

UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO  
ESCOLA DE ENGENHARIA DE SÃO CARLOS

GUILHERME DA SILVA MIRANDA

**Preparação de Células Fotovoltaicas Orgânicas a partir de solventes “verdes”**

São Carlos/SP

2019

GUILHERME DA SILVA MIRANDA

**Preparação de Células Fotovoltaicas Orgânicas a partir de solventes “verdes”**

Trabalho de Graduação apresentado a Escola de  
Engenharia de São Carlos da Universidade de São Paulo  
para obtenção do título de Engenheiro Ambiental

Orientadora  
Drª. Débora Terezia Balogh

São Carlos/SP

2019

AUTORIZO A REPRODUÇÃO TOTAL OU PARCIAL DESTE TRABALHO,  
POR QUALQUER MEIO CONVENCIONAL OU ELETRÔNICO, PARA FINS  
DE ESTUDO E PESQUISA, DESDE QUE CITADA A FONTE.

Ficha catalográfica elaborada pela Biblioteca Prof. Dr. Sérgio Rodrigues Fontes da  
EESC/USP com os dados inseridos pelo(a) autor(a).

M672p      Miranda, Guilherme da Silva  
                Preparação de Células Fotovoltaicas Orgânicas a  
                partir de solventes "verdes" / Guilherme da Silva  
                Miranda; orientador Débora Terezia Balogh. São Carlos,  
                2019.

Monografia (Graduação em Engenharia Ambiental) --  
Escola de Engenharia de São Carlos da Universidade de  
São Paulo, 2019.

1. eletrônica orgânica. 2. células solares. 3.  
energia renovável. 4. polímeros semicondutores. 5.  
solventes verdes. I. Título.

# FOLHA DE JULGAMENTO

Candidato(a): **Guilherme da Silva Miranda**

Data da Defesa: 01/11/2019

Comissão Julgadora:

Resultado:

**Débora Terezia Balogh (Orientador(a))**

Aprovado

**Débora Gonçalves**

APROVADO

**Frederico Fábio Mauad**

Aprovado.

**Prof. Dr. Marcelo Zaiat**

Coordenador da Disciplina 1800091- Trabalho de Graduação

## **AGRADECIMENTOS**

À Débora Terezia Balogh, pela orientação, pela paciência e pela oportunidade de pesquisa, aprendizado e crescimento profissional e acadêmico.

Ao Roberto Mendonça Faria, pela orientação ao longo dos três anos de iniciação científica.

Ao Bruno Bassi Millan Torres e à Livia Maria de Castro Sousa, pelos ensinamentos e pela solicitude em me acompanhar ao longo das minhas pesquisas.

A todo o Grupo de Polímeros ‘Prof. Bernhard Gross’ do Instituto de Física de São Carlos (IFSC-USP), pelos ensinamentos e contribuições à pesquisa.

À minha família (em especial à minha mãe), que, apesar de todas as dificuldades, me apoiou incondicionalmente e tornou meu sonho de ingressar e me graduar na USP possível.

A todos os meus professores, pelos ensinamentos dados dentro e fora da sala de aula.

À República Varanda, uma segunda família que conquistei ao longo da minha permanência em São Carlos, por terem me acolhido tão bem nessa cidade e proporcionado uma das melhores vivências que eu poderia ter.

Aos amigos que fiz na USP São Carlos e UNICAMP, por terem me proporcionado outros inúmeros aprendizados e vivências inesquecíveis ao longo desse ciclo.

Aos meus queridos colegas da Suzano S/A (principalmente à equipe de Sustentabilidade Institucional), pela amizade, pelo apoio e pelos inúmeros ensinamentos que me deram no início da minha carreira profissional e fase final do meu curso de graduação.

Ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico – CNPq pelo Auxílio à Pesquisa Regular (Processos nº 152044/2015-9, 144679/2016-7 e 157742/2017-2).

À Universidade de São Paulo pelas bolsas institucionais de iniciação científica concedidas, vigências 2015/2016, 2016/2017 e 2017/2018, e pelas políticas de permanência estudantil, sem as quais essa conquista não teria sido possível.

## **RESUMO**

**MIRANDA, G. S. Preparação de Células Fotovoltaicas Orgânicas a partir de solventes “verdes”.** 2019. Monografia (Trabalho de Conclusão de Curso em Engenharia Ambiental) - Escola de Engenharia de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2019.

Na construção de dispositivos fotovoltaicos orgânicos, a preparação da camada ativa envolve a dissolução de um polímero conjugado, geralmente em solventes aromáticos derivados de benzeno e/ou clorados e posterior processamento na forma de filmes finos. Estes solventes possuem elevado impacto ambiental e ocupacional e sua substituição por solventes menos nocivos é imperativa para uma futura produção em larga escala. Logo, o objetivo deste trabalho foi estudar a preparação de células fotovoltaicas orgânicas (OPVs) mistas de heterojunção (com derivado do fulereno) a partir de solventes alternativos aos convencionais, os efeitos desses solventes sobre o desempenho dos dispositivos e um protótipo de células solares utilizando o solvente que apresentou os melhores resultados. Utilizou-se os solventes ciclohexanona, 2-metiltetrahidrofurano, ciclopentilmetiléter, 2-metilciclohexanona, 2-secbutilciclohexanona e 1,2-diclorobenzeno na preparação de dispositivos de camada mista (P3HT:PCBM), sendo o último solvente usado como padrão para comparação com dispositivos convencionais. Para os solventes ciclohexanona (com substrato à temperatura ambiente) e ciclopentilmetiléter (substrato a 120 °C), foram obtidos os valores de eficiência (PCE) mais altos quando comparados ao solvente convencional: 2,2% para ciclohexanona, 1,9% para 2-sec-butilciclohexanona e 3,4% para o solvente convencional. Logo, os solventes ciclohexanona e ciclopentilmetiléter despontaram como potenciais alternativas aos solventes comumente utilizados para a preparação de OPVs. Para o protótipo de células solares, foi constatada a geração de fotocorrente, porém, a voltagem (Voc) e o fator de preenchimento (FF) obtidos estiveram distantes do esperado. Logo, sugere-se a otimização da arquitetura do protótipo, com o aumento da região dos contatos elétricos, para a obtenção de maiores eficiências. Destaca-se que a pesquisa foi financiada pelo Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico – CNPq (Processos nº 152044/2015-9, 144679/2016-7 e 157742/2017-2).

Palavras chave: eletrônica orgânica, células solares, polímeros semicondutores, solventes verdes.

## **ABSTRACT**

**MIRANDA, G. S. Preparation of Organic Photovoltaic Cells Using “Green” Solvents.** 2019. Monograph (Undergraduate Work in Environmental Engineering) - São Carlos School of Engineering, University of São Paulo, São Carlos, 2019.

In the development of organic photovoltaic devices, the preparation of the active layer involves the dissolution of a conjugated polymer, usually in benzene and / or chlorinated aromatic solvents and further processing in the form of thin films. These solvents have a high environmental and occupational impact and their replacement with less harmful solvents is imperative for future large-scale production. Thus, this work objective was to study the preparation of heterojunction mixed (with fullerene derivative) organic photovoltaic cells (OPVs) using alternative solvents rather than those commonly used for this purpose, the effects of these solvents on device performance and the preparation of a solar cells prototype using the solvent that gave the best results. Cyclohexanone, 2-methyltetrahydrofuran, cyclopentylmethyl ether, 2-methylcyclohexanone, 2-secbutylcyclohexanone and 1,2-dichlorobenzene solvents were used in the preparation of mixed layer devices (P3HT: PCBM), the latter being the conventional solvent used for comparison with the alternative ones. For cyclohexanone (with substrate at room temperature) and cyclopentylmethyl ether (120 ° C substrate) solvents, higher efficiency values (PCE) were obtained when compared to conventional solvent: 2.2% for cyclohexanone, 1.9% for cyclopentyl methyl ether and 3.4% for conventional solvent. Therefore, cyclohexanone and cyclopentyl methyl ether solvents emerged as potential alternatives to the solvents commonly used for the preparation of OPVs. For the solar cells prototype, photocurrent generation was verified, however, the voltage (Voc) and fill factor (FF) obtained were far from the expected. Thus, it is suggested to optimize the prototype architecture with the increase of the region of the electrical contacts to obtain better efficiencies. It is noteworthy that the research was funded by the National Council for Scientific and Technological Development - CNPq (Processes n° 152044 / 2015-9, 144679 / 2016-7 and 157742 / 2017-2).

Keywords: organic electronics, solar cells, semiconductor polymers, green solvents.

## SUMÁRIO

1.	Introdução e Justificativa .....	15
2.	Objetivos .....	17
2.1.	Objetivo Geral.....	17
2.2.	Objetivos Específicos .....	17
3.	Revisão de literatura.....	18
3.1.	Fontes Renováveis de Energia .....	18
3.1.1.	Energia Solar .....	19
3.2.	Células fotovoltaicas .....	21
3.2.1.	Células Fotovoltaicas Orgânicas (OPVs) .....	23
3.3.	Polímeros conjugados (P3HT) .....	25
3.4.	Uso de solventes na preparação de OPVs.....	27
3.4.1.	Parâmetros de Solubilidade de Hansen .....	30
4.	Materiais e métodos .....	31
4.1.	Materiais .....	31
4.2.	Métodos .....	33
4.2.1.	Estudo preliminar da formação das soluções e dos filmes .....	33
4.2.2.	Estudo de dispositivos de camada simples .....	36
4.2.3.	Estudo de dispositivos de heterojunção.....	42
4.2.4.	Preparação de protótipo de célula solar .....	45
5.	Resultados e Discussão .....	46
5.1.	Estudo preliminar da preparação das soluções .....	46
5.2.	Estudo preliminar da preparação dos filmes .....	55
5.3.	Estudo de dispositivos de camada simples .....	59
5.4.	Estudo de dispositivos de heterojunção .....	66
5.5.	Preparação de protótipo de célula solar .....	71
6.	Conclusões.....	75
7.	Bibliografia.....	77
	ANEXO A – CICLOHEXANONA.....	84
	ANEXO B – XILENO.....	93
	ANEXO C – 2-METILCICLOHEXANONA .....	102
	ANEXO D – 2-SECBUTILCICLOHEXANONA .....	110
	ANEXO E – 2-METILTETRAHIDROFURANO .....	121
	ANEXO F – CICLOPENTILMETILÉTER .....	129

## ÍNDICE DE FIGURAS

Figura 1. Seção transversal de um dispositivo composto de camadas de óxido de índio e estanho (ITO), polímero, e alumínio (ITO/Polímero/Al), mostrando a região ativa do polímero.....	16
Figura 2. Esquema de um painel fotovoltaico .....	21
Figura 3. Diagrama esquemático da estrutura de heterojunção em massa e da estrutura energética do sistema doador-aceitador de OPVs dessa categoria .....	25
Figura 4. Princípios de funcionamento de uma típica célula solar de heterojunção composta pelo conjunto P3HT:PCBM .....	27
Figura 5. Esfera de solubilidade do P3HT obtida a partir dos parâmetros de Hansen para a seleção dos solventes alternativos analisados neste estudo .....	34
Figura 6. Etapas envolvidas no processo de decapagem do ITO .....	37
Figura 7. Estrutura final das células preparadas neste trabalho.....	40
Figura 8. Curva J-V característica para um dispositivo fotovoltaico no escuro (curva superior) e sob iluminação (curva inferior), destacando geometricamente o significado de Pmáx, Pexp e FF.....	41
Figura 9. Filme preparado a partir da deposição de solução de P3HT:PCBM em ciclopentilmetiléter ( $20\text{ mg.mL}^{-1}$ , 1:1) com substrato a temperatura ambiente no momento da deposição .....	43
Figura 10. Estrutura final das células preparadas neste trabalho. Fonte: Elaborada pelo autor.....	45
Figura 11. Máscaras utilizadas nos processos de fotolitografia e metalização do protótipo de células solares em série.....	46
Figura 12. Imagem das soluções de P3HT dissolvido em xileno (à direita) e ciclohexanona (à esquerda) de concentração $0,01\text{mg/mL}$ .....	46
Figura 13. Soluções de P3HT dissolvido em 2-metilciclohexanona (1), 2-secbutilciclohexanona (2), 2-metiltetrahidrofurano (3) e ciclopentilmetiléter (4) de concentração $0,01\text{mg/mL}$ .....	47
Figura 14. Absorbância do P3HT em diferentes solventes a $0,01\text{mg/mL}$ para diferentes comprimentos de onda.....	48
Figura 15. Espectro eletromagnético com comprimento de onda máximo das soluções de P3HT em diferentes solventes a $0,01\text{mg/mL}$ em destaque.....	49

Figura 16. Absorbância da solução de ciclohexanona + P3HT 0,01mg/ml para diferentes temperaturas (Espectrofotômetro Ocean de fibra óptica).....	50
Figura 17. Absorbância da solução de Xileno + P3HT a 0,01mg/ml para diferentes temperaturas (Espectrofotômetro de fibra óptica).....	50
Figura 18. Absorbância da solução de 2-metilciclohexanona + P3HT a 0,01mg/ml para diferentes temperaturas (Espectrofotômetro de fibra óptica) .....	50
Figura 19. Absorbância da solução de 2-secbutilciclohexanona + P3HT a 0,01 mg/mL para diferentes comprimentos de onda, em diferentes temperaturas (Espectrofotômetro Ocean de fibra óptica).....	50
Figura 20. Absorbância da solução de 2-metiltetrahidrofurano + P3HT a 0,01 mg/mL para diferentes comprimentos de onda, em diferentes temperaturas (Espectrofotômetro Ocean de fibra óptica).....	51
Figura 21. Absorbância da solução de ciclopentilmetyléter + P3HT a 0,01 mg/mL para diferentes comprimentos de onda, em diferentes temperaturas (Espectrofotômetro Ocean de fibra óptica).....	51
Figura 22. Ciclohexanona +P3HT 0,01 mg/ml - Comprimento de onda de máxima absorbância para diferentes temperaturas (espectrofotômetro de fibra óptica).....	52
Figura 23. 2-Metilciclohexanona + P3HT 0,01 mg/mL - Comprimento de onda de máxima absorbância para diferentes temperaturas (espectrofotômetro de fibra óptica)	52
.....	52
Figura 24. Xileno +P3HT 0,01 mg/mL - Comprimento de onda de máxima absorbância para diferentes temperaturas (espectrofotômetro de fibra óptica). ....	52
Figura 25. 2-Secbutilciclohexanona + P3HT 0,01 mg/mL - Comprimento de onda de máxima absorbância para diferentes temperaturas (espectrofotômetro de fibra óptica)	52
.....	53
Figura 26. 2-Metiltetrahidrofurano + P3HT 0,01 mg/mL - Comprimento de onda de máxima absorbância para diferentes temperaturas (espectrofotômetro de fibra óptica).	53
.....	53
Figura 27. Ciclopentilmetyléter + P3HT 0,01 mg/mL - Comprimento de onda de máxima absorbância para diferentes temperaturas (espectrofotômetro de fibra óptica)	53
.....	54
Figura 28. Absorbância da solução de ciclohexanona + P3HT:PCBM a 0,05 mg/mL para diferentes comprimentos de onda, em diferentes temperaturas (Espectrofotômetro Ocean de fibra óptica).....	54

Figura 29. Absorbância da solução de ciclohexanona + P3HT:PCBM 0,05 mg/mL para diferentes temperaturas (Espectrofotômetro de fibra óptica) .....	55
Figura 30. Filmes formados a partir de soluções de P3HT em ciclohexanona e xileno. Na imagem à esquerda, filmes de diferentes espessuras (o mais espesso embaixo) de P3HT dissolvido em ciclohexanona.....	56
Figura 31. Filmes formados a partir de soluções de P3HT em 2-secbutilciclohexanona (1), 2-metilciclohexanona (2), 2-metiltetrahidrofurano (3) e ciclopentilmetyléter (4) à concentração de 10mg/mL.....	56
Figura 32. Absorbância normalizada de filmes de P3HT preparados a partir de soluções em diferentes solventes a 10 mg/mL para diferentes comprimentos de onda (Espectrofotômetro UV-vis).....	57
Figura 33. Imagens microscópicas dos filmes formados por soluções de P3HT em ciclohexanona (1), xileno (2), 2-metilciclohexanona (3), 2-secbutilciclohexanona (4), 2-metiltetrahidrofurano (5) e ciclopentilmetyléter (6) à concentração de 10 mg/mL .....	58
Figura 34. Dispositivos fotovoltaicos orgânicos preparados a partir de diferentes solventes .....	60
Figura 35. Dispositivos fotovoltaicos orgânicos preparados a partir de diferentes solventes .....	60
Figura 36. Curvas J-V de células solares de camada ativa preparada a partir de solução de P3HT em 1,2-diclorobenzeno a 30 mg/mL .....	61
Figura 38. Curvas J-V de células solares de camada ativa preparada a partir de solução de P3HT em 2-metiltetrahidrofurano a 20 mg/mL.....	61
Figura 37. Curvas J-V de células solares de camada ativa preparada a partir de solução de P3HT em ciclohexanona a 20 mg/mL .....	61
Figura 39. Curvas J-V de células solares de camada ativa preparada a partir de solução de P3HT em ciclopentilmetyléter.....	61
Figura 40. Curvas J-V de células solares de camada ativa preparada a partir de solução de P3HT em xileno.....	62
Figura 41. Curvas J-V de células solares de camada ativa preparada a partir de solução de P3HT em 2-metilciclohexanona (substrato à temperatura ambiente) .....	62
Figura 42. Curvas J-V de células solares de camada ativa preparada a partir de solução de P3HT em 2-metilciclohexanona (substrato a 120 °C) .....	62
Figura 43. Curvas J-V de células solares de camada ativa preparada a partir de solução de P3HT em 2-secbutilciclohexanona .....	62

