

Lucas Jorge Affonço

Análise da eficiência e estabilidade de células solares de perovskita com adição de materiais 2D.

Relatório de Pós-doutorado realizado na Universidade Estadual Paulista (UNESP), Faculdade de Ciências, Departamento de Física e Meteorologia, Bauru.

Supervisor(a): Prof. Dr. Prof. Dr.
Carlos Frederico de Oliveira Graeff

FINEP - 01.22.0289.00 (0034/21)

BAURU

2025

Resumo das atividades

As células solares de perovskita destacam-se entre as tecnologias fotovoltaicas emergentes devido à sua elevada eficiência de conversão de energia, que atualmente ultrapassa 26%. No entanto, a estabilidade operacional e a escalabilidade dos processos de fabricação ainda representam desafios críticos para sua aplicação comercial. Neste trabalho, investigou-se o impacto da adição de materiais bidimensionais da classe dos *transition metal carbodichalcogenides* (TMCCs) na solução precursora de perovskita, com o objetivo de avaliar seus efeitos sobre a performance elétrica dos dispositivos. Paralelamente, foi estudada a deposição da camada ativa por *blade coating*, visando a produção de células solares com área ativa ampliada.

Na primeira etapa, aerogéis de Nb₂S₂C foram incorporados à solução precursora de perovskita em diferentes concentrações, buscando avaliar possíveis efeitos de passivação de defeitos e modificação dos processos de transporte e extração de cargas. Os dispositivos foram caracterizados por curvas corrente-tensão (JV), enquanto análises estruturais por difração de raios X foram empregadas para investigar alterações na cristalização da perovskita. Na segunda etapa, comparou-se o efeito da adição de Nb₂S₂C e Nb₂C, evidenciando diferenças significativas de desempenho entre os materiais. Por fim, células solares do tipo p-i-n com área ativa de 0,5 cm² foram fabricadas por *blade coating*, com a investigação sistemática de parâmetros de deposição e tratamento térmico.

Os resultados indicam que a adição de TMCCs pode influenciar o desempenho dos dispositivos, embora a reprodutibilidade e a dispersão dos materiais representem limitações relevantes. No caso das células produzidas por *blade coating*, observou-se a formação adequada da fase perovskita, porém com desempenho elétrico ainda significativamente inferior ao reportado na literatura, indicando a necessidade de otimizações adicionais do processo.

1. Introdução

As células solares de perovskita se tornaram um dos dispositivos de grande relevância quando se trata de energia fotovoltaica [1,2]. Atualmente superam os 26 % de eficiência em conversão de energia e se aproximam das células solares de silício, com um potencial para substituição, devido à sua grande versatilidade [3]. Entretanto, sua estabilidade e escalabilidade ainda são desafios a serem transpostos para o avanço desta tecnologia [1,4].

Tendo em vista a busca por prolongar o tempo de vida útil dessas células, diversas estratégias surgem para mitigar efeitos de degradação, tais como a passivação de superfície e o uso de aditivos [5,6]. Nesse último, materiais bidimensionais, como os MXenes, vêm sendo testados com a premissa de melhorar o transporte e extração de carga, e por conseguinte, aumentar a performance dos dispositivos [7–10].

Além dos MXenes, os TMCCs (do inglês, *transition metal carbo-chalcogenide*), aparecem como uma nova classe de materiais 2D com potencial aplicação nos dispositivos fotovoltaicos por reunir características ópticas e elétricas similares aos MXenes [11]. Dessa forma, o presente trabalho relata a aplicação de TMCC como aditivo na solução precursora de perovskita e seu impacto na performance dos dispositivos.

Outro problema constantemente reportado na literatura está relacionado com a produção em larga escala do dispositivo, tanto em um aumento do tamanho como em metodologias que permitam a fabricação em alta produtividade [4,12]. Em geral, quando se aumenta a escala dos dispositivos, defeitos como buracos (*pinholes*), o recobrimento não uniforme e a dificuldade de cristalização da camada ativa, também aumentam, e consequentemente, a performance dos dispositivos cai drasticamente [4]. Dessa forma, técnicas como o *blade coating* surgem como um intermediário entre a escala de laboratório e industrial, com grande potencial para se estudar o processo de transição entre essas duas produções. Entretanto, ainda poucos estudos exploram de maneira sistemática como os parâmetros de deposição podem afetar o resultado da célula [12]. Assim, esta técnica foi empregada com o intuito de correlacionar o efeito da produção com a performance do dispositivo, buscando condições que permitam a obtenção desses dispositivos de maneira otimizada.

Os desempenhos dos dispositivos modificados foram testados por meio de curvas corrente-tensão (JV). Os parâmetros provenientes das curvas JV, tais como eficiência, fator de preenchimento, corrente de curto-circuito e tensão de circuito aberto, que caracterizam o funcionamento dos dispositivos, foram então comparados com as células solares de perovskita padrão do tipo p-i-n.

2. Objetivo

O objetivo do projeto é investigar o impacto da adição de materiais bidimensionais, i.e., TMCC, na performance das células solares de perovskita. Em adição, pretende-se encontrar uma metodologia compatível para produção de amostras com escala aumentada (maior área ativa da célula solar).

3. Metodologia

As células confeccionadas para os experimentos foram do tipo p-i-n, seguindo o procedimento apontado em trabalhos anteriores do grupo [9,10]. A ordem das camadas em relação ao caminho percorrido pela luz consiste no substrato (vidro recoberto com um óxido condutor transparente – FTO, 2,5 x 2,5 cm), seguido pela camada transportadora de buracos (HTL) que consiste em uma *self-assembly monolayer* (SAM) de MeO-2Pacz, então a perovskita CsFA ($\text{Cs}_{0.17}\text{FA}_{0.83}\text{Pb}(\text{I}_{0.83}\text{Br}_{0.17})_3$), então a camada transportadora de elétrons (ETL), composta por uma combinação de PCBM e BCP, e por fim, o eletrodo superior de prata, obtido por meio de evaporação resistiva. Todas as camadas do dispositivo foram confeccionadas por meio da técnica de *spin coating*, realizada dentro de uma *glove box* com atmosfera de nitrogênio. Tal configuração é representada na Figura 1.

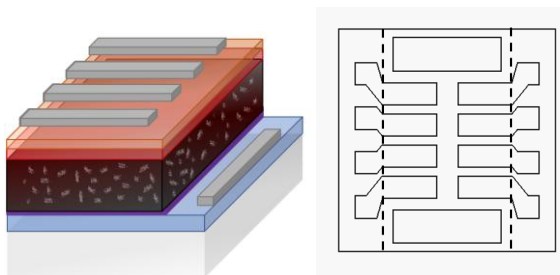


Fig 1. Representação de uma célula p-i-n. A esquerda a célula completa com as camadas de baixo para cima sendo o vidro recoberto por FTO, o SAM, a camada de perovskita (representada com aditivo), a combinação de PCBM e BCP e por fim a prata. A direita é apresentada a esquematização da célula de área aumentada.

A adição dos TMCC na modificação dos dispositivos pode ser dividida em duas etapas. Na primeira um aerogel de $\text{Nb}_2\text{S}_2\text{C}$ foi utilizado em três diferentes concentrações, em busca de uma quantidade ótima para aplicação. O aerogel foi dispersado em DMF:DMSO, solvente compatível com o preparo da perovskita. Após isso, a solução foi adicionada na solução de Iodetos, usado como precursor da perovskita, sendo utilizada as quantidades de 5, 10 e 25 μL . Por fim o dispositivo foi preparado da mesma forma que o reportado no parágrafo acima para a solução de referência.

Cada amostra preparada possui quatro células com área de 0.14 cm² que foram caracterizadas em um simulador solar, com espectro AM1.5G, por meio de curvas de densidade de corrente versus tensão (JV) em varredura direta e reversa. Os parâmetros dispositivos com diferentes quantidades de Nb₂S₂C foram por fim comparados com o das células de referências para avaliação da performance, conforme será reportado nos resultados.

