

RESUMO - CIÊNCIA DOS MATERIAIS

FILMES DE TiO_2 DEPOSITADOS POR SPUTTERING COMO CAMADAS DE PASSIVAÇÃO E TRANSPORTE DE BURACOS PARA MELHORIA DA CONVERSÃO DE ENERGIA EM FOTOANODOS DE $\text{WO}_3/\text{CuWO}_4$ PARA PRODUÇÃO DE COMBUSTÍVEL VIA LUZ SOLAR

Lucas Caniati Escalante (lucas.caniati@unesp.br)

Filmes amorfos de dióxido de titânio (TiO_2) preparados por deposição atômica em camadas (ALD), conhecidos como "leaky TiO_2 ", têm recentemente atraído atenção como camadas protetoras e seletivas de carga em sistemas de produção de combustível via luz solar baseados em semicondutores. Neste estudo, relatamos pela primeira vez o uso de filmes de TiO_2 depositados por RF magnetron sputtering como camadas interfaciais seletivas de buracos para fotoanodos de $\text{WO}_3/\text{CuWO}_4$, projetados para oxidação da água. Os revestimentos de TiO_2 , com espessuras variando de 2 a 128 nm, resultaram em estruturas amorfas, confirmadas por espectroscopia Raman e difração de raios X (XRD). A caracterização fotoeletroquímica (PEC) e as medições de fotopotencial de superfície (SPV) realizadas com uma sonda Kelvin vibratória revelaram que camadas ultrafinas de TiO_2 (2–8 nm) proporcionaram um aumento substancial no desempenho do dispositivo, dobrando a fotocorrente para $0,97 \text{ mA cm}^{-2}$ sob luz solar simulada AM1.5 (com eficiência quântica

aparente de 19% em 350 nm), aumentando o fotopotencial de superfície em 25% e ampliando o band gap efetivo da heteroestrutura $\text{WO}_3/\text{CuWO}_4$. Essas melhorias são atribuídas à seletividade do TiO_2 para o transporte de buracos. Além disso, os dados de SPV sugerem que a sobrecamada de TiO_2 pode suprimir defeitos de recombinação superficial. Em contraste, camadas mais espessas de TiO_2 (16–128 nm) resultam em diminuição da fotocorrente e do fotopotencial devido à maior resistência ao transporte de buracos e ao sombreamento óptico, conforme confirmado pelos espectros de IPCE. Além do aprimoramento do desempenho, os filmes de TiO_2 também contribuem para a durabilidade do eletrodo, permitindo uma evolução praticamente constante de O_2 por mais de 3 h após uma perda inicial de 20–35%. Este trabalho destaca o RF sputtering como uma técnica eficaz para aplicar camadas de passivação de TiO_2 amorfo que melhoram tanto a atividade quanto a estabilidade de fotoanodos $\text{WO}_3/\text{CuWO}_4$ para produção de combustíveis via luz solar. Além disso, demonstramos como a combinação das técnicas PEC e SPV fornece informações aprofundadas sobre o funcionamento das camadas de "leaky TiO_2 ".

Palavras-chave: photoelectrochemistry; water splitting; CuWO_4 ; WO_3 ; TiO_2 .