Figura 44. Dispositivos fotovoltaicos orgânicos preparados a partir da mistura P3HT:PCBM em 1,2-diclorobenzeno e ciclohexanona. 1,2-Diclorobenzeno abaixo e ciclohexanona acima.....	66
Figura 45. Dispositivos fotovoltaicos orgânicos preparados a partir da mistura P3HT:PCBM em cada um dos solventes.....	67
Figura 46. Curvas J-V de células solares com camadas ativas preparadas a partir de solução de P3HT em 1,2-diclorobenzeno.....	68
Figura 48. Curvas J-V de células solares com camadas ativas preparadas a partir de solução de P3HT:PCBM em 2-metiltetrahidrofurano (substrato a 120°C).....	68
Figura 47. Curvas J-V de células solares com camadas ativas preparadas a partir de solução de P3HT em ciclohexanona.....	68
Figura 49. Curvas J-V de células solares com camadas ativas preparadas a partir de solução de P3HT:PCBM em 2-metiltetrahidrofurano (substrato à temperatura ambiente). .....	68
Figura 50. Curvas J-V de células solares com camadas ativas preparadas a partir de solução de P3HT:PCBM em 2-metilciclohexanona (substrato à temperatura ambiente). .....	69
Figura 52. Curvas J-V de células solares com camadas ativas preparadas a partir de solução de P3HT:PCBM em ciclopentilmetiléter (substrato a 120°C) .....	69
Figura 51. Curvas J-V de células solares com camadas ativas preparadas a partir de solução de P3HT:PCBM em 2-metilciclohexanona (substrato a 120°C).....	69
Figura 53. Curvas J-V de células solares com camadas ativas preparadas a partir de solução de P3HT:PCBM em 2-sebutilciclohexanona (substrato à temperatura ambiente) .....	69
Figura 54. Resultado da tentativa de deposição da camada ativa do protótipo de células solares com substrato a temperatura ambiente .....	72
Figura 55. Resultado da tentativa de deposição da camada ativa do protótipo de células solares com solução a 130°C e substrato a temperatura ambiente .....	73
Figura 56. Protótipo de células solares sob iluminação do simulador solar.....	74
Figura 57. Curvas J-V do protótipo de células solares com camadas ativas preparadas a partir de solução de P3HT:PCBM em ciclohexanona 20mg.mL <sup>-1</sup> (substrato a 120°C) .....	74

## ÍNDICE DE TABELAS

Tabela 1. Parâmetros adotados para o preparo das soluções de P3HT nos solventes e deposição dos filmes.....	39
Tabela 2. Parâmetros adotados para o preparo das soluções de P3HT:PCBM nos solventes e deposição dos filmes.....	44
Tabela 3. Variação dos valores de corrente de curto circuito (Jsc) e potencial de circuito aberto (Voc), fator de preenchimento (FF) e eficiência (PCE) máximos e valor médio de espessura de cada tipo de dispositivo de camada simples preparado a partir de diferentes solventes. ....	64
Tabela 4. Variação dos valores de corrente de curto circuito (Jsc) e potencial de circuito aberto (Voc), fator de preenchimento (FF) e eficiência (PCE) máximos e valor médio de espessura de cada tipo de dispositivo de heterojunção preparado a partir de diferentes solventes. ....	70

## **1. INTRODUÇÃO E JUSTIFICATIVA**

Em decorrência da escassez de recursos naturais, dos níveis alarmantes de poluição, dos efeitos do aquecimento global e da entrada em vigor do Acordo de Paris, governos, empresas e ONGs tem dedicado cada vez mais esforços em medidas de redução de emissões de gases do efeito estufa e maximização de oportunidades relacionadas à eficiência energética (PETRICHENKO; ÜRGE-VORSATZ; CABEZA, 2019). Nesse sentido, segundo Roulet (2000), “para evitar os efeitos desastrosos das mudanças climáticas, seria necessário reduzir as emissões de dióxido de carbono pela metade até 2050, o que exige mudanças radicais em direção a uma economia de baixo carbono, com a redução da dependência do uso de fontes fósseis de energia paralelamente a um aumento do uso de fontes renováveis, tal como a energia solar”.

Diante desse contexto, a eletrônica orgânica tem apresentado grandes perspectivas no cenário tecnológico, atraindo atenção das comunidades científica e empresarial, interessadas nas amplas aplicações de novos produtos que poderiam ser desenvolvidos com base nessa nova tecnologia. Dentre as aplicações possíveis desse ramo da eletrônica, a construção de dispositivos fotovoltaicos orgânicos (OPV) tem obtido grande destaque no âmbito científico, tratando-se de uma possível alternativa para a geração de energia mais limpa e sustentável. Além disso, devido à possibilidade de serem maleáveis e ao fato de serem leves, tais células podem ter aplicações mais inovadoras e diversas que as células rígidas inorgânicas (SØNDERGAARD et al., 2012).

De forma geral, um dispositivo fotovoltaico qualquer converte energia luminosa em energia elétrica, sendo composto de uma camada ativa responsável pela sua fotossensibilidade, situada entre dois eletrodos com diferentes funções trabalho (SILVA, 2010). As interfaces entre essa camada - formada por um semicondutor - e o metal correspondem a uma região de alto campo elétrico onde ocorre a dissociação do excíton (par de portadores de carga, formado por elétron e ‘buraco’, ligados pela atração de Coulomb) (HE et al., 2012). Nas células orgânicas, o material semicondutor que compõe a camada ativa se trata de um composto orgânico (geralmente um polímero conjugado). A preparação dessa camada é dependente do uso de solventes, os quais, na grande maioria, são aromáticos derivados do benzeno e/ou clorados, tais como tolueno, ortodiclorobenzeno e clorofórmio (LIANG et al., 2010). Tais solventes, em pequena escala, até podem ser manipulados sem grandes desafios. Todavia, até mesmo em escala piloto,

o uso desses solventes seria bastante problemático, tendo em vista o elevado impacto ambiental e ocupacional que possuem (LU; YU, 2014).

Poucas pesquisas têm sido feitas para se estudar o uso de solventes menos impactantes na construção de dispositivos fotovoltaicos orgânicos ou OPVs na sigla em inglês. (PARK et al., 2011). Nesse contexto, este trabalho visa justamente investigar o uso de solventes mais ‘verdes’ nesse processo como alternativa aos solventes comumente utilizados e que proporcionem o desenvolvimento de OPVs com eficiência comparável à destes. Buscou-se então confeccionar dispositivos de camada simples e mista de um polímero conjugado, o poli-(3-hexiltiofeno), P3HT, utilizando cada um dos solventes alternativos estudados no trabalho.

Para a preparação de OPVs de camada mista, utiliza-se um sistema de heterojunção (mistura de materiais diferentes na mesma camada) bastante recorrente na literatura: a mistura P3HT:PCBM, ou seja, o poli-(3-hexiltiofeno) e um fulereno solúvel derivado do C<sub>60</sub>. Essa mistura é apropriada à dissociação dos excitons gerados nas cadeiras poliméricas pelos fótons absorvidos, já que o PCBM, sendo muito eletronegativo, captura o elétron do exciton antes do processo natural de recombinação (COUTINHO, 2011). A Figura 1 ilustra um modelo de dispositivo fotovoltaico simples contendo um eletrodo de alumínio.

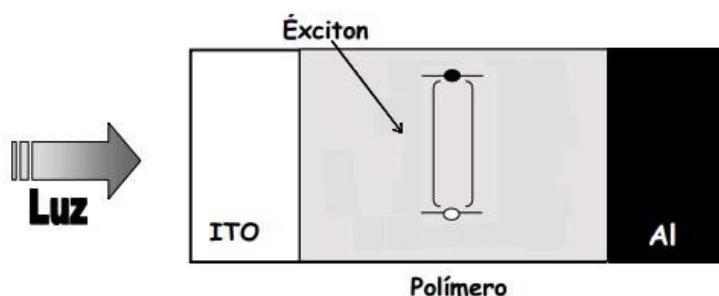


Figura 1. Seção transversal de um dispositivo composto de camadas de óxido de índio e estanho (ITO), polímero, e alumínio (ITO/Polímero/Al), mostrando a região ativa do polímero. Fonte: Adaptada de .

## 2. OBJETIVOS

### 2.1. Objetivo Geral

Estudar a utilização de solventes alternativos ao clorados e derivados de benzeno, selecionados a partir dos parâmetros de solubilidade de Hansen, na preparação de dispositivos fotovoltaicos orgânicos do tipo heterojunção de volume (BHJ – *Bulk Heterojunction*).

### 2.2. Objetivos Específicos

- ✓ Estudar a formação de filmes finos de poli(3-hexiltiofeno) (P3HT) com os diferentes solventes alternativos, de modo a avaliar a possibilidade de preparação da camada ativa de OPVs a partir desses componentes;
- ✓ Preparar dispositivos fotovoltaicos de camada simples de P3HT com os solventes selecionados, de modo a avaliar a potencialidade do uso desses solventes na preparação de dispositivos fotovoltaicos;
- ✓ Preparar dispositivos fotovoltaicos mistos com derivado de fulereno utilizando os solventes selecionados;
- ✓ Preparar um protótipo de célula solar.

### **3. REVISÃO DE LITERATURA**

#### **3.1. Fontes Renováveis de Energia**

Da forma como se desenvolveu, a sociedade humana depende de quantidade cada vez maior de energia para subsistir. Sendo assim, considera-se a geração, a transformação e o aproveitamento energético elementos imprescindíveis para o desenvolvimento socioeconômico dos indivíduos em seus territórios, o que, se não for feito de forma estratégica e consciente, pode desencadear consequências desastrosas ao meio ambiente (CALIJURI *et. al.*, 2013).

Segundo Stevović *et al.* (2019, apud SCHRAMSK *et al.*, 2015), pressupondo-se que sigamos o mesmo ritmo de consumo de combustíveis fósseis, entende-se que os níveis das reservas remanescentes desses combustíveis na Terra nos permitirão explorar petróleo somente por mais 46 anos, gás natural por mais 58 anos e carvão por mais 150 anos. Em adição, o crescimento populacional e o desenvolvimento econômico geram uma demanda cada vez maior de energia (IEA, 2013). Nesse contexto, diante de um cenário de limitação de recursos, níveis de poluição alarmantes e mudanças climáticas, o setor energético passa a receber atenção cada vez maior, por ser conhecido como o principal causador de efeitos adversos diante dessa situação de crise. Segundo dados da International Energy Agency (IEA, 2017), em 2017, o setor energético mundial, sozinho, foi responsável por 68% das emissões globais de gases do efeito estufa.

Assim, a substituição do uso de combustíveis fósseis por fontes menos impactantes tem sido pautada como a principal solução a ser adotada pelo setor energético, fazendo com que a utilização de fontes renováveis tenha um papel de grande destaque nesse contexto (LOPES, 2018). Diante desse cenário, a partir do Acordo de Paris, em 2015, 189 países assumiram políticas e metas públicas para redução de emissões de gases do efeito estufa e aumento da participação de fontes renováveis em suas matrizes energéticas, como uma forma de reunir esforços para manter o aquecimento global bem abaixo de 2 °C e limitar seu aumento até 1.5 °C (PETRICHENKO; ÜRGE-VORSATZ; CABEZA, 2019). Em Portugal, por exemplo, 31% da energia consumida em 2020 terá de ser renovável (o que representaria um aumento de 2,5% em relação a 2016). Os Países Baixos, por sua vez, terão que aumentar a sua percentagem de 6% em 2016 para 14% em 2020. (UE, 2017).

Nesse sentido, um estudo conduzido por Lopes (2018) buscou analisar o impacto que os combustíveis fósseis, as fontes renováveis e as fontes nucleares utilizados para produção de energia elétrica têm nas emissões de CO<sub>2</sub> per capita de 10 países considerados como referência em termos econômicos, para um horizonte de tempo de 1991 a 2014. Os resultados obtidos mostraram que a utilização de combustíveis fósseis estimulam um aumento das emissões, ao contrário das fontes renováveis, que, por sua vez, contribuem para a sua redução.

Sendo assim, a matriz energética mundial necessita passar por uma grande mudança, com aumento significativo de fontes renováveis na sua composição. (VICHI; MANSOR, 2009). Diante desse cenário, o Brasil tem um grande destaque: somando diversas fontes de energia, as fontes renováveis (como biomassa, hidrelétrica, eólica e solar, dentre outras) totalizam 45,3% de nossa matriz, comparada à média internacional de 13,7%. Em adição, no que se refere à participação de renováveis na matriz elétrica, atingiu-se o valor de 83,3% em 2018 (BRASIL, 2019).

### *3.1.1. Energia Solar*

Segundo Grätzel (2007, p. 12 apud CALIJURI, 2013, p. 677), “o Sol emite aproximadamente 100.000 TW de energia para o planeta Terra, valor aproximadamente 10 mil vezes maior que a taxa de consumo atual de todo o planeta (estimada em 13 TW)”. Em outras palavras, a quantidade de energia que o Sol envia à Terra em uma hora e 25 minutos equivale à quantidade que a Terra consome em um ano (STEVOVIĆ et. al, 2019). Assim, por ser uma das fontes mais limpas de energia e, portanto, uma potencial alternativa para a redução do quadro de riscos ambientais (além de seu potencial baixo custo e sua abundância), a energia solar adquiriu atenção substancial de pesquisadores notáveis neste século, de modo que uma grande multiplicidade de tecnologias tem sido desenvolvida para o aproveitamento desse tipo de energia nos setores doméstico, comercial e industrial (CALIJURI et al., 2013; WAHAB et al., 2019).

A radiação solar pode ser utilizada, de maneira direta, de duas formas: (a) como fonte de energia térmica, para aquecimento de ambientes e de fluidos por condução e convecção e para geração de potência mecânica ou elétrica; e (b) pode ser convertida diretamente em energia elétrica, por meio de efeitos sobre materiais, tais como o termoelétrico e o fotovoltaico (SILVA, 2015 apud ANEEL, 2005). Segundo relatório da

International Energy Agency (IEA) de 2019, desde 1990, a utilização de fontes de energia renováveis cresce a uma taxa média anual de 2,0%, com crescimento especialmente alto para a energia solar fotovoltaica, que ocorreu a taxas médias anuais de 37,0%, de bases muito baixas em 1990, e para a solar térmica, que cresceu a uma taxa de 11,9%. Estima-se ainda que, em 2017, a energia solar respondeu por 3,9% do fornecimento mundial de energia de fonte renovável e que, até 2050, deverá responder por 69% (COTFAS *et al.*, 2019). Ainda, no que se refere à produção de eletricidade, as energias geotérmica, solar, eólica e das marés, embora cresçam rapidamente, foram responsáveis por 6,5% do montante total produzido em 2017, o que representa 26,6% do total de eletricidade de fonte renovável produzida no mesmo ano (IEA, 2019). Em algumas partes do mundo, a energia solar é a única possibilidade de produção de energia (DOORGA *et al.*, 2019, apud STEVOVIĆ *et al.*, 2019).

Dentre as diversas opções de fontes renováveis para a produção de energia elétrica, a energia solar também apresenta um potencial significativo no Brasil (LAGO; DELABENETA, 2018). De acordo com informações do Atlas Brasileiro de Energia Solar (2017), os indicadores de irradiação solar de algumas regiões do país menos ensolaradas ainda superam, inclusive, os valores correspondentes ao local mais ensolarado da Alemanha. No entanto, apesar desse expressivo potencial, a energia de origem solar ainda responde por apenas 0,5% da matriz elétrica brasileira, embora a capacidade instalada tenha aumentado 92,2% de 2017 a 2018 (BRASIL, 2019).

Nos próximos quatro anos, é esperado que a energia de origem solar ainda apresente o maior crescimento anual de participação na matriz energética mundial entre todas as energias renováveis (IEA, 2019). No entanto, apesar dessa tendência de crescimento e do fato da energia solar ser reconhecida por diversas partes como uma importante ferramenta para o desenvolvimento sustentável, acredita-se que o potencial solar para a produção de eletricidade é subutilizado. Nesse sentido, embora estejam em curso alguns métodos para solucionar problemas específicos na implementação de energia solar, são necessários mais trabalhos em que possíveis ganhos ambientais, sociais e econômicos sejam quantificados e analisados por país para que a implementação desse tipo de energia seja impulsionada (STEVOVIĆ; MIRJANIĆ; STEVOVIĆ, 2019 apud HOCHART *et. al.*, 2009). Afinal, se apenas um décimo de toda a energia solar que incide no planeta fosse coletado e distribuído, os problemas de fornecimento de energia na Terra desapareceriam (JOLLANDS *et al.*, 2010, p. 25).

### 3.2. Células fotovoltaicas

As células fotovoltaicas são instrumentos de geração de energia que convertem luz solar diretamente em eletricidade, atraindo as atenções mundiais como uma fonte significativamente promissora de energia limpa (YAN et al., 2019). Tomou-se conhecimento dessa tecnologia em 1954, quando cientistas do laboratório Bell Telephone mostraram para a comunidade científica que o silício, quando exposto à luz, criava carga elétrica. Logo, demonstrou-se, assim, o efeito fotovoltaico, decorrente da excitação dos elétrons de alguns materiais em condições de presença da luz solar (CALIJURI et al., 2013). A Figura 2 ilustra, de forma simplificada, o funcionamento de um dispositivo fotovoltaico convencional.

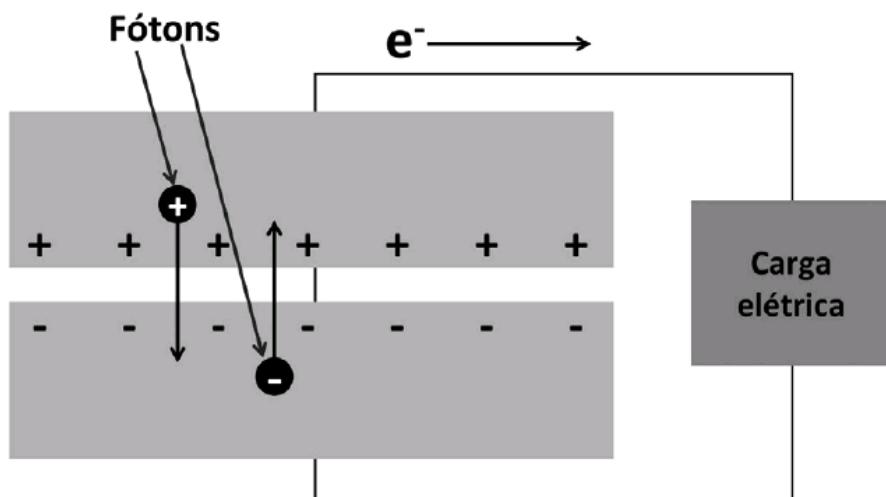


Figura 2. Esquema de um painel fotovoltaico. Fonte: Grätzel (2007, apud CALIJURI et al., 2013).