Na segunda etapa, após avaliação da melhor quantidade de aplicação do Nb₂S₂C, foi comparada a aplicação de outro material na forma de aerogel, o Nb₂C. A quantidade escolhida foi de 10 uL para cada modificador a ser adicionada na solução de iodetos. Dessa forma, foram confeccionadas três conjuntos de amostras, o primeiro com Nb₂S₂C, o segundo com Nb₂C, e o terceiro, o padrão para controle. Os desempenhos das células foram avaliados por curvas JV.

Como última etapa, foram realizados testes com o objetivo de produzir células de perovskitas do tipo p-i-n pela técnica de *blade coating*, em busca de promover um aumento da área ativa da célula solar de perovskita utilizando metodologias que permitam maior escalabilidade. A nova série de amostras depositadas, contam com 8 células com área de 0.5 cm² em cada amostra, que são depositadas em substratos de vidro/ITO de 5x5 cm. Esses testes foram feitos alterando a estequiometria da perovskita CsFA, sendo utilizado Cs_{0.15}FA_{0.85}PbI₃. O preparo da solução foi feito de acordo com o reportado por Jaffrès et. all (2024). As HTLs dessas amostras foram compostas por uma camada de NiOx e de SAM, na qual a perovskita foi depositada no topo. Como ETL também utilizou-se a combinação de PCBM e BCP, e o contato elétrico superior de ouro, evaporado. Os parâmetros de recobrimento reportados também foram utilizados como base [12], porém variações foram testadas, conforme será apresentado na seção de resultados, em busca da melhora na performance dos dispositivos.

4. Resultados

A seguir serão apresentados os resultados da primeira etapa desenvolvida, na qual foi explorado a modificação da solução precursora de perovskita por meio da adição de TMCC seguido dos testes com a formulação apropriada para deposição por *blade coating* visando a deposição em maior área.

4.1.1 Caracterização estrutural dos TMCCs

Os aerogéis de Nb₂C e Nb₂S₂C, foram caracterizados por difração de raios X (DRX) usando um Rigaku DMax (equipamento multiusuário do Laboratório de Filmes Semicondutores). As medidas tinham como objetivos identificar os principais picos destes materiais, bem como avaliar a distribuição randômica dos cristais e possíveis picos provenientes

de estados oxidados, com potência para alterar a estrutura cristalina do aerogel puro. Os resultados encontrados para cada um dos difratogramas encontra-se na Figura 2 a seguir.

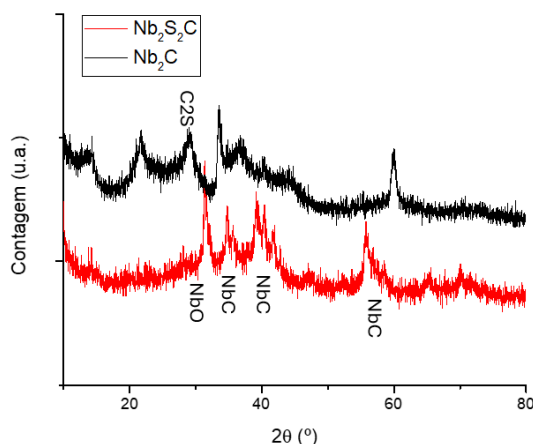


Fig 2. Difratoograma das amostras em aerogel de $\text{Nb}_2\text{S}_2\text{C}$ e Nb_2C

Os principais picos referentes a família dos materiais analisados não foram encontrados com clareza e boa definição. Entretanto, foi possível identificar picos referentes a estrutura do NbC , apesar disso, assim indicando uma provável degradação ou oxidação do material.

Seguindo a primeira etapa do trabalho, o $\text{Nb}_2\text{S}_2\text{C}$ foi adicionado na perovskita e o DRX somente da camada de perovskita com e sem modificação (Figura 3) foram analisados com o intuito de verificar mudanças na formação da perovskita de acordo com a quantidade de TMCC adicionada.

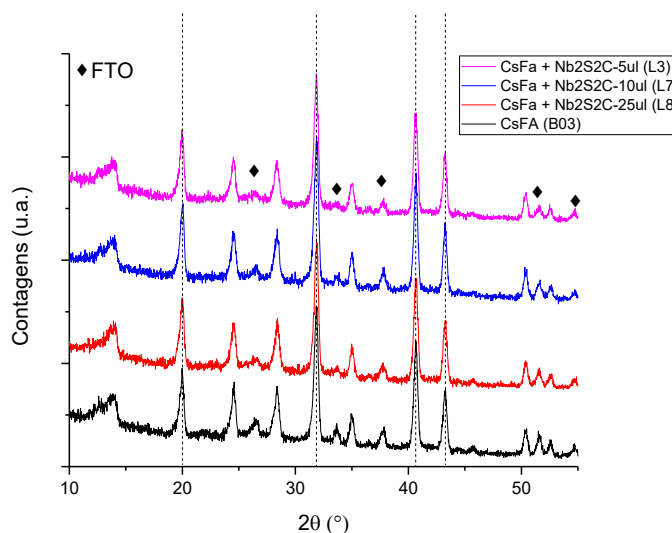


Fig 3. Difratoograma das camadas de perovskitas de CsFA sem e com a adição de TMCC em diferentes quantidades.

Não houve mudanças expressivas nos picos das diferentes amostras, evidenciando apenas os picos referentes aos substratos e ao padrão da perovskita, sendo este um indicativo que a quantidade adicionada de Nb₂S₂C não foram significativas para impactar na formação estrutural da perovskita de maneira relevante.

4.1.2 Caracterização das células solares com aditivos 2D

Utilizando os resultados das curvas de JV é possível obter os principais parâmetros que caracterizam o desempenho das células solares. Dentre esses, estão a corrente de curto-circuito (J_{sc}), tensão de circuito aberto (V_{oc}), fator de preenchimento (FF) e eficiência (PCE). Os gráficos da Figura 4, e a Tabela 1 a seguir representam o resultado obtido para a melhor célula de cada amostra de acordo com a variação de quantidade de TMCC no preparo da perovskita.

