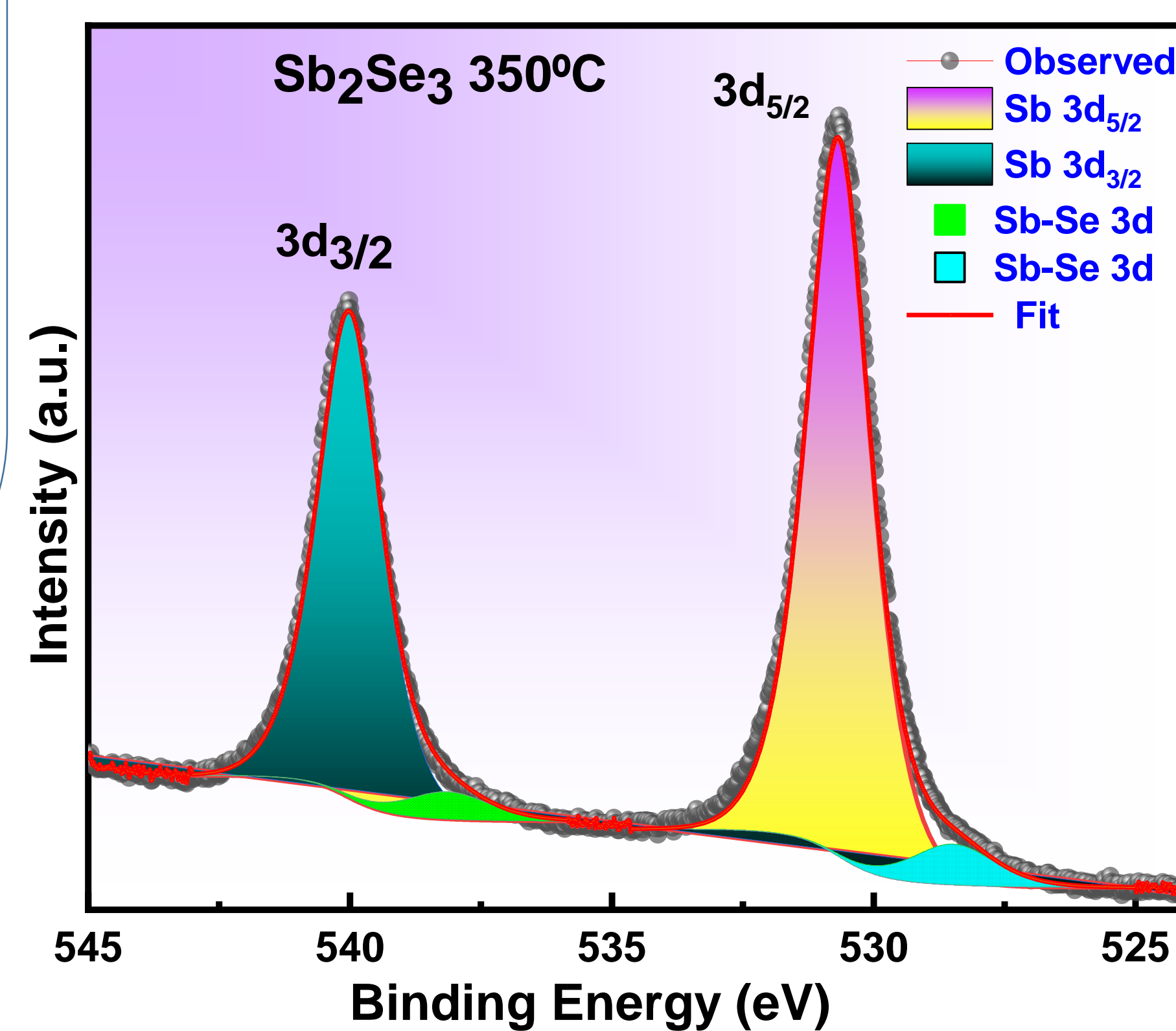


Fig. 3 –Espectros XPS do nível Sb 3d do filme  $Sb_2Se_3$

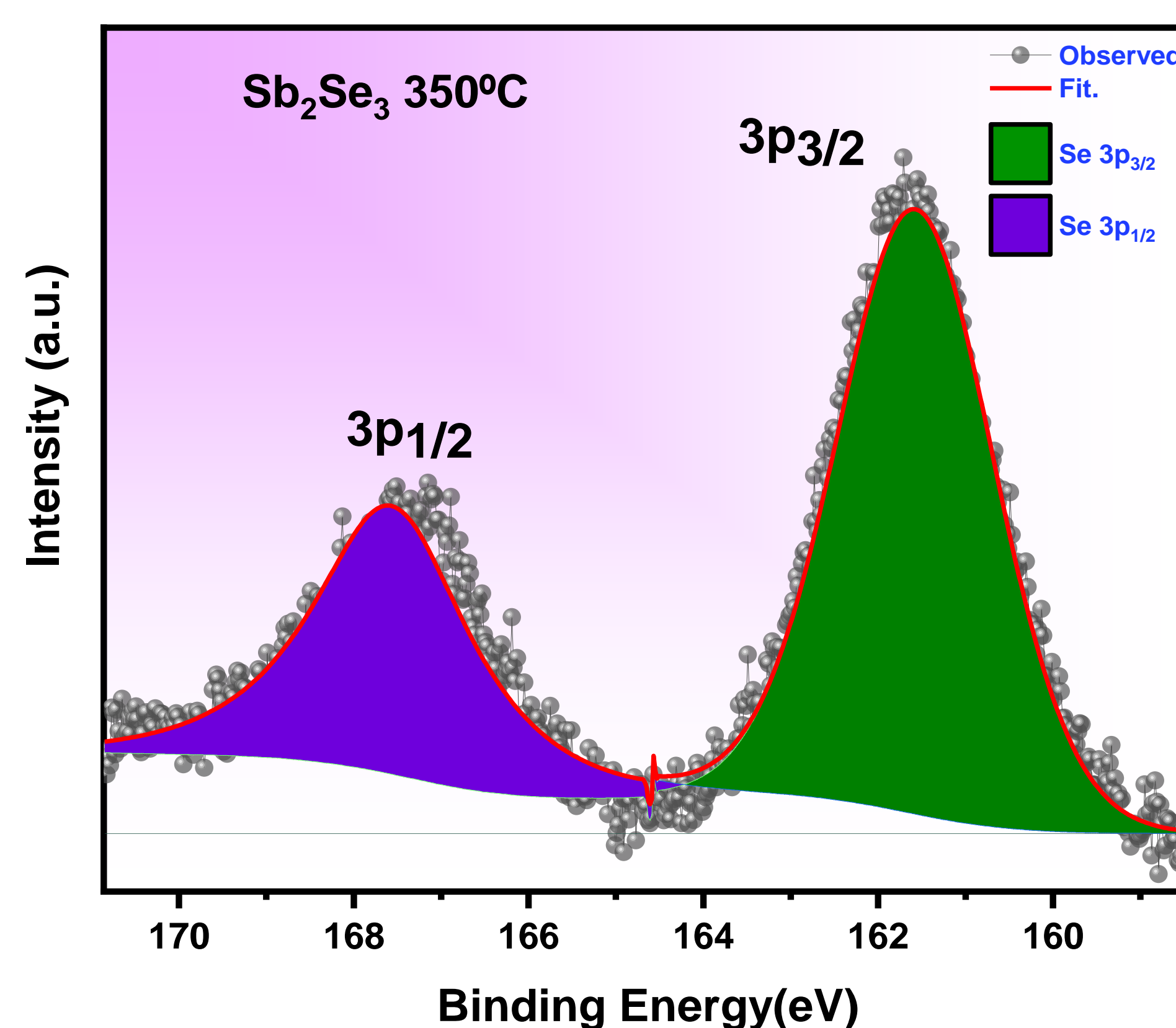


Fig. 4 –Espectros XPS do nível Se 3p do filme  $Sb_2Se_3$

#### RESULTADOS:

- Os picos de DRX exibem que os filmes de  $Sb_2Se_3$  depositados são policristalinos (Fig 2).
- Os principais picos da fase  $Sb_2Se_3$  estão localizados em  $\sim 36,6^\circ$ ,  $40,7^\circ$ ,  $46,6^\circ$  e  $58,9^\circ$  e suas orientações correspondentes são (112), (013), (312) e (214), respectivamente.
- Os espectros XPS dos filmes  $Sb_2Se_3$  são mostrados na Fig. 3 e Fig. 4. Todos os picos no espectro foram calibrados em relação a C1s (284,6 eV).
- A diferença nos níveis  $3p_{3/2} - 3p_{1/2}$  para Se foi  $\Delta Se (3p_{3/2} - 3p_{1/2}) = 6\text{eV}$  e para os níveis 3d de Sb foi  $\Delta Sb (3d_{5/2} - 3d_{3/2}) = 9,84\text{ eV}$ .
- As energias de ligação para o Se  $3p_{3/2}$  e  $3p_{1/2}$  foram 161 eV e 167 eV respectivamente, enquanto as energias de ligação do Sb para o  $3d_{5/2}$  e  $3d_{3/2}$  foram 530 eV e 540 eV respectivamente.
- A quantificação elemental determinada a partir de espectros XPS demonstra que há 57,8% de Sb e 42,2% de Se presentes nos filmes.

#### CONCLUSÕES

- Os filmes  $Sb_2Se_3$  depositados são de natureza policristalina.
- A fase  $Sb_2Se_3$  está presente nos filmes.
- A temperatura diferente do substrato não influencia a cristalinidade das amostras.