Diferentemente de outras fontes renováveis de energia, as células fotovoltaicas podem ser aplicadas tanto em áreas rurais como em centros urbanos, tendo massiva vantagem de aplicação no Brasil em virtude da alta irradiação de luz solar no país, além da possibilidade da instalação de módulos de geração privada. Esses fatores, agregados a políticas públicas de garantia de mercado e de incentivo à competitividade, impulsionam sua implantação no território nacional (STEFANELLO; MARANGONI; ZEFERINO, 2018).

De modo geral, as tecnologias fotovoltaicas podem ser divididas em três classes pertencentes a diferentes gerações (CONIBEER, 2017 apud YAN et al., 2019): A

primeira geração são células solares fabricadas a partir de camadas de silício monocristalino ou multicristalino (c-Si). A segunda geração é composta por células solares de filme fino, como as células solares III-V, que contam com diferentes filmes finos inorgânicos, como silício amorfo (a-Si), CdTe e CuInGaSe<sub>2</sub> (CIGS), dentre outros. A terceira e última geração consiste geralmente em células solares avançadas de película fina, incluindo células solares sensibilizadas por corantes (Dye Sensitized Solar Cells - DSSCs), células solares de perovskita (Perovskite Solar Cells - PSCs) e células solares orgânicas (Organic Photovoltaics - OPVs). As células solares c-Si ocupam aproximadamente 90% do mercado, e as células solares de película fina detêm os 10% restantes (YAN et al., 2019).

Embora, atualmente, as células solares de primeira e segunda geração ocupem a totalidade do mercado de energia solar, elas acabando sofrendo com algumas desvantagens, tais como o alto custo de produção e pós-processamento para módulos cristalinos c-Si, a complexidade da tecnologia de fabricação e a maior necessidade de descarte adequado de elementos poluentes para módulos de filmes finos. Sendo assim, por mais que a eficiência das células solares avançadas de filme fino geralmente não possa competir com a de células solares c-Si e de células convencionais de filmes finos, elas têm grande promessa em atender à maioria das preocupações das duas gerações anteriores. Essa é a principal razão pela qual a terceira geração de dispositivos fotovoltaicos dominou os interesses de pesquisa nas últimas décadas (YAN et al., 2019).

Adicionalmente, pelo fato das células solares de terceira geração geralmente sofrerem com questões de estabilidade, a aplicação em ambientes internos amenos parece uma alternativa mais viável que exposição externa à luz solar, diferentemente dos painéis c-Si convencionais (YAN et al., 2019). Nos últimos anos, os dispositivos eletrônicos portáteis, incluindo dispositivos flexíveis (até mesmo “vestíveis”) e a Internet das Coisas (IoT), adentraram rapidamente nossa vida cotidiana (ZHAN et al., 2014). Com base nessa tecnologia, tem se desenvolvido até mesmo janelas inteligentes capazes de gerar energia e ativar filtros solares e aparelhos de ar condicionado a partir da intensidade da radiação que recebem<sup>1</sup>. Diante desse cenário, a terceira geração de energia fotovoltaica possui um

---

<sup>1</sup> Disponível em: <https://english.rvo.nl/news/business-cases/physee-develops-smart-energy-generating-windows>. Acesso em 21 set. 2019.

grande potencial para atender aos requisitos de energia da maioria desses eletrônicos internos, o que a fortalece como possível fonte de geração de energia (CHEN, 2019).

### *3.2.1. Células Fotovoltaicas Orgânicas (OPVs)*

Nos dispositivos fotovoltaicos orgânicos (ou OPVs), a função de absorção de luz é exercida por componentes orgânicos semicondutores, em substituição ao silício empregado nas células convencionais (BHATIA, 2014). Esses dispositivos podem ser datados de 1986, quando Tang desenvolveu os primeiros dispositivos com configuração em duas camadas (TANG, 1986 apud YAN et al., 2019). No entanto, o *boom* dos OPVs ocorreu de fato quando a camada ativa de heterojunção em massa (ou BHJ, do inglês *Bulk Heterojunction*) foi relatada por Heeger e seus colaboradores (YU et al., 1995 apud YAN et al., 2019). Atualmente, quando comparadas às células fotovoltaicas inorgânicas, as células fotovoltaicas orgânicas com estrutura de heterojunção em massa têm atraído cada vez mais interesse devido ao seu baixo custo, peso leve, fácil processamento, flexibilidade e compatibilidade com as técnicas de processo *roll-to-roll* (GUO et al., 2013 apud XU et al., 2019). No entanto, melhorar o desempenho do dispositivo como um todo, sem comprometer seu baixo custo de fabricação e tempo de vida útil, é um dos principais desafios que se enfrenta nas pesquisas envolvendo OPVs atualmente (FLEETHAM et al., 2015 apud DLAMINI; MOLA, 2019).

De acordo com Jørgensen *et al.* (2012 apud COUTINHO, 2015), “um dos principais problemas que assola o desenvolvimento desses dispositivos frente aos modelos alternativos é sua degradação. No entanto, a durabilidade de OPVs tem aumentado nos últimos anos em decorrência, principalmente, do desenvolvimento de materiais menos vulneráveis à fotodegradação. Em um segundo plano, esse aumento de durabilidade deve-se também à descoberta de contatos metálicos mais estáveis, a um aumento do conhecimento da influência das diferentes camadas sobre a estabilidade dos dispositivos, a um progresso no controle sobre a morfologia das camadas ativas e uma melhoria no processo de encapsulamento e manuseio dos dispositivos, dentre outros fatores”.

Diferentemente do que ocorre nas células solares inorgânicas, nos dispositivos fotovoltaicos orgânicos (OPVs), são gerados excítons de alta energia de ligação após a absorção da luz (HOU et al., 2018). Logo, a dissociação dos pares de elétrons / “buracos”

(conhecidos como excítons) contra a atração de Coulomb deve ocorrer antes que possam contribuir com a eficiência da fotocorrente (GREGG, 2003 apud CHEN, 2019). Além disso, essa tecnologia é mais adequada para geração de energia em larga escala, pois os semicondutores orgânicos são uma alternativa mais barata em comparação aos semicondutores inorgânicos. Nesse sentido, nanoestruturas de carbono, como fulerenos, nanotubos e grafeno, têm aplicações promissoras para essa finalidade devido às suas excelentes propriedades eletrônicas, ópticas, térmicas e mecânicas (PATHAKOTI; MANUBOLU; HWANG, 2018).

Com base em seu método de produção, as células solares orgânicas poliméricas podem ainda ser classificadas em três tipos: de heterojunção em massa (BHJ), de tandem e as já citadas células sensibilizadas por corantes (Dye-Sensitized Solar Cells - DSSCs) (PATHAKOTI; MANUBOLU; HWANG, 2018). As células tandem são uma combinação única de duas ou mais sub-células com espectros de absorção complementares, de modo que seja possível utilizar a radiação solar com mais eficiência (WALI et al., 2018). Já as células de heterojunção, maior foco desta monografia e reconhecidas como uma das mais bem-sucedidas estruturas de OPVs, possuem uma mistura de materiais semicondutores orgânicos dos tipos doador e aceitador, com separação de fase na escala nanométrica e processada como uma película fina. Essa combinação de diferentes transportadores de carga aumenta drasticamente a área da interface, o que gera um aumento da formação de excíton e tem como consequência final um acréscimo na eficiência do dispositivo (KUS et al., 2018).

Nas duas últimas décadas, milhares de trabalhos foram publicados por cientistas de todo o mundo envolvendo a combinação de diferentes materiais semicondutores em estrutura de heterojunção em massa, como a ilustrada na Figura 3. Derivados de fulereno, como PCBM (éster metílico do ácido [6,6]-fenil-C<sub>61</sub>-butírico), que consistem em pequenas moléculas conjugadas, têm sido tipicamente empregados como acceptor de elétrons. Já copolímeros de polifluoreno e polímeros com cadeia principal de poli(fenileno-vinileno) e poli(tiofeno)s, como P3HT (poli(3-hexiltiofeno)), geralmente têm sido utilizados como materiais doadores de elétrons.

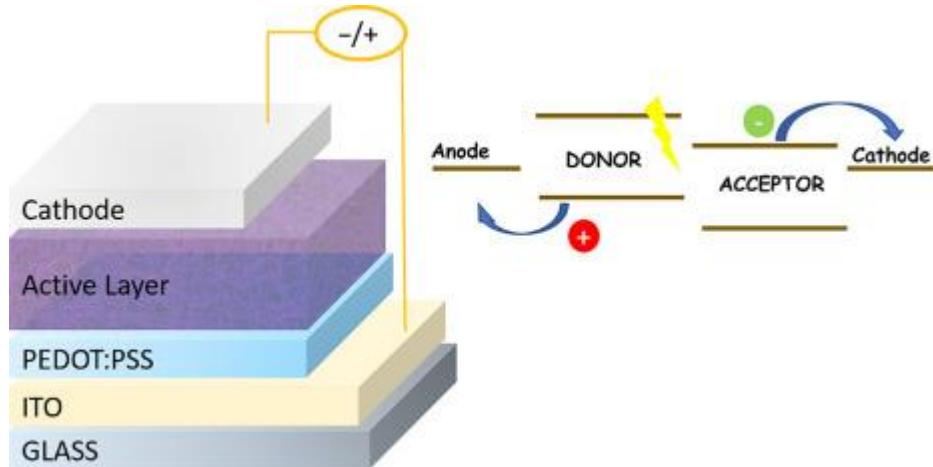


Figura 3. Diagrama esquemático da estrutura de heterojunção em massa e da estrutura energética do sistema doador-aceitador de OPVs dessa categoria. Fonte: KUS *et al.* (2018).

### 3.3. Polímeros conjugados (P3HT)

O poli (3-hexiltiofeno) (P3HT) é o polímero semicondutor mais comumente estudado para aplicação em OPVs (DANG; HIRSCH; WANTZ, 2011 apud MEITZNER *et al.*, 2019), devido à baixa complexidade de sua estrutura molecular, ao baixo custo de sua produção e por estar prontamente disponível em quantidades de quilogramas (decorrente do fácil aprimoramento sintético) (YANG *et al.*, 2019; BARAN *et al.*, 2016 apud MEITZNER *et al.*, 2019). Parte do sucesso do P3HT para aplicação em OPVs se deve também a sua boa solubilidade, fácil manipulação no estado sólido, alta mobilidade com efeitos de campo e excelente desempenho fotovoltaico (YANG *et al.*, 2018).

O éster metílico do ácido fenil C<sub>61</sub> butírico (PCBM), por sua vez, é o derivado do fulereno mais comumente utilizado em OPVs, tanto como aceitador de elétrons quanto como material de transporte devido a suas altas mobilidade e afinidade eletrônica e à sua alta estabilidade térmica (KIM *et al.*, 2006; SHAHEEN *et al.*, 2001 apud SHARMA *et al.*, 2016). A molécula contém um anel fenil e uma cadeia lateral de éster metílico do ácido butírico fixados a uma gaiola C<sub>60</sub>. Essa cadeia lateral melhora a solubilidade das moléculas de PCBM ou a processabilidade de suas soluções em diferentes solventes, como clorofórmio, clorobenzeno e diclorobenzeno, etc., tornando-o ideal para a técnica de *spin casting* (HUMMELEN *et al.*, 1995; KIM *et al.*, 2007 apud SHARMA *et al.*, 2016).

As misturas de P3HT e PCBM têm sido uma escolha muito recorrente de materiais orgânicos para aplicação em OPVs e uma das mais promissoras para tal finalidade, devido à sua síntese relativamente barata, à sua alta estabilidade térmica e mecânica, suas propriedades de transporte de carga, a ajustabilidade de suas propriedades eletrônicas e o adequado processamento em uma variedade de solventes (LIN, ZHAN, 2014; ETXEBARRIA *et al.*, 2015 apud YANG *et al.*, 2018; MUNSHI *et al.*, 2018). Nesses dispositivos, P3HT e PCBM são completamente misturados em solução, enquanto a agregação e organização do polímero são posteriormente induzidas por evaporação do solvente a partir de técnicas de *drop-casting* ou *spin-coating* (PIAN *et al.*, 2018). Uma solução bem misturada dessas duas fases resulta em redes de interpenetração uniformemente dispersas contendo as substâncias.

A Figura 4 mostra os níveis de energia do dispositivo de heterojunção composto por P3HT e PCBM e seu mecanismo de funcionamento. Existem compensações entre os orbitais moleculares mais altos ocupados (HOMOs) e os orbitais moleculares mais baixos desocupados (LUMOs) dos dois materiais ativos. Assim, o princípio operacional pode ser dividido em seis processos distintos: 1) absorção de fótons; 2) geração de excítон; 3) difusão de exciton; 4) dissociação de excíton; 5) transporte de carga e 6) coleta de carga (MOLITON, NUNZI, 2006; LIN, WANG, 2014 apud CHEN, 2019). Após a absorção de fótons pelos componentes da camada ativa, são gerados excítons. Como a energia de ligação dos excítons nos semicondutores orgânicos geralmente é alta, eles podem ser separados e transformados em transportadores de carga livre efetivamente depois de terem se difundido nas junções doador-aceptor (CHEN, 2019).

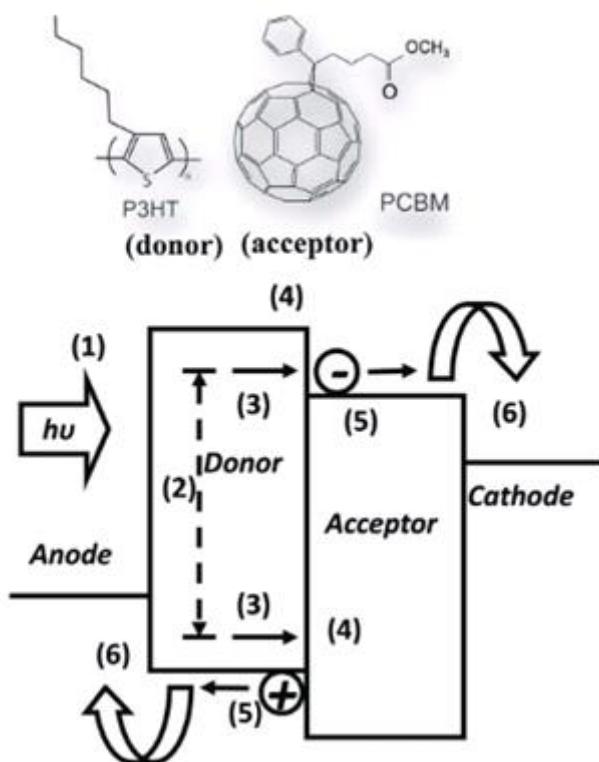


Figura 4. Princípios de funcionamento de uma típica célula solar de heterojunção composta pelo conjunto P3HT:PCBM. (1) absorção de fótons; (2) geração de exciton; (3) difusão de exciton; (4) dissociação de exciton; (5) transporte de carga; e (6) coleta de carga. Fonte: Chen (2019 apud ROYAL SOCIETY OF CHEMISTRY, 2014).

### 3.4. Uso de solventes na preparação de OPVs

Uma das áreas que tem tido maior destaque na química verde se refere ao desenvolvimento de solventes sustentáveis, sua seleção e uso adequados para determinadas aplicações. De acordo com Sánchez-Camargo (2019), “o primeiro e o quinto dos 12 princípios da química verde de Anastas e Eghbali (2010), inclusive, se referem justamente a evitar o uso de solventes tóxicos ou altamente impactantes ou, se possível, promover sua substituição por solventes inócuos ou mais amigáveis do ponto de vista ambiental”.

No que se refere à aplicação de solventes em OPVs, embora os conhecimentos sobre células fotovoltaicas orgânicas estejam sendo aprimorados rapidamente e se tenha alcançado valores de eficiência significativos para esse tipo de tecnologia, as camadas ativas dos dispositivos com melhor desempenho ainda são processados por solventes clorados e/ou aromáticos derivados de benzeno altamente impactantes dos pontos de vista

ambiental e ocupacional, como 1,2-diclorobenzeno (DCB), clorobenzeno e clorofórmio (HE et al., 2015 apud ZHANG et al., 2016). Esses solventes, tradicionalmente, são considerados como principais alternativas para a preparação de filmes finos que irão compor a camada ativa de OPVs, em decorrência da formação de filmes com morfologia favorável - e, consequentemente, de camadas ativas com alta eficiência (ZHANG et al., 2016). No entanto, esses solventes não existem na natureza, o que implica em um alto custo e consumo de energia para sua produção. Ademais, existem sérias preocupações relacionadas ao impacto desses solventes tanto ao meio ambiente quanto à saúde humana, o que torna sua utilização em larga escala desfavorável (CHUEH et al., 2013).

Os solventes orgânicos não halogenados, por outro lado, podem ter seu acúmulo ambiental consideravelmente mitigado em comparação com os solventes halogenados tóxicos, fazendo com que sejam alternativas mais sustentáveis para a produção industrial de OPVs em larga escala (ZHANG et al., 2016). A ciclohexanona, por exemplo, possui potencial de biodegradabilidade de 90% a 100% em um intervalo de tempo relativamente curto, enquanto, para o mesmo intervalo, o diclorobenzeno, apresenta biodegradabilidade de 0% (SOUZA, 2018).

Diante desse cenário, a substituição de solventes tóxicos na fabricação de OPVs por alternativas menos impactantes (foco maior deste trabalho), assim como o aumento contínuo da eficiência desses dispositivos, ainda é um grande desafio para a utilização prática desse tipo de tecnologia, sendo imperativa para o desenvolvimento futuro de uma produção em larga escala.

Nesse sentido, um estudo conduzido por Liu *et al.*, (2018) avaliou a utilização de uma substância natural utilizada como aditivo em alimentos e cosméticos, o Terpinoleno (TPO), como substituto de solventes do tipo clorobenzeno (CB) para composição da camada ativa de células solares poliméricas ou PSCs (do inglês *Polymer Solar Cells*). Parâmetros de solubilidade de Hansen foram obtidos para o TPO, e o cálculo da diferença relativa de energia entre o solvente e o PC<sub>71</sub>BM sugeriu que o TPO pode ser um bom solvente para processamento de soluções de PC<sub>71</sub>BM a serem utilizadas em OPVs. Assim, os filmes de PTB7 (Poly [[4,8-bis[(2-etylhexil)oxi]benzo[1,2-b:4,5-b']ditiofeno-2,6-diil][3-fluoro-2-[(2-etylhexil)carbonil]tieno[3,4-b]tiofenodiil]]) e PC<sub>71</sub>BM em TPO apresentaram superfícies significativamente regulares, além de uma morfologia e um espectro de absorção UV equiparáveis ao dos filmes de CB. Adicionalmente, as PCBs

preparadas a partir de soluções de Terpinoleno obtiveram uma eficiência de 6,42%, próxima à eficiência obtida com o uso de CB, sugerindo que o solvente estudado pode ser promissor para a fabricação sustentável de PSCs.