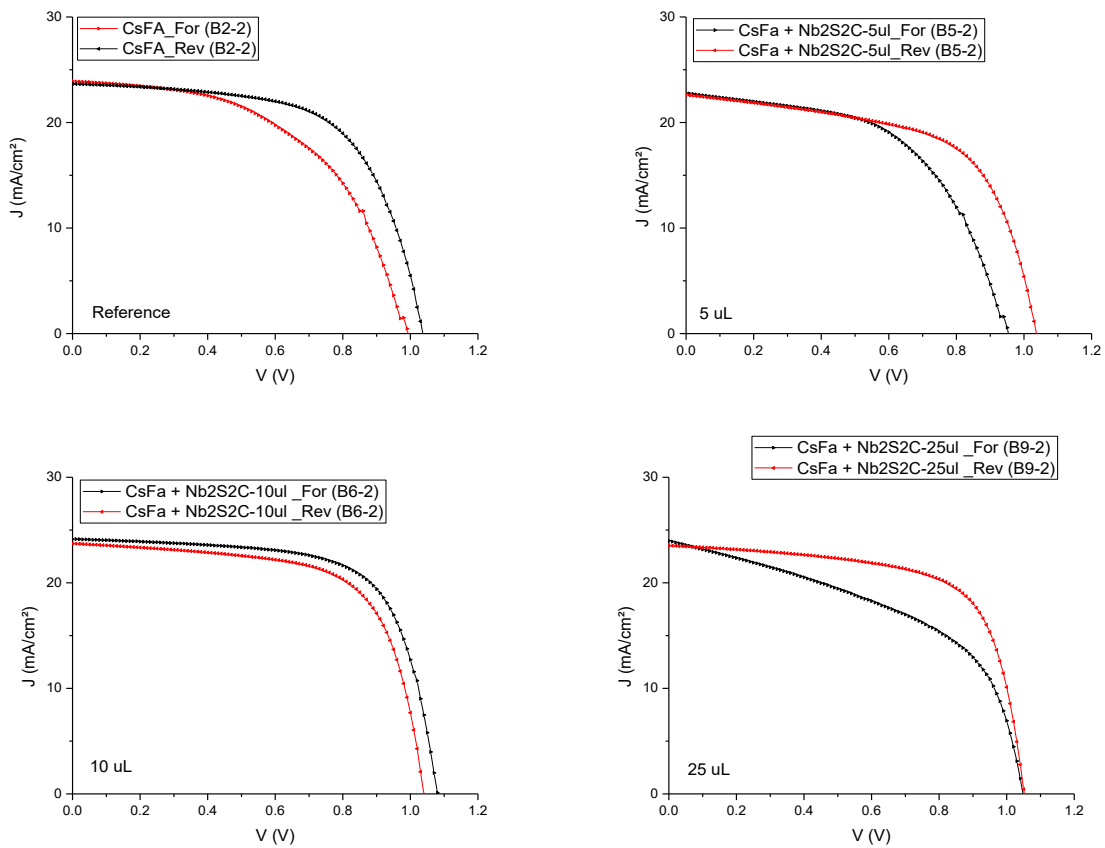


Fig 4. Gráficos de JV da melhor célula de referência e com adição de diferentes quantidades de TMCC.

Tabela 1. Principais parâmetros das células obtidas para cada condição por meio das medidas de JV apresentadas na Fig 4.

Cell	Sample	Voc [V]	Jsc[mA/cm ²]	FF [%]	Eff. [%]
Cell02	Ref_for	0.99	23.96	52.01	12.29
Cell02	Ref_rev	1.04	23.66	62.21	15.25
Cell02	5uL_for	0.95	22.85	53.62	11.63
Cell02	5uL_rev	1.04	22.63	59.98	14.06
Cell02	10uL_for	1.08	24.16	68.07	17.71
Cell02	10uL_rev	1.04	23.73	66.18	16.33
Cell02	25uL_for	1.04	24.02	49.13	12.30
Cell02	25uL_rev	1.05	23.53	66.98	16.58

A adição do Nb₂S₂C nas células promoveu uma leva melhora geral dos dispositivos, com o melhor resultado de eficiência quando adicionado 10 µL, com cerca de 17 %, em contrapartida a referência sendo cerca de 15 %.

Também foi feito uma análise comparativa da dispersão dos resultados para cada célula. A seguir, na figura 5, é apresentado os gráficos referentes a dispersão de cada parâmetro.

Apesar da amostra com 10 µL de Nb₂S₂C ter apresentado o melhor resultado individual, ao analisar a distribuição de eficiências, a célula que se destaca em termos de menor dispersão é a de 5 µL, apesar de seus valores não terem ultrapassado nem a referência. Em termos de V_{oc}, todas estão similares indicando uma boa geração de carga, a J_{sc} indica que as quantidades intermediárias de Nb₂S₂C também promovem uma melhor extração de cargas. Já o FF é o fator que se destaca a amostra de 20 µL, levando a maior eficiente.

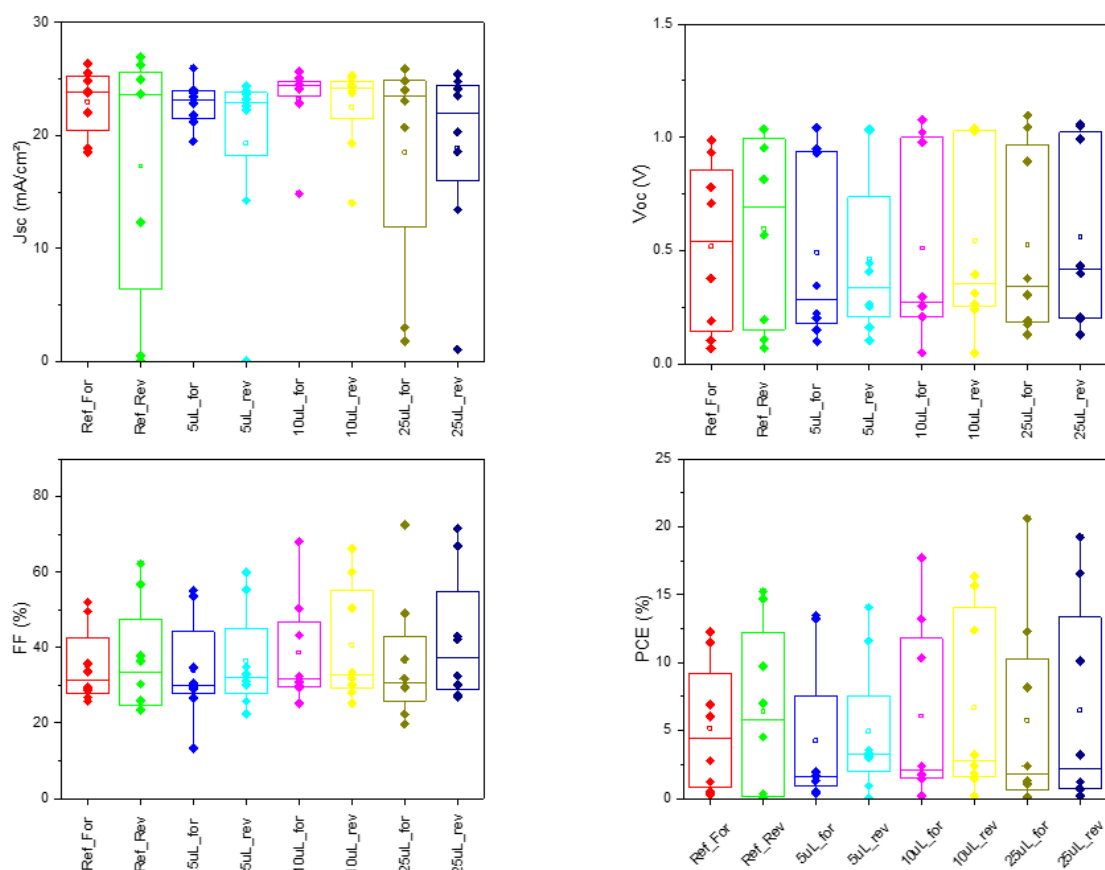


Fig 5. *Box plot* dos parâmetros obtidos por meio das curvas de JV para todas as células representando a distribuição dos resultados.

Após a avaliação das concentrações, foi escolhido a quantidade de 10 μL para o preparo de novos dispositivos para comparação do $\text{Nb}_2\text{S}_2\text{C}$ e Nb_2C . Todo o preparo seguiu conforme reportado anteriormente, onde os três grupos, perovskita padrão, com a adição de 10 μL de $\text{Nb}_2\text{S}_2\text{C}$ e 10 μL Nb_2C , foram preparados e comparados.

Durante o preparo, para a dissolução dos dois TMCCs (1 mg/ml de DMF:DMSO, 4:1 V/V%), foi observado a dificuldade na dispersão do material, conforme pode ser observado na Figura 6, necessitando passar em agitação por 12 h a temperatura de 70 $^{\circ}\text{C}$, em busca de melhorar a dispersão.

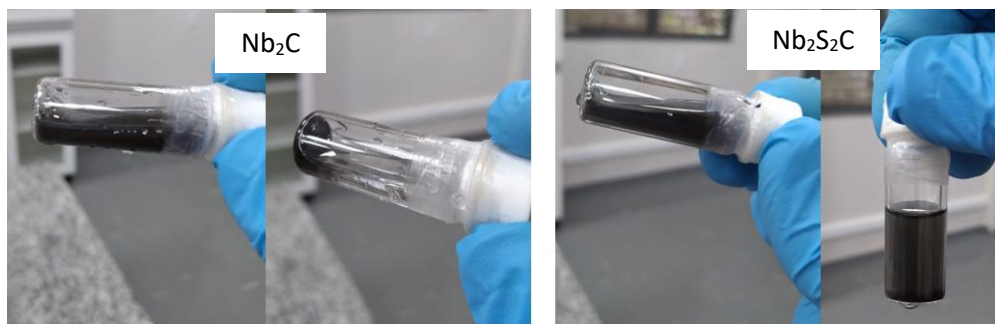


Fig 6. Tentativa de dispersão do aerogel (Nb_2C à esq. e $\text{Nb}_2\text{S}_2\text{C}$ à dir.) usando banho ultrassônico por cerca de 2 horas.