Um outro estudo conduzido por Chen et al., (2014) analisou o uso do 2-metiltetrahidrofurano (2-MeTHF) para a preparação de células solares de heterojunção. O 2-MeTHF pode ser obtido do furfural derivado de subprodutos da agricultura, ou seja, provém de uma fonte renovável e se adequa à ideia de capitalização do desperdício para a produção de químicos. Assim, filmes de X2:PC<sub>61</sub>BC<sub>8</sub> produzidos a partir de 2-MeTHF exibiram características de fotoabsorção muito semelhantes à do filme preparado a partir de clorofórmio (CHCl<sub>3</sub>) na faixa de comprimento de onda de 300 nm a 900 nm, assim como foi observado para o filme de X2:PC<sub>62</sub>BM. Além disso, células solares com eficiência de até 5,1% foram fabricadas através do processamento de misturas de X2:PC<sub>61</sub>BC<sub>8</sub> em 2-MeTHF.

Ainda, para a tradicional combinação P3HT:PCBM, diversos tipos de sistemas de solventes não-halogenados têm sido utilizados nos últimos anos e os valores correspondentes de PCE estiveram na faixa de 3 a 5% (CHEN et al., 2014). LIN et. al, (2010), por exemplo, aplicaram o solvente tetralina com alguns tratamentos adicionais para o processamento da cada ativa de OPVs e relatou um PCE de 3,7%, Park et al., (2011), por sua vez, utilizaram uma mistura de acetofenona (AP) e mesitileno (MS) em substituição ao diclorobenzeno, e um PCE de 3,4% foi obtido quando AP e MS foram misturados na proporção de volume de 1: 4. Por fim, Shen et al., (2015) selecionaram o solvente benzenocarboxilato de etila (EB) como aditivo de tolueno para o processamento de soluções de P3HT:PCBM. Com a incorporação otimizada de 2% em volume de EB em tolueno, foi alcançado um PCE de 4,11%, enquanto um PCE máximo de 4,82% foi alcançado com um tratamento térmico nas mesmas condições.

Esses valores excepcionais confirmam a teoria de que diversos polímeros fotosensíveis podem ser processados por sistemas de solventes verdes e que esse campo pode ser melhor explorado.

### *3.4.1. Parâmetros de Solubilidade de Hansen*

Para avaliar o escopo de aplicações de um solvente, é obrigatório ter um bom conhecimento de suas propriedades de solubilidade e, assim, poder prever seu comportamento para aplicações específicas. Diante disso, existem algumas ferramentas de orientação mais ou menos sofisticadas para evitar a abordagem de tentativa e erro - altamente demandante de material e tempo - ao analisar a compatibilidade entre soluto e solvente, tais como os parâmetros de solubilidade de Hildebrand e de Hansen (uma evolução do primeiro) (BENAZZOUZ et al., 2014)

A história dos parâmetros de solubilidade de Hansen (*Hansen solubility parameters* - HSP) remonta ao ano de 1967, quando, em sua tese de doutorado, Charles Hansen desenvolveu um guia prático para a seleção de solventes para sistemas de revestimento complementar ao trabalho de Hildebrand, que só podia ser aplicado a moléculas apolares e sem ligações de hidrogênio (SÁNCHEZ-CAMARGO et al., 2019). O modelo desenvolvido por Hansen pode ser utilizado para prever a solubilidade de polímeros, pigmentos e misturas (entre outros materiais) a partir das forças intermoleculares de dispersão ou *van der Walls* ( $\delta_d$ ), polares ( $\delta_p$ ) e ligações de hidrogênio ( $\delta_h$ ), permitindo então a construção de um espaço tridimensional, conhecido como "espaço Hansen", no qual todos os solventes e solutos podem ser localizados. Assim, um soluto pode ser visualizado como um ponto cercado por um volume chamado "esfera de solubilidade", de modo que todos os solventes e misturas localizadas dentro deste volume provavelmente solubilizarão o soluto (BENAZZOUZ et al., 2014).

Atualmente, os parâmetros de solubilidade Hansen (HSP) representam a principal técnica de estudo de solubilidade para uma ampla gama de aplicações relacionadas ao tema, sendo utilizados em diversos campos de conhecimento, como química farmacêutica (SHIN et al., 2018) e de cosméticos (BENAZZOUZ et al., 2014), biologia molecular (PRZYBYŁEK; JELIŃSKI; CYSEWSKI, 2019), ciência de materiais (FUJIWARA; YAMAMOTO, 2019), agrícolas e de alimentos (KHAYET; FERNÁNDEZ, 2012), energia (BARANA et al., 2018), odontologia (CASTELLAN et al., 2010) e até mesmo em conservação de acervo artístico (FARDI et al., 2014). Essa popularidade se deve, sobretudo, ao despertar de interesse decorrente da relevância da metodologia no desenvolvimento de formulações sustentáveis, a progressos em pesquisas sobre materiais

avançados e à busca pelo uso de solventes mais seguros para fins de extração, dentre outros fatores (SÁNCHEZ-CAMARGO et al., 2019).

## 4. MATERIAIS E MÉTODOS

### 4.1. Materiais

#### Substratos

- Lâminas de vidro.
- Lâminas de vidro cobertas com ITO (óxido de índio e estanho), a espessura da camada do ITO é aproximadamente 100nm, rugosidade de 4nm e resistência de 8-12 ohms.

#### Polímeros Conjugados

- Poli(3,4-etilenodióxido-tiofeno):Poli(estirenosulfonado)(PEDOT:PSS) adquirido da Heraeus GmbH com o nome comercial de Clevios P.
- Poli(3-hexiltiofeno) regioregular (rr-P3HT) adquirido da Aldrich.

#### Equipamentos

- *Spin coater* marca ChemMat modelo KW-4A.
- Bomba de vácuo.
- *Glovebox Inertec*.
- Chapa de aquecimento.
- *Glovebox Braun*.
- Simulador solar *Orielclass AAA*.
- Medidor de potência *Ophir*.
- Eletrômetro *Keithley 2400*.
- Placa GPIB-USB-HS *National Instruments*.
- Perfilômetro *Veeco*, modelo *Dektak II*.
- Espectrofotômetro Hitachi U-2900
- Espectrofotômetro de fibra óptica USB4000.
- Microscópio óptico Olympus BX41.

### Acessórios

- Máscara de sombra.
- Cubeta de quartzo.
- Porta-amostra de PVC.
- Filtro de seringa de membrana de PTFE hidrofílico de 0,45 µm.

Solventes (todos adquiridos da Aldrich com pureza >90% e usados diretamente, sem outras purificações)

- 1,2-Diclorobenzeno (DCB).
- 2-Metiltetrahidrofurano.
- 2-Metilciclohexanona.
- 2-Sec-butilciclohexanona.
- Ciclohexanona.
- Xileno.
- Ciclopentilmetyléter.

### Metais utilizados como eletrodos nos dispositivos

- Cálcio.
- Alumínio.

### Outros materiais

- [6,6]-fenil-C61-ácido butírico-metil éster (PCBM) Mn = 910,8 g/mol - adquirido da Aldrich.
- Developer AZ 300 MIF.
- Extran neutro - MA02.Merck
- Fotoresiste AZ 1512.

## **4.2. Métodos**

### *4.2.1. Estudo preliminar da formação das soluções e dos filmes*

Para mapear possíveis alternativas aos solventes tipicamente usados, utilizou-se métodos de classificação baseados nos parâmetros de solubilidade de Hansen, que possibilitam a realização de prognósticos a respeito da solubilidade de polímeros. Tais métodos têm sido amplamente utilizados no Grupo de Polímeros do Instituto de Física de São Carlos, o qual, contando com um banco de dados com cerca de 1000 possíveis solventes que podem ser avaliados e comparados, obteve êxito para a investigação da solubilidade de diversos sistemas poliméricos. A Figura 5 mostra a esfera de solubilidade (ou esfera de Hansen) criada neste trabalho para a seleção dos solventes alternativos para o P3HT (centro da esfera).

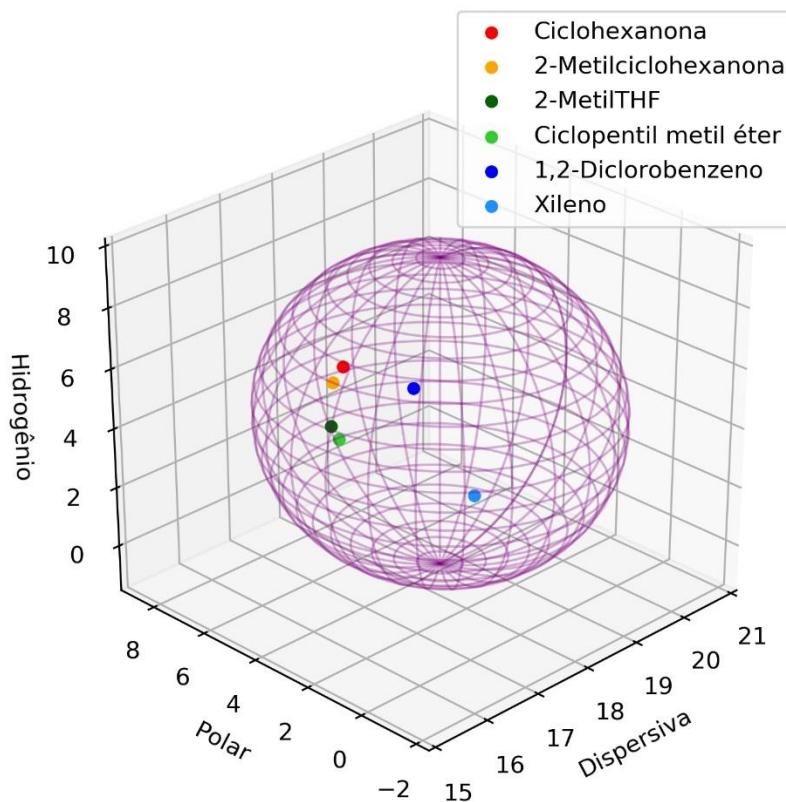


Figura 5. Esfera de solubilidade do P3HT obtida a partir dos parâmetros de Hansen para a seleção dos solventes alternativos analisados neste estudo. Fonte. Elaborada pelo autor.

Uma vez listados possíveis solventes, estes foram avaliados segundo critérios de risco disponíveis nas fichas de segurança (em Anexo) e comparados com os solventes tipicamente utilizados, como o orto diclorobenzeno. Desse modo, foram selecionados cinco solventes alternativos com melhor custo/benefício: **ciclohexanona**, **2-metilciclohexanona**, **2-sec-butilciclohexanona**, **2-metiltetrahidofurano** e **ciclometilpentiléter**; e um solvente tradicional para fins de comparação: **xileno**. Para a 2-sec-butilciclohexanona, não foram encontrados os valores de parâmetros de solubilidade, razão pela qual este não consta na esfera mostrada na Figura 5. No entanto, esse solvente foi selecionado em virtude de sua similaridade com a 2-metilciclohexanona, a partir da qual seria possível verificar se o tamanho da cadeia lateral do solvente teria influencia na formação de filmes do P3HT.

Preparou-se, então, soluções de P3HT em cada solvente com concentração 1mg/mL, necessitando-se do auxílio de um agitador magnético, assim como de uma barra magnética imersa em solução para a dissolução do polímero, com aquecimento a aproximadamente 110°C para o 2-metilciclohexanona e 60°C para os demais solventes, Posteriormente, de modo a obter soluções mais adequadas à análise espectroscópica, as soluções anteriores foram diluídas à concentração 0,01mg/mL. Assim, submeteu-se estas soluções à análise espectroscópica na região do ultravioleta e visível (UV-vis).

A espectroscopia na região do UV-vis baseia-se em medidas de absorção da radiação eletromagnética, nas regiões visível e ultravioleta do espectro, medindo a quantidade de luz absorvida pela amostra para diferentes comprimentos de onda. Sendo assim, utilizando uma cubeta de quartzo de 3,5 mL com caminho ótico de 10 mm e um espectrofotômetro Hitachi U-2900, foram obtidos espectros de absorbância em função dos comprimentos de onda para cada solução, possibilitando observar o grau de absorção de radiação em cada uma e para quais comprimentos de onda a absorbância das soluções é máxima. Além disso, com o formato das curvas nos gráficos obtidos, foram deduzidas informações referentes à conformação do polímero nas soluções.

Posteriormente, foram obtidos, por meio do software Spectrasuite da Ocean Optics®, espectros de absorbância para diferentes comprimentos de onda em temperaturas distintas para cada solução. Isso foi feito utilizando-se um espectrofotômetro de fibra óptica USB4000 associado a um termopar, um instrumento de leitura de temperatura e um porta-amostra de metal contendo resistências em suas paredes, ligadas a uma fonte de tensão. O aumento da tensão na fonte forneceu o aquecimento do porta amostras e consequentemente da cubeta com solução nele contida e a variação de temperatura foi monitorada. Como resultado, a mudança nos espectros decorrente da variação de temperatura forneceu informações quanto à influência da temperatura na conformação do polímero. O mesmo procedimento foi feito para uma solução de P3HT:PCBM em ciclohexanona de 0,05 mg/mL.

Em seguida, foram preparadas soluções de P3HT em cada um dos solventes com concentração 10mg/mL, ideal para a preparação de filmes finos pela técnica *spin-coating*. O preparo das soluções foi feito com o auxílio de um agitador magnético e uma barra magnética imersa em solução para a dissolução do polímero, com aquecimento contínuo a aproximadamente 110°C para o xileno e 150°C para a ciclohexanona, ambos por 20

minutos. Para a preparação dos filmes, utilizou-se um *spin coater* modelo KW-4A, uma bomba de vácuo, uma lâmina de vidro como substrato e o agitador com aquecedor para manter tanto o substrato como a solução aquecidos antes do processo de deposição.

Por meio da técnica de *spin-coating*, foram obtidos dois filmes de P3HT em cada solvente, a partir de diferentes velocidades de rotação: 1000 e 2100 rpm (exceto para a ciclohexanona, para qual se obteve um filme somente a partir da rotação 2100 rpm). A manipulação dos materiais durante a preparação precisou ser rápida de modo a evitar o esfriamento do substrato e da solução e uma possível solidificação precoce do filme, o que levaria a uma consequente deposição imprecisa e desuniforme no substrato.

Então, analisou-se os filmes no espectrofotômetro UV-vis, de modo a obter informações diretas relativas à possível conformação do polímero nos mesmos e, por fim, os filmes feitos com velocidade de rotação 1000 rpm foram analisados em microscópio óptico (modelo Olympus BX41) por meio do programa computacional cell<sup>B</sup> ©, utilizando lentes objetivas com aumento de 4 vezes e 10 vezes, de modo a adquirir informações mais esclarecedoras a respeito da morfologia e qualidade dos filmes preparados.

#### *4.2.2. Estudo de dispositivos de camada simples*

De modo geral, a confecção dos dispositivos consistiu nas quatro seguintes etapas: obtenção e preparação dos substratos (decapagem de ITO), deposição da camada injetora/coletora de buracos (PEDOT:PSS), deposição da camada ativa e evaporação dos eletrodos metálicos (Ca/Al).

Na primeira etapa, os substratos de vidro recoberto com ITO foram cortados nas dimensões 16 mm x 21 mm, seguida de uma pré-limpeza com detergente comum. Em seguida, os substratos foram submetidos a banhos ultrassônicos a 60 °C, de acordo com os seguintes procedimentos, em ordem cronológica: solução 10% de Extran neutro por 20 min; enxague com água milli-Q; água milli-Q por 10 min; acetona por 10 min; enxague com água milli-Q; e álcool isopropílico por 10 min.

Com os substratos devidamente limpos, iniciou-se o processo de decapagem do ITO a partir de um procedimento denominado fotolitografia, etapa na qual todos os procedimentos foram realizados sob iluminação amarela, tanto na capela quanto no

laboratório. A fotolitografia tem início com a utilização da técnica de spin-casting para a deposição de fotoresiste AZ 1512 sobre os substratos com velocidade de rotação de 2000 rpm por 20 segundos. Em seguida, os substratos foram colocados sobre um porta-amostra e submetidos a tratamento térmico em uma chapa de aquecimento a 120°C durante 3 minutos.

Após o tratamento térmico, uma máscara de sombra foi colocada sobre o porta-amostra em que se encontravam os substratos para a exposição à luz ultravioleta por 3 minutos. A máscara de sombra possui desenhos com regiões que ficam protegidas da exposição à luz ultravioleta, permitindo assim a degradação do fotoresiste somente nas regiões que foram expostas à luz UV. Assim, os substratos foram mergulhados no revelador para remoção do fotoresiste nessas regiões e posteriormente, foram colocados em uma solução de ácido clorídrico 8 molar (HCl) até a total remoção do ITO e, então, foram enxaguados com água milli-Q.

Por fim, o restante do fotoresiste que se encontrava na superfície dos substratos decapados foi removido com acetona e em seguida, foi realizada uma nova limpeza dos substratos decapados segundo os mesmos procedimentos realizados antes da fotolitografia. A Figura 6 ilustra resumidamente as etapas do processo de decapagem do ITO.

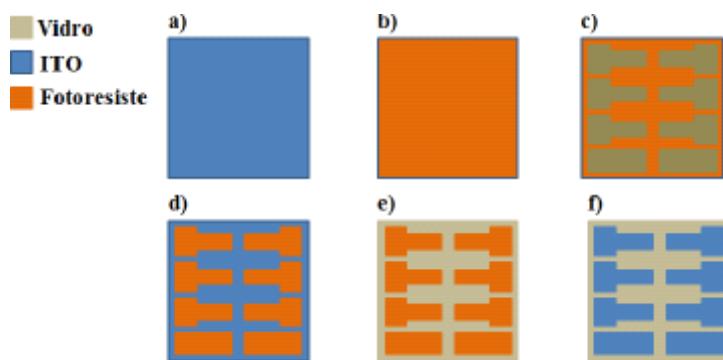


Figura 6. Etapas envolvidas no processo de decapagem do ITO. a) corte e limpeza dos substratos; b) deposição do fotoresiste; c) exposição UV com máscara de sombra sobre os substratos; d) revelação do fotoresiste; e) corrosão do ITO e f) remoção do fotoresiste com acetona. Fonte: Adaptada de Sousa (2017).

Antes da deposição da camada de PEDOT:PSS, a superfície dos substratos decapados e limpos são expostas à luz ultravioleta por 10 minutos. Esse tratamento faz

com que a superfície do ITO se torne hidrofílica, garantindo melhor aderência do PEDOT:PSS no ITO, resultando em um filme de PEDOT:PSS mais uniforme e de melhor qualidade. Sendo assim, utilizando um filtro de seringa de membrana de PTFE com tamanho de poro  $0,45\mu\text{m}$ , a solução de PEDOT:PSS foi filtrada e, em seguida, os filmes foram depositados pela técnica de spin-casting com velocidade de rotação de 2000 rpm por 60 segundos.

Os substratos foram então transferidos para uma glovebox da marca Inertec (atmosfera controlada de nitrogênio ( $\text{N}_2$ ), livre de oxigênio e água) e posteriormente, utilizando uma chapa de aquecimento, os filmes de PEDOT:PSS foram tratados termicamente a uma temperatura de  $120^\circ\text{C}$  por 10 minutos.

Em seguida, foi realizada a deposição da camada ativa segundo a técnica de spin-coating, com concentrações de polímero, velocidades e tempos de rotação diversos dependendo do solvente envolvido. Para o solvente 1,2-diclorobenzeno, utilizou-se uma solução de concentração 30 mg/mL previamente preparada com aquecimento a  $60^\circ\text{C}$  por 12 horas, e o substrato foi submetido a uma velocidade de rotação de 500 rpm por 4 minutos. Já para todos os outros solventes estudados, utilizou-se soluções de concentração 20 mg/mL previamente preparadas, aquecidas a temperaturas específicas visando à melhor dissolução do polímero, levando em consideração os pontos de ebulação dos solventes. Todos os substratos foram submetidos à rotação por 4 minutos no spinner para espalhar a solução logo após sua deposição sobre o substrato.

Todos os substratos foram submetidos a um segundo tratamento térmico de  $140^\circ\text{C}$  por 5 minutos após a deposição da camada ativa. A Tabela 1 sintetiza as condições de preparo das soluções e substratos e os parâmetros utilizados para deposição da camada ativa para cada um dos solventes utilizados.

Tabela 1. Parâmetros adotados para o preparo das soluções de P3HT nos solventes e deposição dos filmes.

<b>Solvente</b>	<b>Parâmetros</b>		
	<b>Temperatura da solução</b>	<b>Temperatura dos substratos</b>	<b>Velocidade de rotação do spinner (rpm)</b>
<b>1,2-Diclorobenzeno*</b>	60°C	Temperatura Ambiente	500
<b>2-Metiltetrahidrofurano</b>	75°C por 15 min	120°C	1000
<b>Ciclohexanona</b>	130°C por 15 min	120°C	500
<b>Ciclopentilmetiléter</b>	90°C por 25 min	120°C	1000
<b>Xileno</b>	60°C por 25 min	120°C	500
<b>2-Metilciclohexanona</b>	115°C por 40 min	120°C e ambiente (duas amostras)	500
<b>2-Sec-butilciclohexanona</b>	115°C por 40 min	Ambiente	500

\*Utilizado apenas na confecção de dispositivos - Fonte. Elaborada pelo autor.

A última etapa da confecção dos dispositivos foi a evaporação dos contatos metálicos. Nessa etapa, os contatos dos metais Ca e Al foram formados por evaporação térmica em câmara a vácuo (pressão de aproximadamente  $10^{-6}$  mbar) localizada no interior de uma glovebox da Braun. A evaporação ocorreu a uma taxa de 1 Å/s e a espessura de cada contato elétrico no final da deposição foi de aproximadamente 40 nm para o Ca e 70 nm para o Al. Os parâmetros utilizados na evaporação foram os mesmos para todos os dispositivos fabricados, sendo os solventes utilizados na etapa do processamento da camada ativa a única diferença entre eles. A Figura 7 apresenta a estrutura final dos dispositivos preparados neste trabalho.

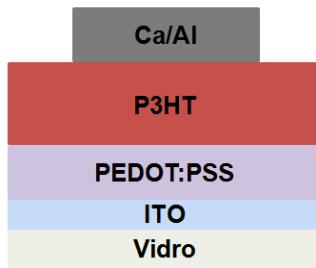


Figura 7. Estrutura final das células preparadas neste trabalho. Fonte: Elaborada pelo Autor.

Com os dispositivos devidamente preparados segundo a metodologia descrita até então, a caracterização dos mesmos foi realizada por meio de medidas de fotocorrente, o que possibilita a obtenção de parâmetros como potencial de circuito aberto ( $V_{oc}$ ), corrente de curto circuito ( $J_{sc}$ ), fator de preenchimento (FF) e eficiência (PCE), sendo a obtenção desses parâmetros de suma importância para o entendimento, comparação e otimização do funcionamento dos OPVs preparados. Em uma célula fotovoltaica ideal, o que se espera em condições sem iluminação é o comportamento de um diodo, ou seja, para potenciais negativos, espera-se uma corrente menor em módulo do que para potenciais positivos. Além disso, a corrente em potenciais positivos é exponencialmente maior. Já em condições de presença de luz, a fotocorrente pode ser observada pelo surgimento de uma corrente negativa, deslocando a curva do claro para os quadrantes inferiores. A própria Figura 8 ilustra esses comportamentos típicos.

A potência experimental do dispositivo consiste no produto  $J_{sc} \times V_{oc}$ , já a potência máxima se trata daquela na qual o produto  $J \times V$  assume seu maior valor, como mostra a Figura 8.

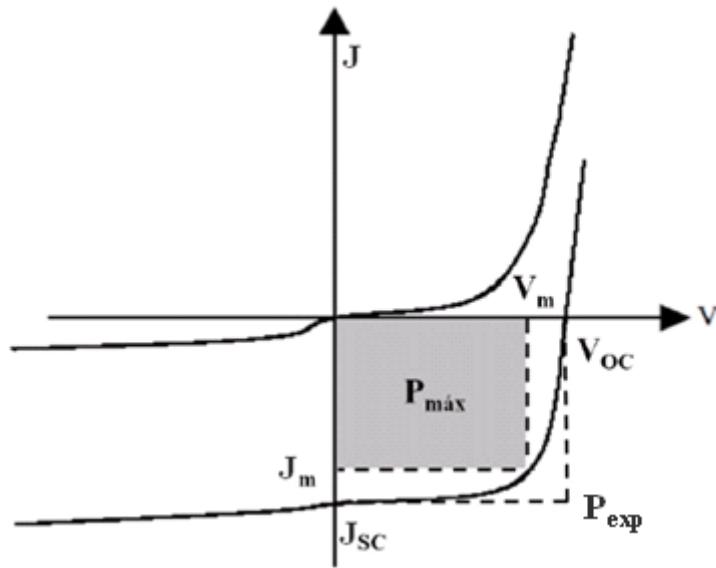


Figura 8. Curva J-V característica para um dispositivo fotovoltaico no escuro (curva superior) e sob iluminação (curva inferior), destacando geometricamente o significado de  $P_{máx}$ ,  $P_{exp}$  e  $FF$ . Fonte: Adaptada de Coutinho (2015).

O fator de preenchimento é a razão entre a potência máxima e a potência experimental, conforme mostra a expressão a seguir.

$$FF = \frac{(J \times V)_{max}}{J_{sc} \times V_{oc}} \quad \text{Eq.1}$$

A eficiência de conversão de potência (PCE) é relação entre a potência de saída e a potência de luz incidente ( $J_0$ ). Em termos do fator de preenchimento (FF), a expressão para o cálculo de PCE é dada da seguinte forma:

$$PCE = FF \frac{J_{sc} \times V_{oc}}{J_0} \quad \text{Eq. 2}$$

Neste trabalho, utilizou-se um simulador solar *Orielclass AAA* com lâmpada de Xênonio e filtro AM 1.5 para tornar o espectro mais parecido com o solar. Sendo assim, a calibração da lâmpada foi realizada por um medidor de potência *Ophir* para ajustar a radiação total da lâmpada em  $113 \text{ mW/cm}^2$ . Uma vez calibrada a lâmpada, as medidas de corrente-tensão foram realizadas no escuro e sob iluminação, utilizando uma unidade fonte/medidor de corrente (SourceMeterUnit, SMU) *Keithley 2400*. A conexão da SMU com computador foi feita por meio de uma placa GPIB-USB-HS *National Instruments*. Foram utilizados passos de  $2 \text{ mV}$  e velocidade de varredura de  $20\text{mV/s}$ . Para a obtenção

da curva J-V, os valores de corrente medidos foram divididos pela área ativa do dispositivo sob iluminação ( $4,5\text{ mm}^2$ ). Todas as medidas foram realizadas dentro de um porta-amostra em atmosfera de nitrogênio com uma janela ótica e conectores elétricos acessando individualmente cada dispositivo da amostra para a realização das medidas de J-V.

Foram também realizadas medidas de espessura dos filmes utilizando um perfilômetro de contato *Veeco*, modelo *Dektak II*. Isso foi feito riscando-se a superfície das amostras, de modo que os valores de espessura foram coletados em três regiões diferentes dos filmes. Os valores foram anotados e calculou-se o valor médio das medidas de espessura e o desvio padrão para cada um dos filmes. A importância dessa medida consiste no fato de que, se o dispositivo possuir uma camada ativa muito espessa, gera-se um espectro de absorção deslocado para comprimentos de onda de menor energia, ou seja, fora do comprimento em que a absorção de luz é máxima, gerando uma redução na eficiência do dispositivo (CANESTRARO, 2010).

#### *4.2.3. Estudo de dispositivos de heterojunção*

Nessa etapa do trabalho, diferentemente da etapa anterior, foram preparados OPVs de heterojunção em massa a partir da mistura P3HT:PCBM. Sendo assim, a metodologia de preparação dos dispositivos seguiu a mesma linha que a etapa anterior, com diferenças apenas nas fases de preparo das soluções e deposição da camada ativa.

A deposição da camada ativa foi feita utilizando-se a concentração de P3HT:PCBM de  $20\text{mg/mL}$ , segundo a proporção 1:1, com soluções previamente aquecidas a temperaturas específicas visando à melhor dissolução do polímero, levando em consideração os pontos de ebulição dos solventes. Todos os substratos foram submetidos à rotação por 4 minutos no spinner para espalhar a solução logo após sua deposição sobre o substrato.

Logo antes da deposição da solução de P3HT:PCBM em ciclohexanona, em específico, a mesma solução foi aquecida a  $130\text{ }^\circ\text{C}$  por 15 minutos antes da deposição visando à melhoria da dissolução do polímero. Além disso, conforme estudado no Grupo de Polímeros 'Prof. Bernhard Gross', quanto mais próxima a temperatura do substrato for da temperatura ambiente, melhor será a performance do dispositivo de heterojunção preparado a partir do uso do solvente em questão, diferentemente do que foi observado

para a maioria dos dispositivos de camada simples estudados anteriormente (contendo apenas P3HT). Sendo assim, para o dispositivo preparado com ciclohexanona nesta etapa, o substrato foi mantido à temperatura ambiente. Para a deposição das soluções, todos os substratos foram submetidos a uma velocidade de rotação de 500 rpm por 4 minutos.

Logo antes da deposição da solução de P3HT:PCBM em 2-metiltetrahidrofurano, por sua vez, a mesma solução foi submetida a aquecimento a 90°C por 25 minutos visando à melhor dissolução do polímero, e testou-se a deposição com substrato tanto em temperatura ambiente quanto aquecido a 120 °C. Para o ciclopentilmetiléter, por sua vez, utilizou-se primeiramente uma solução previamente preparada com aquecimento a 80°C por 25 minutos, e o substrato foi mantido em temperatura ambiente no momento da deposição. No entanto, não se obteve sucesso na deposição, uma vez que o filme formado mostrou-se em desacordo com as características desejadas, denotando uma dissolução inadequada dos materiais nessas condições, conforme mostra a Figura 9. Sendo assim, realizou-se então a deposição desta solução sob temperaturas mais elevadas (105°C) com o substrato estando quente no momento da deposição (logo após aquecimento a 120°C), de modo a propiciar uma formação mais adequada da camada ativa.



Figura 9. Filme preparado a partir da deposição de solução de P3HT:PCBM em ciclopentilmetiléter ( $20 \text{ mg.mL}^{-1}$ , 1:1) com substrato a temperatura ambiente no momento da deposição. Fonte: Elaborada pelo autor.

Para os solventes 2-metilciclohexanona e 2-sec-butilciclohexanona, utilizou-se soluções previamente preparadas com aquecimento a 105°C por 45 minutos. Para ambos os solventes, trabalhou-se com um substrato quente (após aquecimento a 120°C) e outro à temperatura ambiente de modo a investigar as características dos dispositivos formados. No entanto, o filme preparado a partir da solução de 2-secbutilciclohexanona com substrato a 120°C apresentou um aspecto desuniforme, ou seja, em condições indesejáveis para a preparação de OPVs.

Assim como na preparação de dispositivos de camada simples, todos os substratos foram submetidos a um segundo tratamento térmico de 140 °C por 5 minutos após a deposição da camada ativa. Essa etapa é especificamente importante na preparação de dispositivos de heterojunção visto que há uma melhoria no desempenho do dispositivo tratado termicamente pela formação de domínios maiores de P3HT e PCBM e pela melhor cristalização das cadeias de P3HT na camada ativa, resultando assim no aumento da absorção de energia luminosa e na melhoria das características de transporte de carga (MAZZIO; LUSCOMBE, 2014). A Tabela 2 sintetiza as condições de preparo das soluções e substratos e os parâmetros utilizados para deposição da camada ativa para cada um dos solventes utilizados.

Tabela 2. Parâmetros adotados para o preparo das soluções de P3HT:PCBM nos solventes e deposição dos filmes.

<b>Solvente envolvido</b>	<b>Parâmetros</b>	
	<b>Temperatura da solução</b>	<b>Temperatura dos substratos</b>
<b>1,2-Diclorobenzeno</b>	60°C	Temperatura Ambiente
<b>Ciclohexanona</b>	130°C por 15 min	
<b>2-Metiltetrahidrofurano</b>	90°C por 25 min	120°C e ambiente (duas amostras)
<b>2-Metilciclohexanona</b>	115°C por 45 min	
<b>2-Sec-butilciclohexanona</b>	115°C por 45 min	
<b>Ciclopentilmetiléter</b>	80°C por 25 min	120°C

Fonte: Elaborada pelo autor.

A Figura 10 apresenta a estrutura final dos dispositivos preparados nesta etapa do trabalho, após a evaporação dos contatos metálicos.

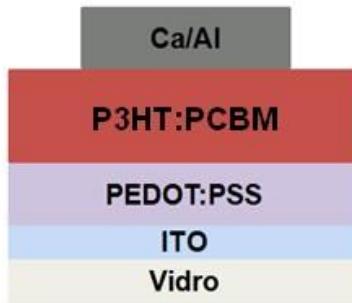


Figura 10. Estrutura final das células preparadas neste trabalho. Fonte: Elaborada pelo autor.

#### *4.2.4. Preparação de protótipo de célula solar*

Além dos dispositivos preparados sobre substratos de vidro recoberto com ITO nas dimensões 16 mm x 21 mm, preparou-se, por fim, um protótipo de células solares sobre substrato com dimensões maiores (5 cm de lado), onde foram escolhidas regiões estratégicas de limpeza da camada ativa, estabelecendo o contato entre o ITO e o eletrodo metálico de tal forma que cinco células fossem dispostas em série. Para isso, utilizou-se o solvente que apresentou o melhor resultado de eficiência na etapa anterior (preparação de OPVs com substrato de dimensões menores). A Figura 11 mostra as máscaras utilizadas nas fases de decapagem do ITO (fotolitografia) e de metalização do protótipo de célula solar confeccionado.

Tendo em mente o comportamento típico de uma célula fotovoltaica ideal sob iluminação ou não, espera-se que o protótipo de células solares preparado tenha potencial de circuito aberto ( $V_{oc}$ ) próximo a cinco vezes o valor da célula unitária de maior desempenho.

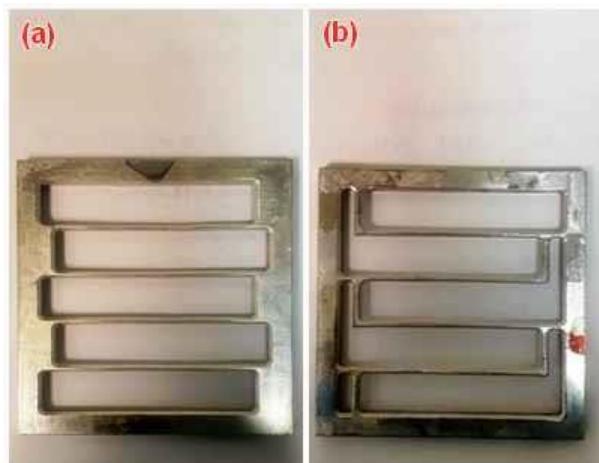


Figura 11. Máscaras utilizadas nos processos de fotolitografia e metalização do protótipo de células solares em série. a) fotolitografia; b) – metalização. Fonte: Elaborada pelo autor.

## 5. RESULTADOS E DISCUSSÃO

### 5.1. Estudo preliminar da preparação das soluções

A Figura 12 mostra as soluções de P3HT dissolvido em ciclohexanona e em xileno à concentração 0,01 mg/mL utilizadas nas análises espectroscópicas.



Figura 12. Imagem das soluções de P3HT dissolvido em xileno (à direita) e ciclohexanona (à esquerda) de concentração 0,01mg/mL. Fonte: Elaborada pelo autor.

A Figura 13 mostra as soluções de P3HT dissolvido em 2-metilciclohexanona, 2-secbutilciclohexanona, 2-metiltetrahidrofurano e ciclopentilmetyléter à concentração 0,01 mg/mL utilizadas nas análises espectrofotométricas.