Após o período de agitação, foi observado uma melhora na dispersão, porém ainda não ideal, evidenciando a necessidade de otimização dessa etapa em trabalhos futuros. Entrando, com dispersão alcançada ao fim das 12 h o procedimento de preparo seguiu, realizando a modificação da solução de perovskita e posteriormente a confecção dos dispositivos. A curva JV correspondente a melhor célula de cada grupo de amostra é mostrada na Figura 7 a seguir, juntamente com a tabela contendo os dados dos principais parâmetros.

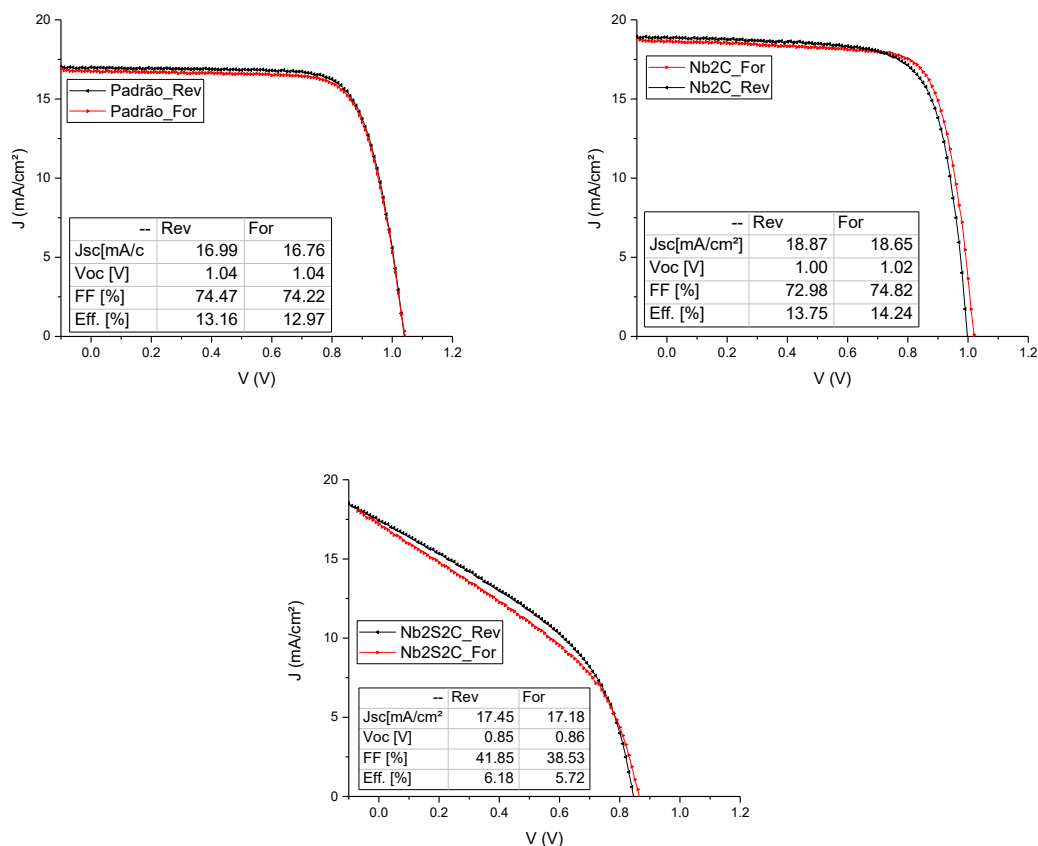


Fig 7. Curva JV da melhor célula do dispositivo padrão, modificado com Nb_2C e modificado com $\text{Nb}_2\text{S}_2\text{C}$. A tabela como inserto apresenta os dados dos principais parâmetros de análise.

A amostra com a camada de perovskita modificada pela adição de Nb₂C apresentou o melhor resultado, sendo esse evidenciado pela corrente mais alta do dispositivo, o que pode ser um possível indicativo de uma melhor transporte, extração ou coleta de cargas. Em contraste, a modificação pelo Nb₂S₂C apresentou os resultados menos expressivos, inclusive em dissonância com os testes anteriores onde essas células superaram o padrão. Em busca de uma melhor comparação e para a análise da dispersão dos dados, o *boxplot* dos principais parâmetros de análise das células solares, é apresentado na Figura 8.

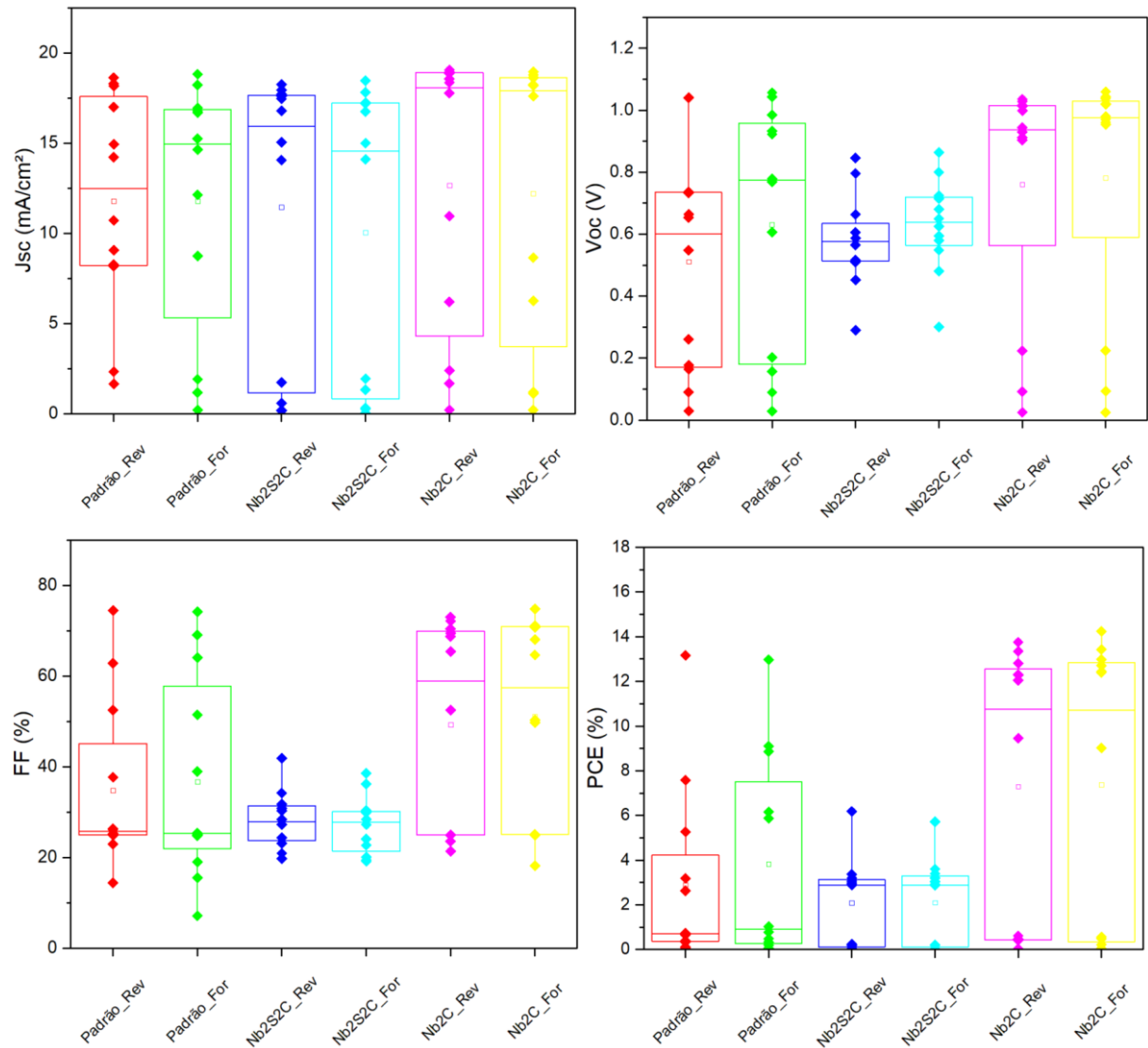


Fig 8. Gráficos da dispersão dos valores de Jsc, Voc, FF e PCE de cada célula produzida.

Os gráficos mostram que inclusive o valor médio das células de Nb₂C foram superiores que das demais. Essa amostra modifica, se destaca por sua corrente mais elevada, refletindo em um maior PCE. O resultado menos relevante da amostra do Nb₂S₂C, pode ser um indicativo de

uma má dissolução do aerogel no solvente, ou até a não formação do material 2D. O que também pode ter influenciado nos resultados é a integridade dos aerogéis, que podem já ter se oxidado ou degradado.

4.2 Caracterização das células solares com área aumentada

Segundo os testes para as células de maior área. Os principais parâmetros de coating, tanto os padrões que não se alteraram quanto os parâmetros que foram alterados para testes encontram-se sumarizados na Tabela 2 a seguir.

Tabela 2. Parâmetros utilizados nas células solares de perovskita do tipo p-i-n, com camada ativa depositada por *blade coating* com área de 0.5 cm².

Parâmetros							
Split	Annealing (°C)	Vol (uL)	Tblade (°C)	Vel (cm/s)	N ₂ (psi)	Ttinta (°C)	GAP (um)
1 (padrão reportado [1])	150	50	35	5	20	29	100
2		30					
3	100	50					
4	120						
5	120				30		
6	150				2x 20		
7	60/150				20		
8	60/150					60	

Outros parâmetros também foram variados durante os testes, tais como o *gap* (distância da faca para o substrato) e a velocidade de deslocamento da faca. Entretanto, a variação desses parâmetros resultou na não formação correta da camada perovskita, por esse motivo não foram

reportados neste relatório. Além disso, pode ser um grande indicativo que os valores reportados na literatura podem ser validos para o sistema utilizado neste projeto.

A seguir serão apresentados os resultados obtidos da análise desta etapa de desenvolvimento.

4.2.1 Camada de perovskita em substratos de maior área

A deposição da camada ativa, seguindo a formulação indicada, foi realizada em cima de substratos de vidro/FTO com a camada de HTL (NiOx/SAM) por *blade coating* buscando o ajuste dos parâmetros para posterior montagem das células solares. As medidas de difração de raios X dos testes relacionados a nova formulação encontrada indicaram uma completa cristalização das camadas, sem aparecimentos significantes dos picos de PbI_2 , o que pode ser relacionado com a formação completa da fase alfa da perovskita. A Figura 9 a seguir apresenta o difratograma destas amostras, juntamente com o substrato.

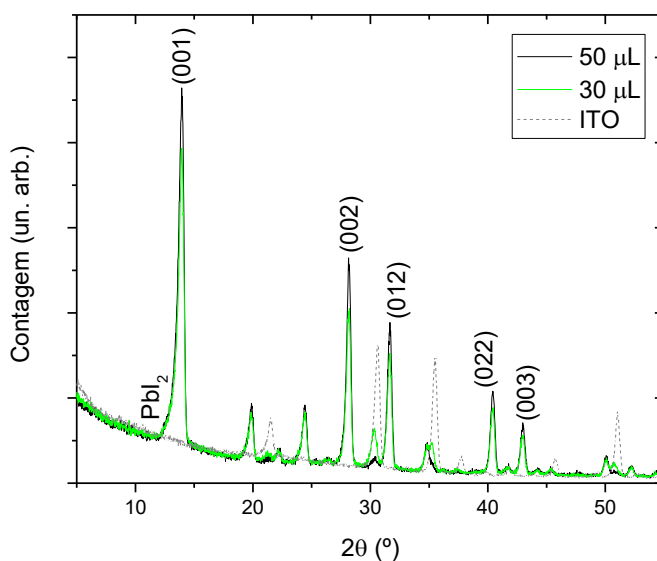


Fig 9. Difratograma de raios X do substrato de ITO, e das amostras de perovskita CsFA.

Além da difração de raios X foram realizadas medidas de transmitância e por meio delas foram calculados os espectros de absorção das amostras, apresentado na Figura 10.

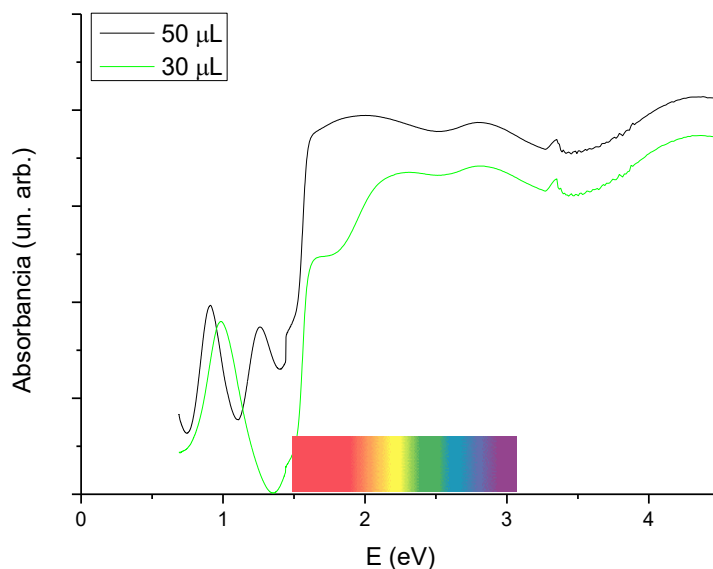


Fig 10. Espectro de absorbância obtido por meio da medida de transmitância realizada pelo espectrofotômetro UVVIs.

Diferenças nas franjas de interferência foram encontradas, o que pode ser o indicativo de mudanças no espalhamento da superfície ou pequenas diferenças de espessura. Por meio dos espectros de absorção e utilizando o plot de Tauc, foi estimado o *bandgap* das amostras, que não apresentou diferenças significativas nos valores, sendo encontrado 2.2 ± 0.2 eV para 50 µL e 1.9 ± 0.3 eV para 30 µL. Variações como a velocidade de deslocamento da faca e altura, também foram explorados, entretanto, não houve a formação correta da camada de perovskita.

Posteriormente células solares do tipo p-i-n foram confeccionadas e suas performances foram testadas por meio de curvas JV conforme será apresentado na seção a seguir.

4.2.2 Células solares

As células p-i-n seguiram a arquitetura descrita na seção de metodologia, com as únicas alterações sendo feita no *coating* da camada ativa, a fim de verificar a influência dos parâmetros na performance das células solares, buscando a condição ótima de recobrimento.

Primeiramente, diferentes volumes de solução foram testados a fim de se obter o recobrimento completo das amostras e minimizando resíduos. Primeiro foi utilizado 50 µL de volume da solução de perovskita. Ao perceber o volume excessivo que se formava ao final do *coating*, foi decidido reduzir o volume para 30 µL. As curvas JV dessas amostras se encontram na Figura 11 a seguir, e a Tabela resumando seus principais parâmetros.

Tabela 3. Dados de performance dos dispositivos obtidos por meio das curvas JV.