Figura 13. Soluções de P3HT dissolvido em 2-metilciclohexanona (1), 2-secbutilciclohexanona (2), 2-metiltetrahidrofurano (3) e ciclopentilmetyléter (4) de concentração 0,01mg/mL. Fonte: Elaborada pelo autor.

A capacidade de absorção de luz na região do ultravioleta-visível é uma propriedade significativamente importante para um material a ser estudado como camada ativa em células solares: quanto mais larga e intensa for esta absorção, mais alta é a probabilidade de que o material apresente uma boa resposta à luz solar. A Figura 14 contém um gráfico que ilustra os valores normalizados de absorbância corrigida do P3HT nas soluções com concentração 0,01mg/mL para diferentes comprimentos de onda. Entende-se aqui como absorbância corrigida a diferença entre os valores de absorbância obtidos para as análises das soluções P3HT + solvente e os valores obtidos nas análises dos solventes puros respectivos, para cada comprimento de onda.

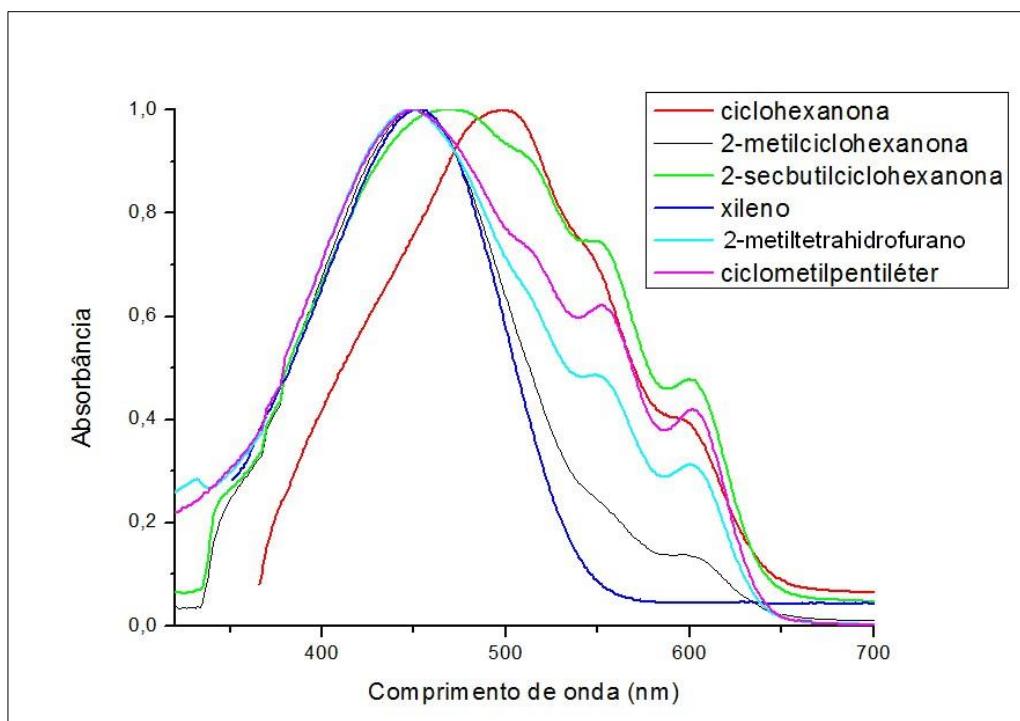


Figura 14. Absorbância do P3HT em diferentes solventes a 0,01mg/mL para diferentes comprimentos de onda. Fonte: Elaborada pelo autor.

Uma vez que ‘ombros’ são muito recorrentes nas curvas que representam as soluções de P3HT em 2-secbutilciclohexanona, 2-metiltetrahidrofurano e ciclopentilmetyléter, pode-se inferir que, nesses solventes, o polímero forma maior quantidade de agregados (nanoagregados ou nanoestruturas), como consta na literatura (SAMITSU et al., 2008; KIM et al., 2010). Quanto ao comprimento de onda máximo, ou seja, o comprimento de onda da radiação predominantemente absorvida, observou-se que, para o xileno, a 2-metilciclohexanona, o 2-metiltetrahidrofurano e o ciclometilpentiléter, esse valor é aproximadamente 455 nm; para a 2-secbutilciclohexanona, 470 nm; e para a ciclohexanona, 498 nm. Essa diferença nos remete à ideia de que o polímero absorve radiação de maior teor energético quando dissolvido em xileno, 2-metilciclohexanona, 2-metiltetrahidrofurano ou ciclometilpentiléter, visto que o comprimento de onda da radiação majoritariamente absorvida nessas soluções está mais próximo dos valores de radiação UV no espectro de radiação eletromagnética do que o comprimento de onda máximo das soluções que contém 2-secbutilciclohexanona ou ciclohexanona como solvente, como pode ser visualizado na Figura 15.

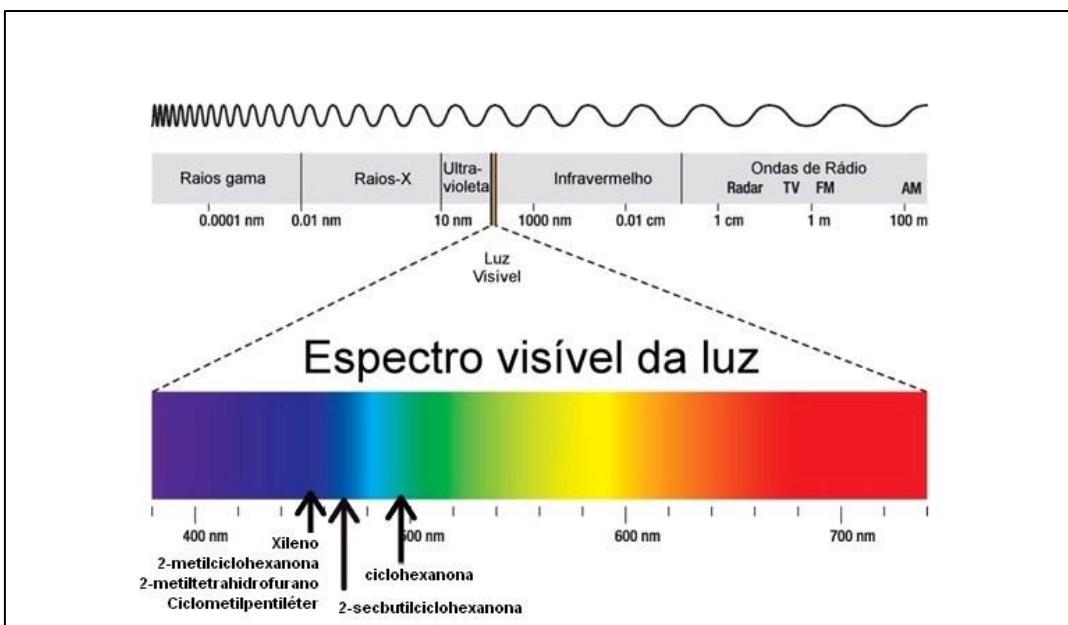


Figura 15. Espectro eletromagnético com comprimento de onda máximo das soluções de P3HT em diferentes solventes a 0,01mg/mL em destaque. Fonte: Adaptada de Peter Hermes Furian / Shutterstock (2016).

Estas variações do espectro de absorção da luz do material em função das propriedades do meio são conhecidas como cromismo. Quando as propriedades do meio em questão são os solventes utilizados, o fenômeno é denominado solvatocromismo, como o observado acima. Outras propriedades a serem levadas em consideração podem ser a presença de íons (ionocromismo), a variação da pressão aplicada (piezocromismo), a interação específica de parte das moléculas com agentes químicos ou bioquímicos (biocromismo), ou mesmo a variação da temperatura (termocromismo) (Leclerc, 1999).

As figuras a seguir mostram os espectros obtidos para a solução de P3HT em ciclohexanona, xileno, 2-metilciclohexanona, 2-secbutilciclohexanona, 2-metiltetrahidrofurano e ciclopentilmetiléter, respectivamente, a 0,01 mg/mL em diferentes temperaturas no espectrofotômetro de fibra óptica, para avaliação da existência de termocromismo.

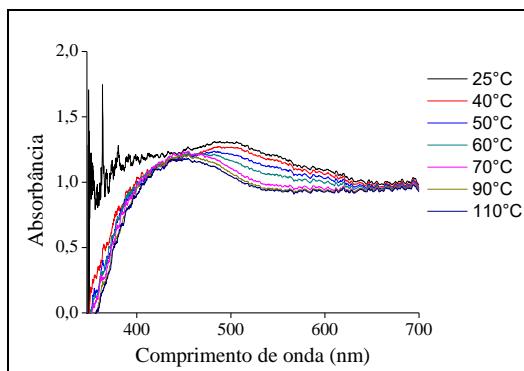


Figura 16. Absorbância da solução de ciclohexanona + P3HT 0,01mg/mL para diferentes temperaturas (Espectrofotômetro Ocean de fibra óptica). Fonte: Elaborada pelo autor.

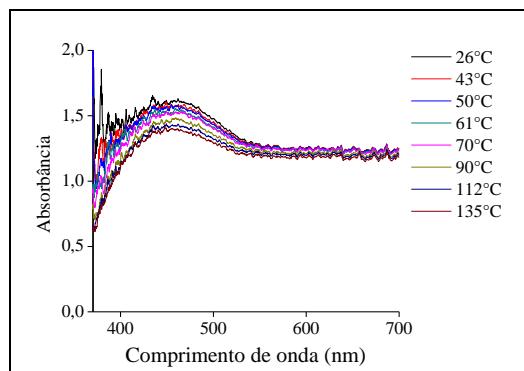


Figura 17. Absorbância da solução de Xileno + P3HT a 0,01mg/mL para diferentes temperaturas (Espectrofotômetro Ocean de fibra óptica). Fonte: Elaborada pelo autor.

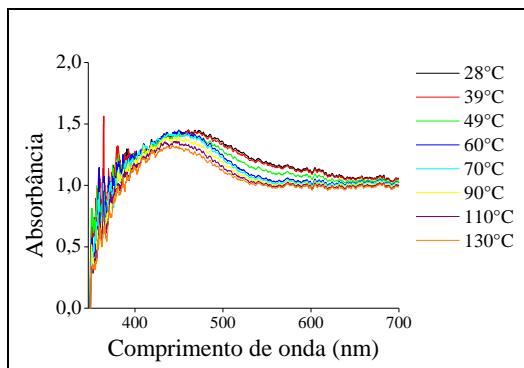


Figura 18. Absorbância da solução de 2-metilciclohexanona + P3HT a 0,01mg/mL para diferentes temperaturas (Espectrofotômetro Ocean de fibra óptica). Fonte. Elaborado pelo autor.

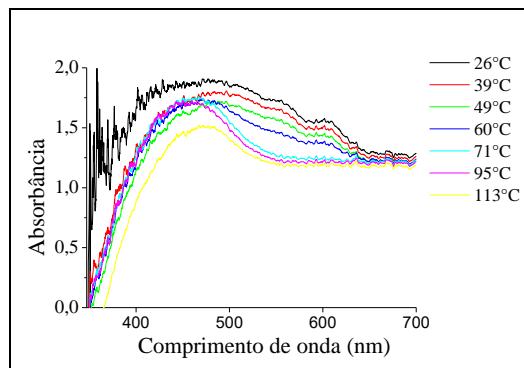


Figura 19. Absorbância da solução de 2-secbutilciclohexanona + P3HT a 0,01 mg/mL para diferentes temperaturas (Espectrofotômetro Ocean de fibra óptica). Fonte: Elaborada pelo autor.

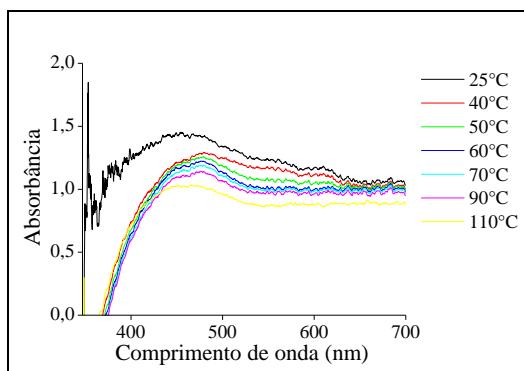


Figura 20. Absorbância da solução de 2-metiltetrahidrofurano + P3HT a 0,01 mg/mL para diferentes comprimentos de onda, em diferentes temperaturas (Espectrofotômetro Ocean de fibra óptica). Fonte: Elaborada pelo autor.

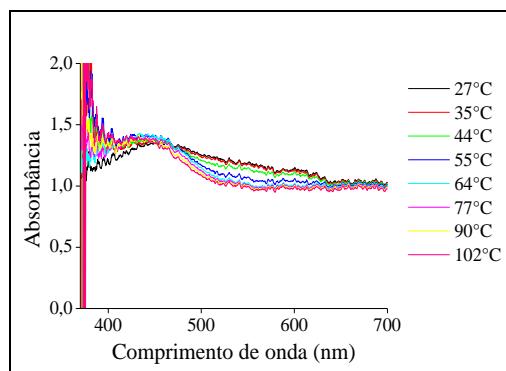


Figura 21. Absorbância da solução de ciclopentilmetiléter + P3HT a 0,01 mg/mL para diferentes comprimentos de onda, em diferentes temperaturas (Espectrofotômetro Ocean de fibra óptica). Fonte: Elaborada pelo autor.

Observou-se que, para os solventes analisados, com o aumento da temperatura, houve o deslocamento dos comprimentos de onda máximos para valores menores, ou seja, as radiações predominantemente absorvidas pelo polímero se tornam mais energéticas. No caso da 2-secbutilciclohexanona, foi obtido um espectro mais alargado, denotando uma boa aptidão do polímero para absorção de radiação nessa solução. Além disso, notase que as curvas adquirem um formato mais regular com o aumento da temperatura, denotando que o polímero adquire uma conformação menos agregada quando a solução é aquecida (menor quantidade de ‘ombros’). Vale salientar que esta mudança ocorre de forma menos acentuada no caso da 2-metilciclohexanona, denotando que não havia um estado de agregação tão intenso do polímero nesta solução no início do aquecimento.

As Figuras a seguir mostram os comprimentos de onda de máxima absorção em diferentes temperaturas para cada um dos solventes em questão, evidenciando o deslocamento de comprimentos de onda máximos para valores menores quando as soluções são submetidas ao aquecimento.

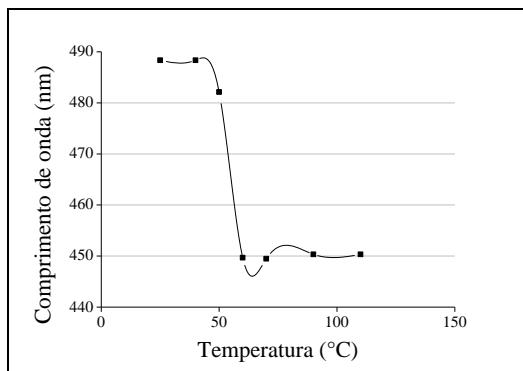


Figura 22. Ciclohexanona + P3HT 0,01 mg/ml - Comprimento de onda de máxima absorbância para diferentes temperaturas (espectrofotômetro de fibra óptica). Fonte: Elaborada pelo autor.

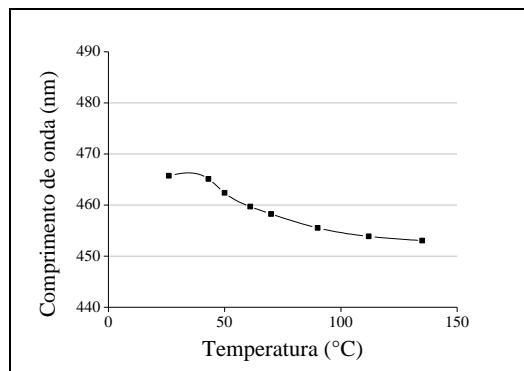


Figura 24. Xileno + P3HT 0,01 mg/mL - Comprimento de onda de máxima absorbância para diferentes temperaturas (espectrofotômetro de fibra óptica). Fonte: Elaborada pelo autor.

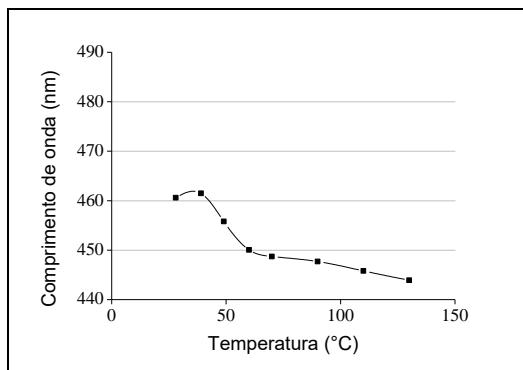


Figura 23. 2-Metilciclohexanona + P3HT 0,01 mg/mL - Comprimento de onda de máxima absorbância para diferentes temperaturas (espectrofotômetro de fibra óptica). Fonte: Elaborada pelo autor.

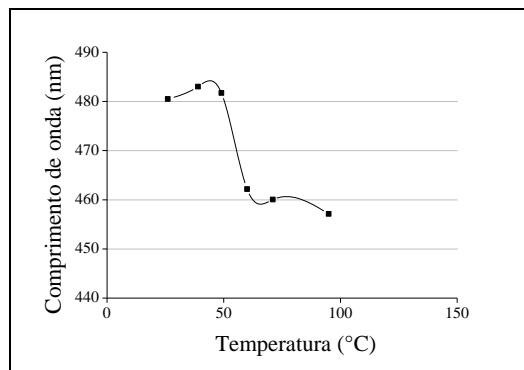


Figura 25. 2-Secbutilciclohexanona + P3HT 0,01 mg/mL - Comprimento de onda de máxima absorbância para diferentes temperaturas (espectrofotômetro de fibra óptica). Fonte: Elaborada pelo autor.