Split 1: 50 uL								
	Voc (V)	±	Jsc (mA/cm ²)	±	FF (%)	±	PCE (%)	±
Média	0,80	0,04	6,90	2,08	37	10	2,0	0,6
Melhor dispositivo	0,84		9,80		33		2,7	
Split 2: 30 uL								
	Voc (V)	±	Jsc (mA/cm ²)	±	FF (%)	±	PCE (%)	±
Média	0,75	0,20	7,19	1,67	36	5	2,0	0,8
Melhor dispositivo	0,86		8,73		39		2,9	

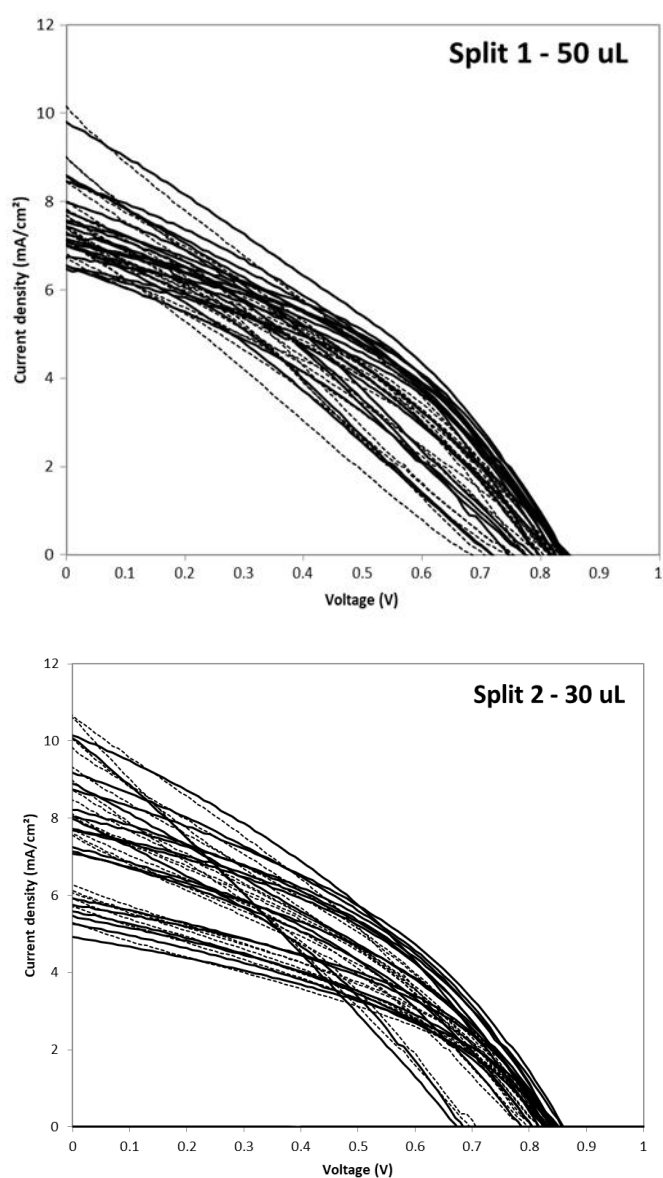


Fig 11. Curvas JV das primeiras amostras com área de 0,55 cm² obtidas por blade coating com diferentes volumes de solução para recobrimento.

Na Figura 12 a seguir é apresentado o *boxplot*, a fim de verificar a distribuição de valores dos diferentes dispositivos.

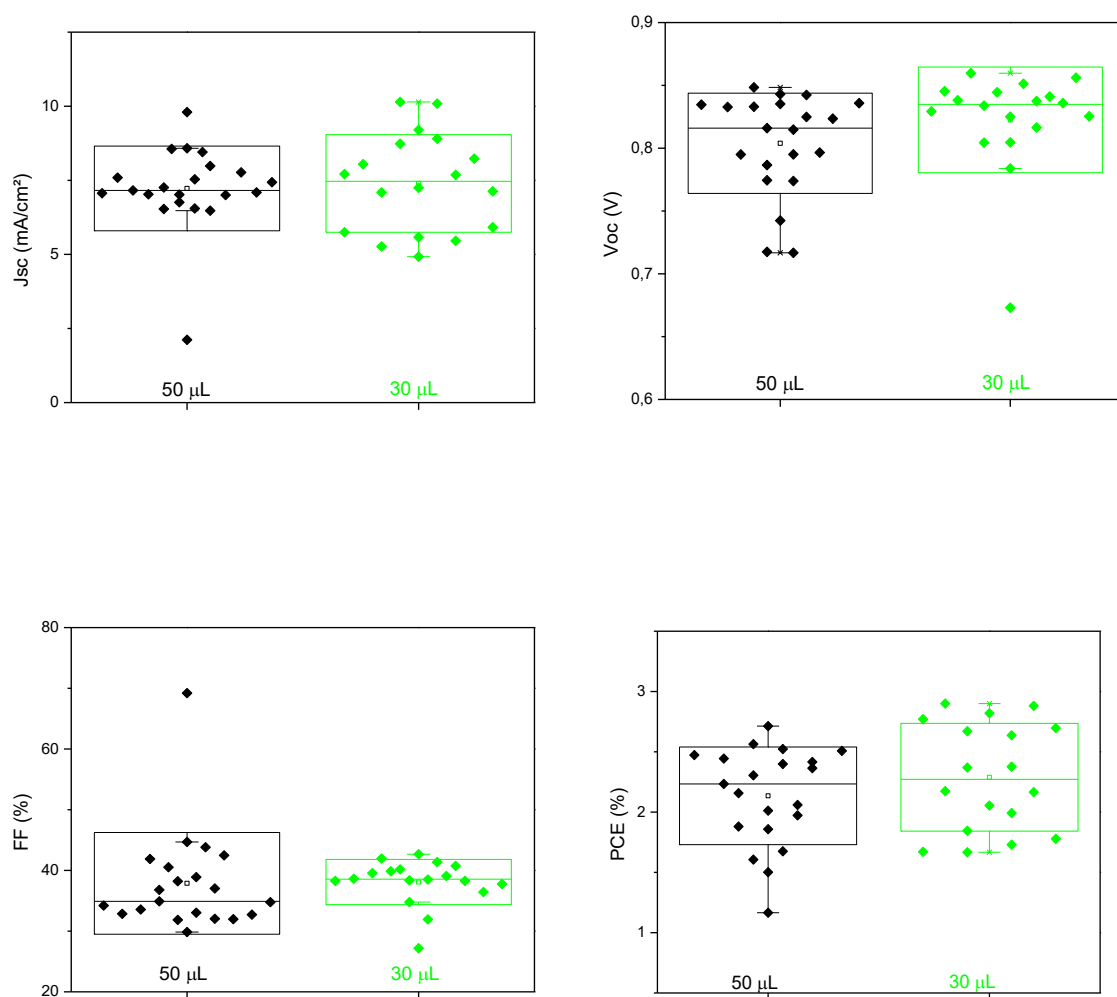


Fig 12. *Boxplot* representando a distribuição estatística dos principais parâmetros de cada célula solar produzida a diferentes volumes.

A alteração de volume não apresentou impacto significativo na performance das células solares. Dessa forma optou-se por seguir os experimentos utilizando 50 µL, a fim de garantir um melhor recobrimento superficial.

Na sequência, buscou-se alterações nos parâmetros do *coating* visando a melhoria da performance das células solares. Para isso a passagem da faca de nitrogênio, a temperatura da solução e do tratamento térmico pós deposição foram variados. A seguir são apresentadas as curvas JV, na Figura 13, e os respectivos parâmetros de caracterização nas Tabela 4.