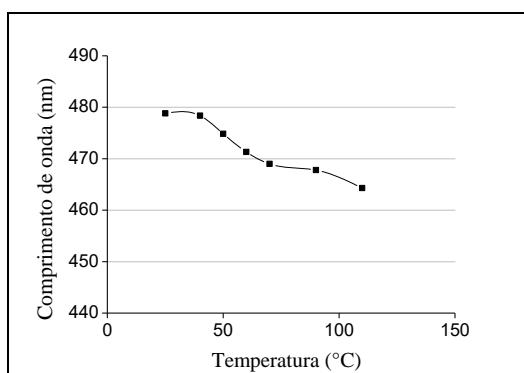


Figura 26. 2-Metiltetrahidrofurano + P3HT 0,01 mg/mL - Comprimento de onda de máxima absorbância para diferentes temperaturas (espectrofotômetro de fibra óptica).

Fonte: Elaborada pelo autor.

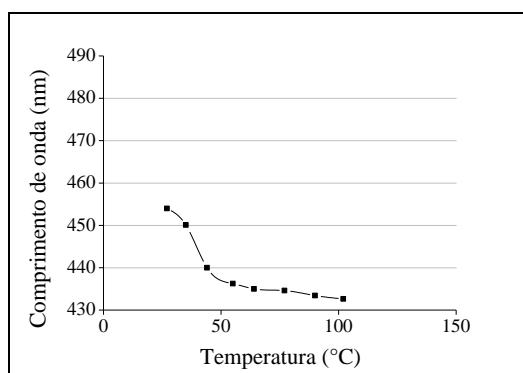


Figura 27. Ciclopentilmetiléter + P3HT 0,01 mg/mL - Comprimento de onda de máxima absorbância para diferentes temperaturas (espectrofotômetro de fibra óptica). Fonte: Elaborada pelo autor.

O comportamento das curvas nesses gráficos evidencia a mudança de conformação do polímero quando as soluções são aquecidas, em maior ou menor grau dependendo do solvente envolvido. No caso das soluções de P3HT em ciclohexanona, 2-secbutilciclohexanona e 2-metiltetrahidrofuran, por exemplo, houve variações de aproximadamente 38, 23 e 21 nm, respectivamente, para os valores de comprimento de onda. Já no caso da solução do polímero em 2-metilciclohexanona, essa variação ocorreu de forma menos acentuada (aproximadamente 17 nm), denotando que não havia um estado de agregação tão intenso quanto no caso anterior.

Como a solução de P3HT em ciclohexanona mostrou o maior termocromismo, este solvente foi utilizado para explorar o termocromismo na mistura de P3HT:PCBM, que posteriormente seria utilizada na preparação de um protótipo de dispositivos fotovoltaicos orgânicos. A Figura 28 a seguir mostra os espectros obtidos para a solução de P3HT:PCBM em ciclohexanona a 0,05 mg/mL em diferentes temperaturas no espectrofotômetro de fibra óptica.

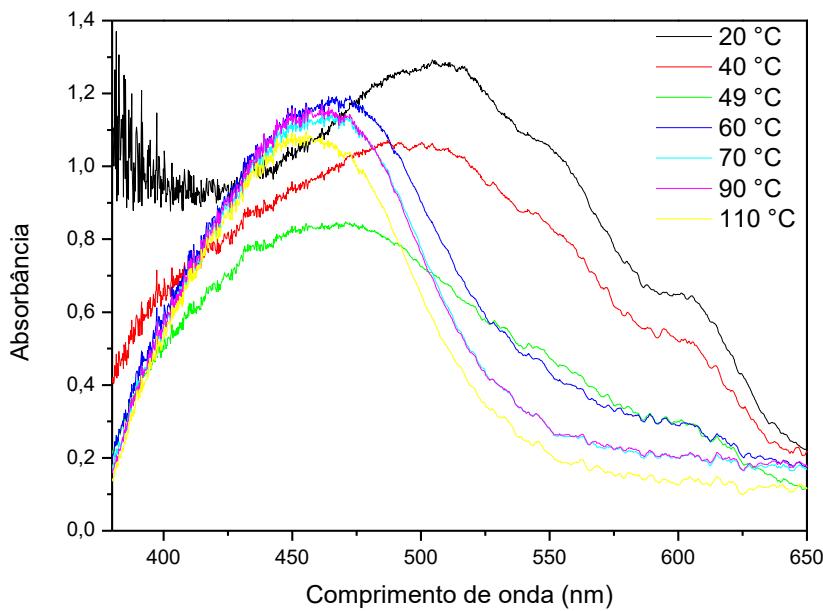


Figura 28. Absorbância da solução de ciclohexanona + P3HT:PCBM a 0,05 mg/mL para diferentes comprimentos de onda, em diferentes temperaturas (Espectrofotômetro Ocean de fibra óptica). Fonte: Elaborada pelo próprio autor.

Pode-se observar que, com o aumento da temperatura, houve deslocamento dos comprimentos de onda máximos para valores menores, da mesma forma que foi observado para os casos da dissolução de apenas P3HT nos solventes estudados. Logo, também se entende que as radiações predominantemente absorvidas se tornam mais energéticas. Além disso, também da mesma forma que nos estudos anteriores, nota-se que as curvas adquirem um formato mais estreito com o aumento da temperatura, denotando que o polímero adquire uma conformação menos agregada quando a solução é aquecida e que os componentes distribuem-se de forma mais homogênea na solução. Nesse sentido, pode-se perceber que a mudança de temperatura de 49 para 60 °C é um ponto-chave na dissolução efetiva da blenda P3HT:PCBM na solução.

A Figura 29 mostra os comprimentos de onda de máxima absorbância em diferentes temperaturas para a solução de P3HT:PCBM em ciclohexanona, evidenciando que, assim como nos casos das soluções de P3HT nos diferentes solventes, ocorre deslocamento de comprimentos de onda máximos para valores menores quando as soluções são submetidas ao aquecimento.

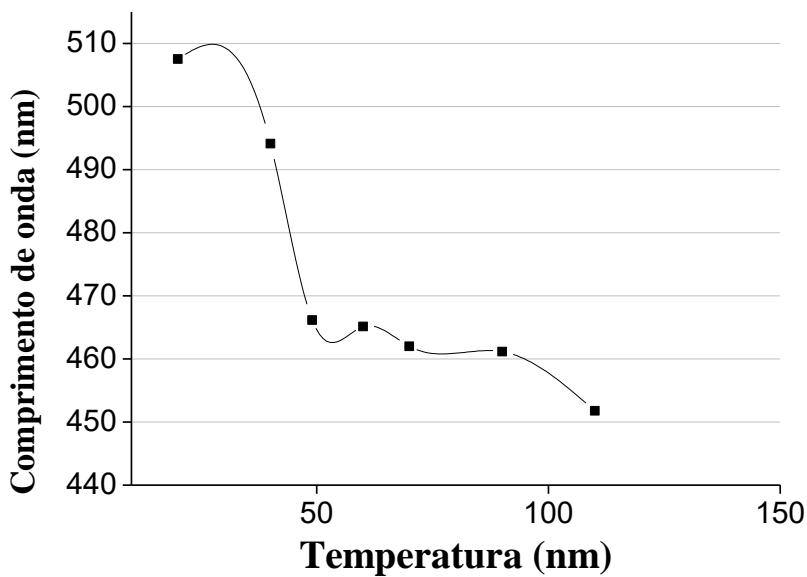


Figura 29. Absorbância da solução de ciclohexanona + P3HT:PCBM 0,05 mg/mL para diferentes temperaturas (Espectrofotômetro de fibra óptica). Fonte: Elaborada pelo próprio autor.

O comportamento das curvas nesse gráfico evidencia a mudança de conformação dos polímeros quando as soluções são aquecidas, com uma variação de comprimento de onda de máxima absorbância de aproximadamente 55 nm, ao passo que, para a solução de P3HT puro em ciclohexanona, essa variação foi da ordem de 38 nm (Figura 22). Ou seja, quando há uso da blenda P3HT:PCBM, as radiações predominantemente absorvidas pelo polímero em solução se tornam mais energéticas.

## 5.2. Estudo preliminar da preparação dos filmes

Em relação aos filmes obtidos a partir da solução de P3HT em cada um dos solventes à concentração de 10mg/mL (Figuras 30 e 31), notou-se que os filmes de ciclohexanona preparados a partir de velocidade de rotação 2100 rpm adquiriram um aspecto visualmente regular, conveniente para a preparação de OPVs. Assim, para todos os outros solventes, prosseguiu-se a análise com a velocidade de rotação de 2100 rpm. Os espectros formados no UV-vis de filmes com espessuras semelhantes (preparados a

partir de solventes diferentes) possibilitou analisar os filmes de forma comparativa (Figura 32).

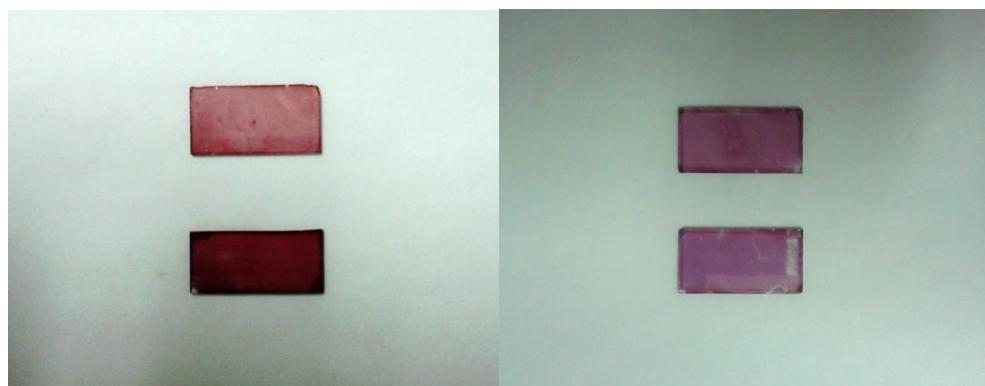


Figura 30. Filmes formados a partir de soluções de P3HT em ciclohexanona e xileno.

Na imagem à esquerda, filmes de diferentes espessuras (o mais espesso embaixo) de P3HT dissolvido em ciclohexanona. Na direita, filmes de mesma espessura de P3HT dissolvido em xileno. Fonte: Elaborada pelo autor.

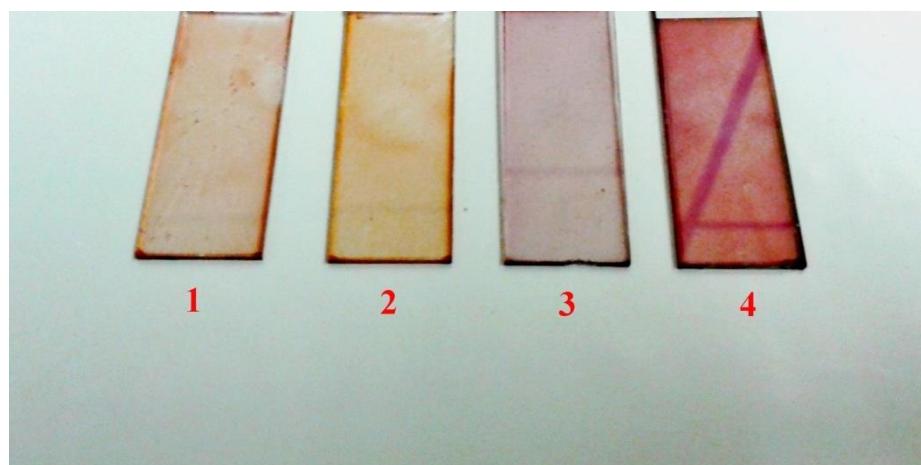


Figura 31. Filmes formados a partir de soluções de P3HT em 2-secbutilciclohexanona (1), 2-metilciclohexanona (2), 2-metiltetrahidrofurano (3) e ciclopentilmetyléter (4) à concentração de 10mg/mL. Fonte: Elaborada pelo autor.

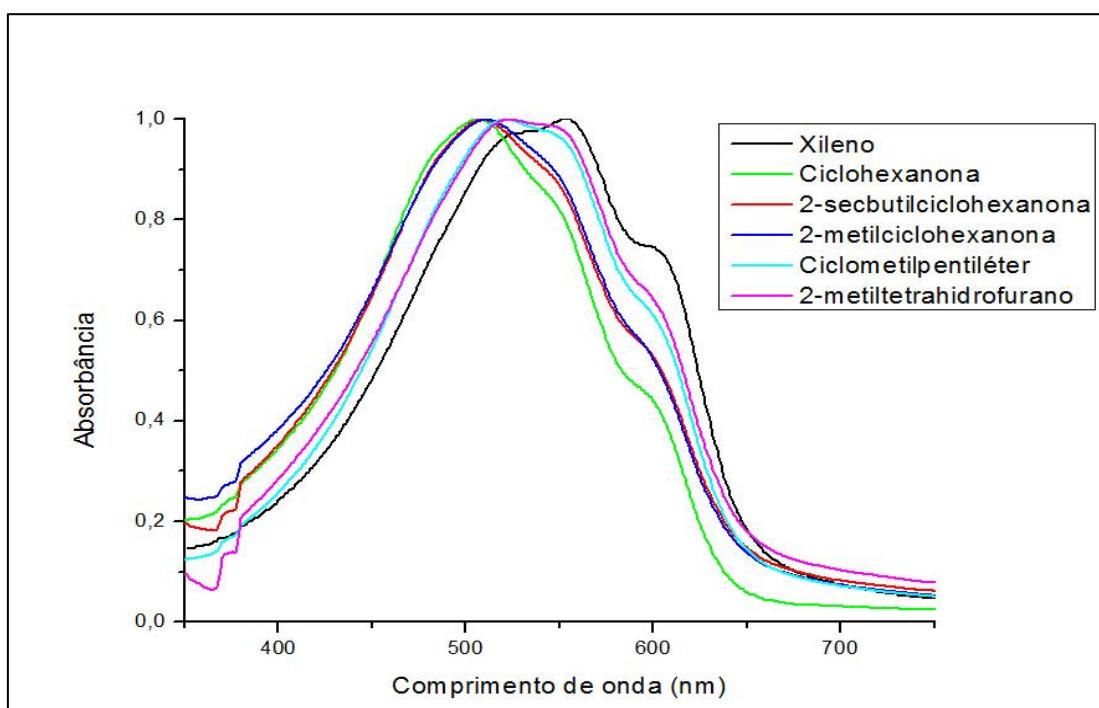


Figura 32. Absorbância normalizada de filmes de P3HT preparados a partir de soluções em diferentes solventes a 10 mg/mL para diferentes comprimentos de onda (Espectrofotômetro UV-vis). Fonte: Elaborada pelo próprio autor.

A partir das curvas obtidas neste gráfico, presume-se que no caso da 2-metilciclohexanona, assim como nas soluções de concentrações 0,01 mg/mL, o P3HT se encontra em conformação pouco agregada (quantidade de ‘ombros’ reduzida). Já no caso do filme de xileno, embora nas soluções mais diluídas se pudesse presumir que o polímero se encontrava em forma pouco agregada quando dissolvido neste solvente, no caso dos filmes é possível que ocorra o processo inverso, em decorrência da elevada quantidade de ‘ombros’ em seu espectro. No caso da 2-secbutilciclohexanona, a situação contrária é verificada (solução diluída com polímero de forma mais agregada e filme de forma pouco agregada). Por fim, no caso das soluções de 2-metiltetrahidrofurano e do ciclopentilmetilete, o comportamento de suas respectivas curvas no gráfico mostra ‘ombros’ mais definidos, indicando que estes filmes apresentam morfologias com possível formação de nanoagregados (assim como possivelmente ocorre em suas soluções diluídas).

Além disso, vale salientar que alguns dos filmes têm seus picos de absorbância em comprimentos de onda correspondentes a radiações de maior teor energético (mais

próximas da faixa UV), como o caso dos filmes de P3HT em ciclohexanona, 2-metilciclohexanona e 2-secbutilciclohexanona, que absorvem maior quantidade de radiação com comprimentos de onda menores, inversamente ao que se verifica nas soluções de concentrações reduzidas contendo tais solventes. Já as diferenças nos valores máximos de absorbância possivelmente se devem a pequenas diferenças nas espessuras dos filmes.

A Figura 33 contém as imagens feitas em microscópio dos filmes formados por soluções de P3HT nos solventes estudados à concentração de 10 mg/mL.

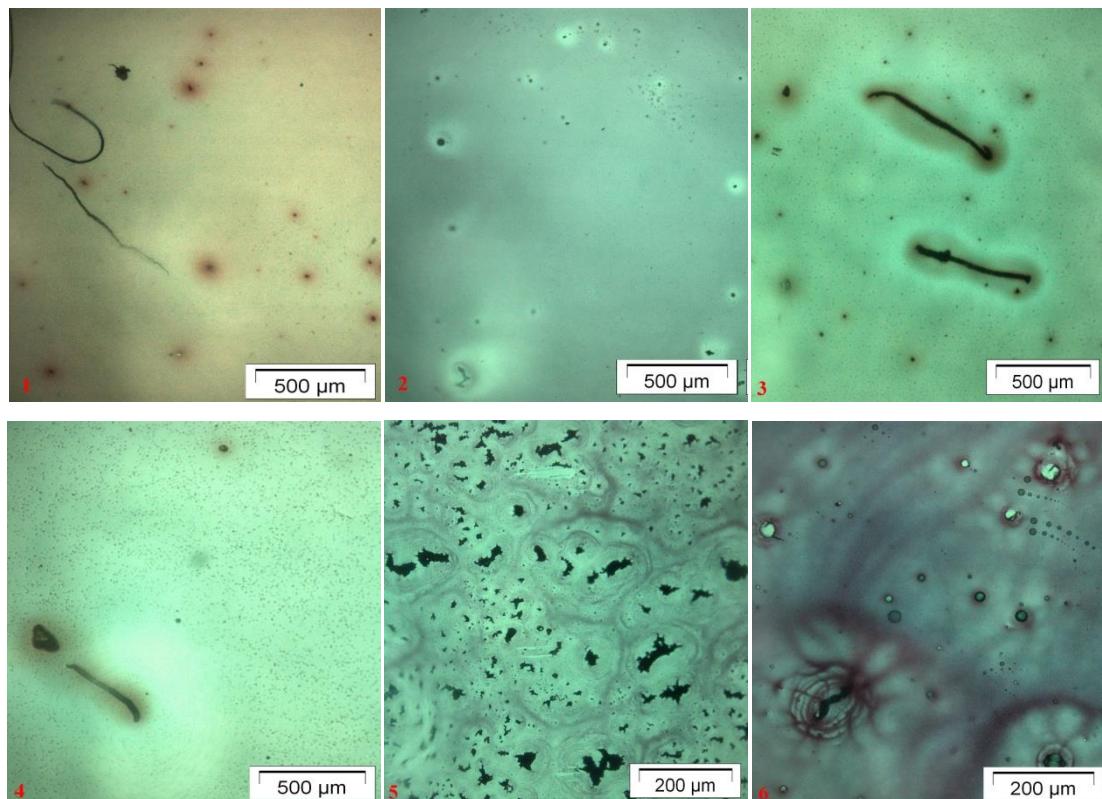


Figura 33. Imagens microscópicas dos filmes formados por soluções de P3HT em ciclohexanona (1), xíleno (2), 2-metilciclohexanona (3), 2-secbutilciclohexanona (4), 2-metiltetrahidrofurano (5) e ciclopentilmetiléter (6) à concentração de 10 mg/mL. Fonte: Elaborada pelo próprio autor.