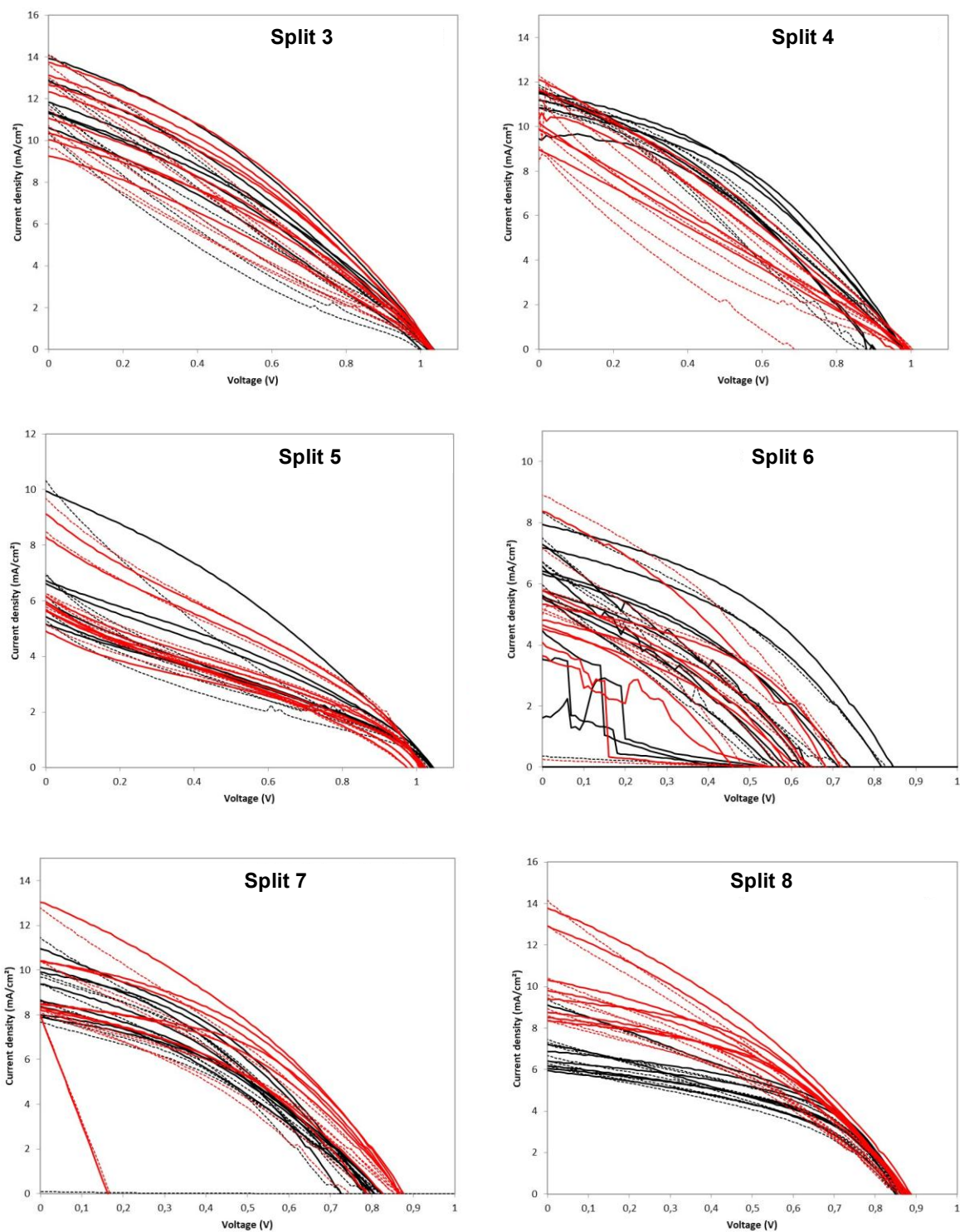


Fig 13. Curvas de corrente tensão medidas para as células solares com diferentes parâmetros utilizados no recobrimento por *blade coating*. Cada *split* corresponde a variação indicada na tabela 2, apresentada no início da seção.

Tabela 4. Valores referentes aos parâmetros característicos, obtidos por meio das curvas JV das células solares com diferentes condições de recobrimento por *blade coating*. Cada *split* corresponde a variação indicada na tabela 2, apresentada no início da seção.

Split 3: Annealing 100 °C								
	Voc (V)	±	Jsc (mA/cm ²)	±	FF (%)	±	PCE (%)	±
Média	1.02	0.01	11.33	2.13	33	2	3.9	0.9
Melhor dispositivo	1.03		13.74		35		5.0	
Split 4: Annealing 120 °C								
	Voc (V)	±	Jsc (mA/cm ²)	±	FF (%)	±	PCE (%)	±
Média	1.02	0.02	6.53	1.52	31	2	2.0	0.5
Melhor dispositivo	1.04		9.95		32		3.3	
Split 5: Annealing 120 °C – N ₂ : 30 psi								
	Voc (V)	±	Jsc (mA/cm ²)	±	FF (%)	±	PCE (%)	±
Média	0.94	0.10	10.58	1.35	32	6	3.2	0.9
Melhor dispositivo	0.98		11.18		42		4.6	
Split 6: N ₂ : Duas passadas								
	Voc (V)	±	Jsc (mA/cm ²)	±	FF (%)	±	PCE (%)	±
Média	0,69	0,07	6,61	1,19	36	5	1,6	0,5
Melhor dispositivo	0,84		7,94		41		2,7	
Split 7: Tinta ambiente - Annealing 60/150 °C								
	Voc (V)	±	Jsc (mA/cm ²)	±	FF (%)	±	PCE (%)	±
Média	0,82	0,05	9,48	1,43	39	3	3,0	0,5
Melhor dispositivo	0,87		13,05		34		3,9	
Split 8: Tinta 60 °C - Annealing 60/150 °C								
	Voc (V)	±	Jsc (mA/cm ²)	±	FF (%)	±	PCE (%)	±
Média	0,87	0,01	8,64	2,39	43	6	3,1	0,5
Melhor dispositivo	0,89		13,78		34		4,1	

Com as mudanças nas temperaturas de tratamento térmico, a performance das células solares já começou a apresentar melhoras, entretanto, a performance ainda está inferior ao esperado. A seguir, na Figura 14, são apresentados os *boxplots* destas amostras.

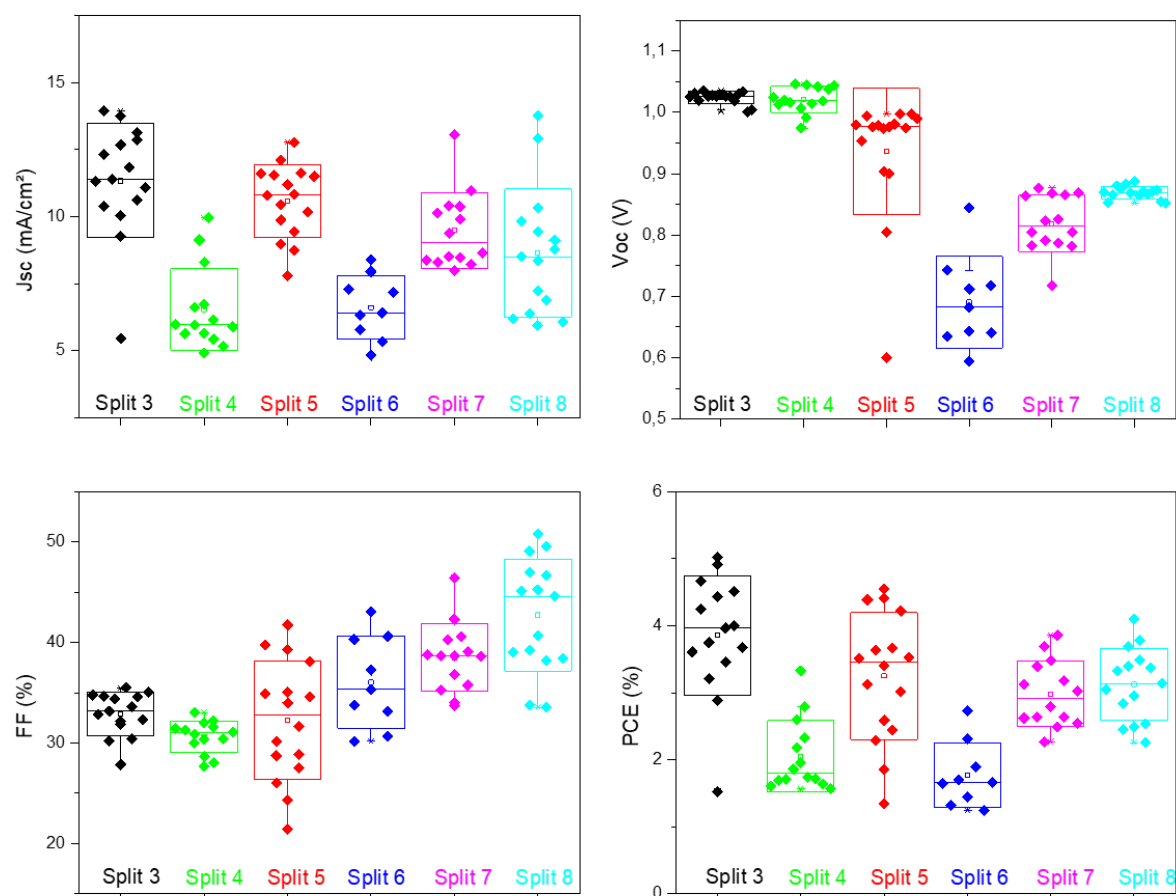


Fig 14. *Boxplots* representando a distribuição estatísticas das principais características dos dispositivos obtidos por meio das curvas de corrente tensão medidas para as células solares com diferentes parâmetros utilizados no recobrimento por *blade coating*. Cada *split* corresponde a variação indicada na tabela 2, apresentada no início da seção.

Apesar dos resultados inferiores ao encontrado na literatura, a cristalização da perovskita de maneira satisfatória juntamente com a possibilidade de aplicar a técnica *blade coating* para produção destes dispositivos é promissor, indicando que está célula solar de perovskita tem grande potencial para funcionamento, entretanto, mais investigações dos parâmetros de *coating*, e outras estratégias para otimização precisam ser testadas para alcançar a performance reportada na literatura, e em sequência implementar métodos para superá-la.

5. Conclusão

A incorporação de materiais bidimensionais do tipo TMCC na solução precursora de perovskita demonstrou potencial para modificar o desempenho das células solares, porém os resultados obtidos evidenciam limitações relacionadas à dispersão, integridade estrutural e reprodutibilidade dos materiais utilizados. Em particular, a ausência de confirmação estrutural clara dos aerogéis de $\text{Nb}_2\text{S}_2\text{C}$ e Nb_2C impõe restrições à interpretação dos efeitos observados, indicando a necessidade de caracterizações complementares e otimização do processo de dispersão.

No que se refere à escalabilidade, a deposição da camada ativa por *blade coating* possibilitou a fabricação de células solares com área aumentada e boa qualidade estrutural da perovskita. Entretanto, o desempenho elétrico alcançado permaneceu aquém do estado da arte, evidenciando que a simples transposição dos parâmetros reportados na literatura não é suficiente para garantir dispositivos eficientes em sistemas experimentais distintos.

De forma geral, os resultados obtidos indicam que tanto a modificação química da perovskita quanto a escalabilidade do processo de deposição apresentam desafios substanciais que requerem investigações adicionais. Estudos futuros devem priorizar o controle rigoroso da qualidade dos materiais 2D, a compreensão detalhada de seus efeitos nas interfaces e a otimização integrada das condições de deposição e arquitetura dos dispositivos, visando avanços reais na performance e na reprodutibilidade das células solares de perovskita.

6. Referências

- [1] H. Zhang, X. Ji, H. Yao, Q. Fan, B. Yu, J. Li, Review on efficiency improvement effort of perovskite solar cell, *Solar Energy* 233 (2022) 421–434. <https://doi.org/10.1016/j.solener.2022.01.060>.
- [2] J.Y. Kim, J.W. Lee, H.S. Jung, H. Shin, N.G. Park, High-Efficiency Perovskite Solar Cells, *Chem Rev* 120 (2020) 7867–7918. <https://doi.org/10.1021/acs.chemrev.0c00107>.
- [3] H. Min, D.Y. Lee, J. Kim, G. Kim, K.S. Lee, J. Kim, M.J. Paik, Y.K. Kim, K.S. Kim, M.G. Kim, T.J. Shin, S. Il Seok, Perovskite solar cells with atomically coherent interlayers on SnO₂ electrodes, *Nature* 598 (2021) 444–450. <https://doi.org/10.1038/s41586-021-03964-8>.
- [4] C. Yang, R. Zhi, M.U. Rothmann, F. Huang, Y.B. Cheng, W. Li, Toward Commercialization of Efficient and Stable Perovskite Solar Modules, *Solar RRL* 6 (2022). <https://doi.org/10.1002/solr.202100600>.
- [5] Q. Jiang, Y. Zhao, X. Zhang, X. Yang, Y. Chen, Z. Chu, Q. Ye, X. Li, Z. Yin, J. You, Surface passivation of perovskite film for efficient solar cells, *Nat Photonics* 13 (2019) 460–466. <https://doi.org/10.1038/s41566-019-0398-2>.
- [6] J. Dagar, K. Hirselandt, A. Merdasa, A. Czudek, R. Munir, F. Zu, N. Koch, T. Dittrich, E.L. Unger, Alkali Salts as Interface Modifiers in n-i-p Hybrid Perovskite Solar Cells, *Solar RRL* 3 (2019). <https://doi.org/10.1002/solr.201900088>.
- [7] S. Sun, C. Liao, A.M. Hafez, H. Zhu, S. Wu, Two-dimensional MXenes for energy storage, *Chemical Engineering Journal* 338 (2018) 27–45. <https://doi.org/10.1016/j.cej.2017.12.155>.
- [8] L. Yin, Y. Li, X. Yao, Y. Wang, L. Jia, Q. Liu, J. Li, Y. Li, D. He, MXenes for Solar Cells, *Nanomicro Lett* 13 (2021) 78. <https://doi.org/10.1007/s40820-021-00604-8>.
- [9] J.P.F. Assunção, H.G. Lemos, J.H.H. Rossato, G.L. Nogueira, J.V.M. Lima, S.L. Fernandes, R.K. Nishihora, R. V. Fernandes, S.A. Lourenço, D. Bagnis, S.F. Santos, C.F.O. Graeff, Interface passivation with Ti₃C₂T_x-MXene doped PMMA film for highly efficient and stable inverted perovskite solar cells, *J Mater Chem C Mater* 12 (2024) 562–574. <https://doi.org/10.1039/D3TC03810F>.
- [10] H.G. Lemos, J.H.H. Rossato, R.A. Ramos, J.V.M. Lima, L.J. Affonso, S. Trofimov, J.J.I. Michel, S.L. Fernandes, B. Naydenov, C.F.O. Graeff, Electron transport bilayer with cascade energy alignment based on Nb₂O₅-Ti₃C₂ MXene/TiO₂ for efficient perovskite solar cells, *J Mater Chem C Mater* 11 (2023) 3571–3580. <https://doi.org/10.1039/D3TC00022B>.
- [11] A. Majed, M. Kothakonda, F. Wang, E.N. Tseng, K. Prenger, X. Zhang, P.O.Å. Persson, J. Wei, J. Sun, M. Naguib, Transition Metal Carbo-Chalcogenide “TMCC:” A New Family of 2D Materials, *Advanced Materials* 34 (2022). <https://doi.org/10.1002/adma.202200574>.
- [12] A. Jaffrès, M. Othman, F. Saenz, A. Hessler-Wyser, Q. Jeangros, C. Ballif, C.M. Wolff, Blade-coating of high crystallinity cesium-formamidinium perovskite formulations. *ACS Applied Materials & Interfaces*, 16(28), (2024). <https://doi.org/10.1021/acsami.4c04706>.