A partir dessas imagens, puderam ser observadas partículas de poeira nos filmes de P3HT em ciclohexanona, 2-metilciclohexanona e 2-secbutilciclohexanona, as quais accidentalmente aderiram às superfícies das lâminas ou dos filmes durante a manipulação dos mesmos. Além disso, notou-se que a dissolução do polímero ocorreu de forma mais

efetiva nos filmes de ciclohexanona, xileno e 2-secbutilciclohexanona, produzindo uma quantidade menor de agregados, diferentemente do que se observa no caso dos filmes de ciclopentilmetiléter e, principalmente, 2-metiltetrahidrofurano, estando evidente neste último a abundância de aglomerados que podem estar ligadas a um processo de cristalização, comportamento este desejável em filmes condutores de OPVs. Logo, as observações feitas nas análises espectrofotométricas dos filmes foram confirmadas pelas observações do estudo microscópico dos mesmos, evidenciando a abundância de aglomerados nos filmes de P3HT em ciclopentilmetiléter e, principalmente, 2-metiltetrahidrofurano. Vale ainda salientar que as colorações dos filmes nas imagens não correspondem às suas cores verdadeiras. Tais colorações foram manipuladas computacionalmente a fim de facilitar a visualização dos filmes.

Assim, nessa etapa do estudo, os filmes formados pela dissolução de P3HT em ciclopentilmetiléter e 2-metiltetrahidrofurano despontaram como potenciais alternativas aos solventes comumente usados para a fabricação de dispositivos fotovoltaicos orgânicos. Logo, para o aprofundamento deste estudo e verificação direta dos resultados obtidos nessa etapa, fez-se necessária a verificação dos efeitos dos solventes utilizados sobre a performance dos dispositivos, relatada nos tópicos a seguir.

### **5.3. Estudo de dispositivos de camada simples**

As Figura 34 e Figura 35 mostram os dispositivos de camada simples de P3HT processadas pelos diferentes solventes.. Nesta etapa, o 1,2-diclorobenzeno (solvente comumente utilizado na preparação de OPVs) foi utilizado como padrão de comparação de dispositivos convencionais. Além disso, no caso da 2-metilciclohexanona, optou-se por depositar a camada ativa também com o substrato quente, uma vez que, com substrato à temperatura ambiente, houve dificuldade de secagem do filme. Nas imagens, os contatos metálicos dos dispositivos encontram-se degradados em virtude do contato com a umidade do ar e da consequente reação com a mesma.

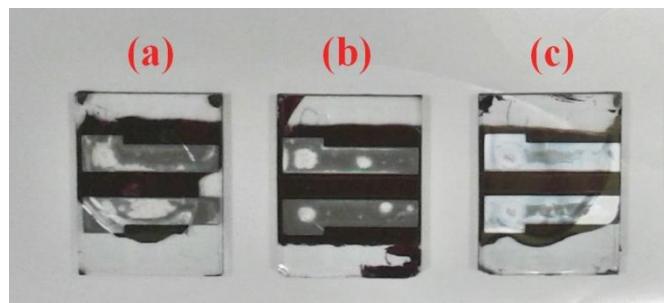


Figura 34. Dispositivos fotovoltaicos orgânicos preparados a partir de diferentes solventes. (a) - 1,2-diclorobenzeno; (b) - 2-metiltetrahidrofurano e (c) - ciclohexanona. Fonte. Elaborada pelo autor.

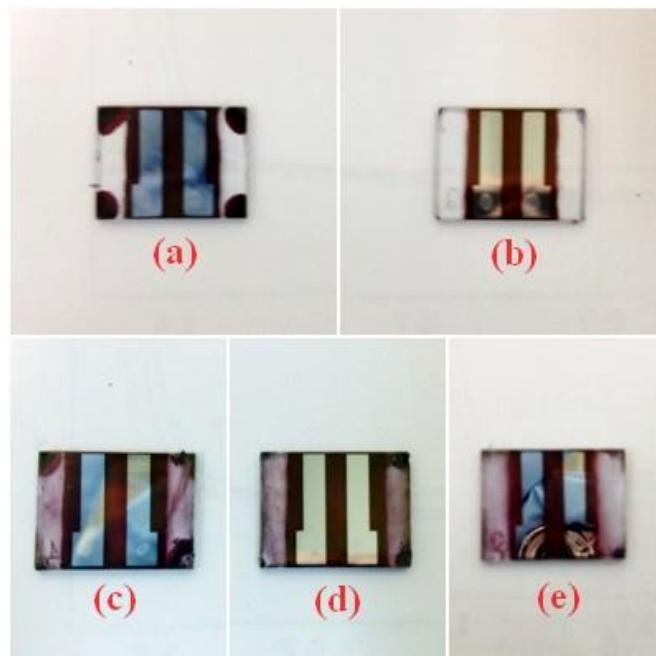


Figura 35. Dispositivos fotovoltaicos orgânicos preparados a partir de diferentes solventes. (a) – Xileno; (b) – Ciclopentilmetiléter; (c) – 2-Metilciclohexanona (substrato quente); (d) – 2-Metilciclohexanona (substrato à temperatura ambiente) e (e) – 2-secbutilciclohexanona.

Os dispositivos foram analisados no escuro e expostos à luz semelhante a luz solar (simulador solar), aplicando-se diferentes tensões em seus contatos e medindo-se a corrente produzida. A seguir, são mostradas as curvas corrente x tensão características (curvas J-V) obtidas para os filmes preparados com cada um dos solventes utilizados. Cada filme abriga 6 dispositivos, como descrito na Figura 6.

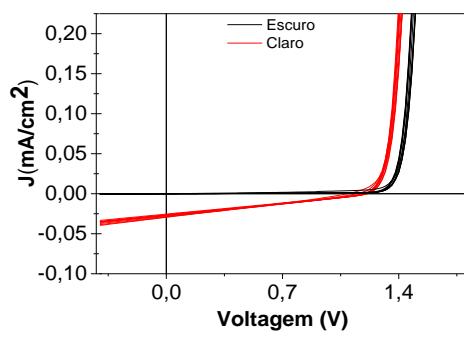


Figura 36. Curvas J-V de células solares de camada ativa preparada a partir de solução de P3HT em 1,2-diclorobenzeno a 30 mg/mL. Fonte: Elaborada pelo autor.

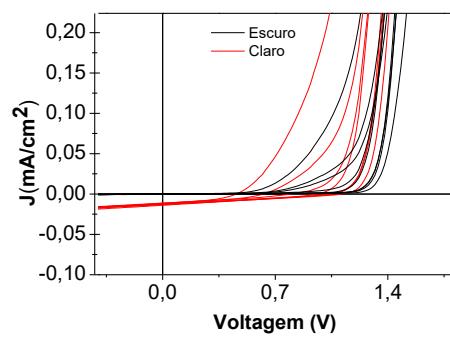


Figura 38. Curvas J-V de células solares de camada ativa preparada a partir de solução de P3HT em ciclohexanona a 20 mg/mL. Fonte: Elaborada pelo autor.

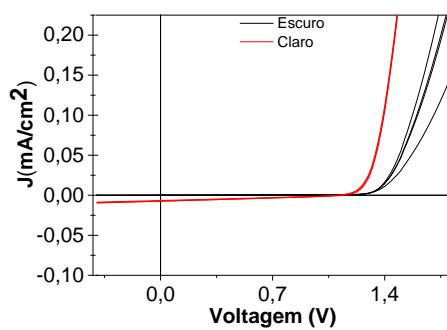


Figura 37. Curvas J-V de células solares de camada ativa preparada a partir de solução de P3HT em 2-metiltetrahidrofurano a 20 mg/mL. Fonte. Elaborada pelo autor.

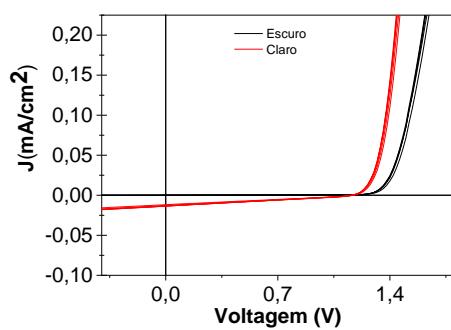


Figura 39. Curvas J-V de células solares de camada ativa preparada a partir de solução de P3HT em ciclopentilmetiléter. Fonte. Elaborada pelo autor.

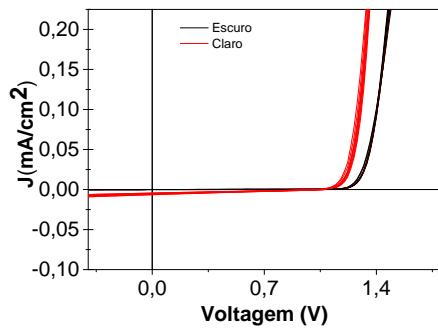


Figura 40. Curvas J-V de células solares de camada ativa preparada a partir de solução de P3HT em xileno.

Fonte: Elaborada pelo autor.

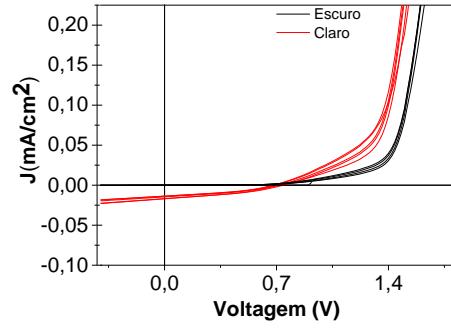


Figura 42. Curvas J-V de células solares de camada ativa preparada a partir de solução de P3HT em 2-metilciclohexanona (substrato à temperatura ambiente). Fonte: Elaborada pelo autor.

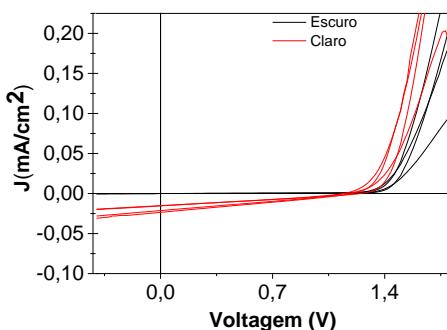


Figura 41. Curvas J-V de células solares de camada ativa preparada a partir de solução de P3HT em 2-metilciclohexanona (substrato a 120 °C).

Fonte: Elaborada pelo autor.

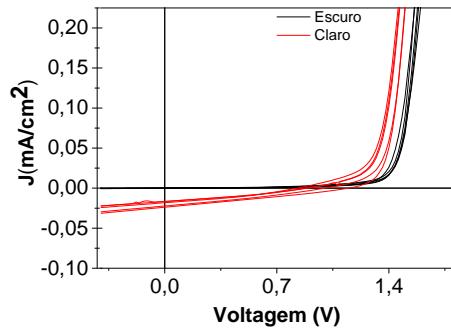


Figura 43. Curvas J-V de células solares de camada ativa preparada a partir de solução de P3HT em 2-secbutilciclohexanona. Fonte: Elaborada pelo autor.

O principal intuito da construção destes dispositivos de camada simples, apesar de sua eficiência ser comprovadamente baixa (Ray et al. 2015), foi observar o efeito do solvente utilizado na preparação dos filmes sobre as propriedades fotovoltaicas do P3HT, traduzidas pelo surgimento de fotocorrente, pelo formato das curvas JxV e, consequentemente, pelos parâmetros de voltagem/corrente de circuito aberto, fator de preenchimento e eficiência. Em todos os casos, observou-se o surgimento da fotocorrente ao iluminar-se o dispositivo, cujo valor em módulo variou dependendo do solvente utilizado na preparação da camada ativa.

Em alguns casos, houve grande disparidade das curvas geradas pelos vários dispositivos preparados no mesmo filme (ou dispositivos do mesmo tipo), indicando que, nestes casos, a camada ativa não estava suficientemente homogênea ou houve algum problema nos contatos destes dispositivos.

A partir dessas curvas J-V correspondentes aos dispositivos de P3HT em diferentes solventes, foram calculados os parâmetros de  $J_{sc}$ ,  $V_{oc}$ , FF e PCE relativos a cada tipo de dispositivo. A Tabela 3 a seguir mostra os parâmetros obtidos para cada tipo de célula solar preparada e os valores médios de espessura da camada ativa desses dispositivos.

Tabela 3. Variação dos valores de corrente de curto circuito ( $J_{sc}$ ) e potencial de circuito aberto ( $V_{oc}$ ), fator de preenchimento (FF) e eficiência (PCE) máximos e valor médio de espessura de cada tipo de dispositivo de camada simples preparado a partir de diferentes solventes.

Solvente	$J_{sc}$ (mA/cm <sup>2</sup> )	$V_{oc}$ (V)	FF máximo (%)	PCE máximo (%)	Espessura (nm)
<b>1,2-Diclorobenzeno</b>	Variando de 0,0251 a 0,0284	Variando de 1,10 a 1,20	27	0,0081	166±7
<b>2-Metiltetrahidrofurano</b>	0,0075	1,15	27	0,0020	640±75
<b>Ciclohexanona</b>	0,0127	Variando de 0,47 a 1,11	28	0,0035	429±16
<b>Ciclopentilmetyléter</b>	Variando de 0,0118 a 0,0135	1,18	26	0,0036	358±7
<b>Xileno</b>	Variando de 0,004 a 0,006	Variando de 1,02 a 1,08	23	0,0016	567±56
<b>2-Metilciclohexanona (substrato a 120 °C)</b>	Variando de 0,015 a 0,023	Variando de 1,13 a 1,20	27	0,0067	268±44
<b>2-Metilciclohexanona (substrato à temperatura ambiente)</b>	Variando de 0,014 a 0,017	Variando de 0,68 a 0,74	36	0,0040	261±9
<b>2-Secbutilciclohexanona</b>	Variando de 0,016 a 0,024	Variando de 0,82 a 1,15	27	0,0066	194±9

Fonte: Elaborada pelo autor.

A partir desses dados, observa-se que, para os solventes 2-metilciclohexanona (principalmente com substrato a 120 °C) e 2-secbutilciclohexanona, foram obtidos valores de PCE comparativamente mais altos: 0,0067% para 2-metilciclohexanona com substrato a 120 °C e 0,0066% para 2-secbutilciclohexanona. Comparando tais valores com aquele obtido para o dispositivo preparado a partir de 1,2-diclorobenzeno (solvente convencional), nota-se que a eficiência do dispositivo preparado a partir de 2-

metilciclohexanona com substrato a 120 °C corresponde a 82,7% do valor total da eficiência correspondente ao dispositivo de 1,2-diclorobenzeno, enquanto para o caso dos dispositivos preparados com 2-secbutilciclohexanona, a eficiência máxima obtida corresponde a 81,5% do valor dessa mesma eficiência. Logo, entendeu-se que, para a finalidade em questão, o uso desses dois solventes alternativos deveria ser mais amplamente estudado.

Para os dispositivos preparados a partir de 2-metiltetrahidrofurano e xileno, por sua vez, foram obtidas eficiências baixas (0,0020% e 0,0016%, respectivamente), indicando que o uso desses solventes é pouco promissor para a confecção de OPVs. Vale salientar que os valores obtidos dos parâmetros, embora destoem daqueles observados para dispositivos com sistema de heterojunção, são compatíveis com os valores verificados na literatura para dispositivos com estrutura de camada simples (RAY et al., 2015).

Em relação à espessura dos filmes obtidos a partir de cada um dos solventes, observou-se que as camadas ativas preparadas a partir de P3HT em 2-metilciclohexanona apresentaram espessura dentro da faixa ideal (conforme item 4.2.2., página 36) para uma boa performance dos dispositivos (entre 220 e 280nm), enquanto a camada ativa composta por 2-secbutilciclohexanona ainda pode ter sua espessura otimizada de modo a se alcançar uma eficiência melhor. Além disso, observou-se um grande desvio entre as medidas de espessura dos filmes preparados a partir de xileno e 2-metilciclohexanona com substrato quente. Isso ocorreu devido à rápida evaporação do solvente durante a rotação somada levando a uma espessura do filme consideravelmente maior na região das bordas. Além disso, para dispositivos preparados a partir de xileno, foram observadas espessuras da camada ativa muito altas, o que pode ter influenciado negativamente na eficiência desses dispositivos.

Sendo assim, os valores de eficiência de conversão de potência (PCE) obtidos para cada tipo de dispositivo sugerem que os solventes 2-metilciclohexanona e 2-secbutilciclohexanona podem ser potenciais alternativas aos solventes comumente usados para confecção da camada ativa em dispositivos de camada simples.

Como os dispositivos de camada simples tem baixa eficiência, o uso destes solventes na construção de dispositivos mistos de heterojunção com derivado do fulereno (P3HT:PCBM) como camada ativa também foi testado.

#### 5.4. Estudo de dispositivos de heterojunção

Os dispositivos de heterojunção de dimensões 16 mm x 21 mm confeccionados que mostraram-se adequados do ponto de vista estético podem ser visualizados nas Figura 44 e Figura 45 a seguir. Assim como no caso dos dispositivos de camada simples, para alguns solventes, a deposição da camada ativa foi feita com substrato tanto à temperatura ambiente quanto a elevadas temperaturas, de modo a se testar diferentes condições de confecção dos dispositivos e, assim, otimizar sua preparação.



Figura 44. Dispositivos fotovoltaicos orgânicos preparados a partir da mistura P3HT:PCBM em 1,2-diclorobenzeno e ciclohexanona. 1,2-Diclorobenzeno abaixo e ciclohexanona acima. Fonte: Elaborada pelo autor.

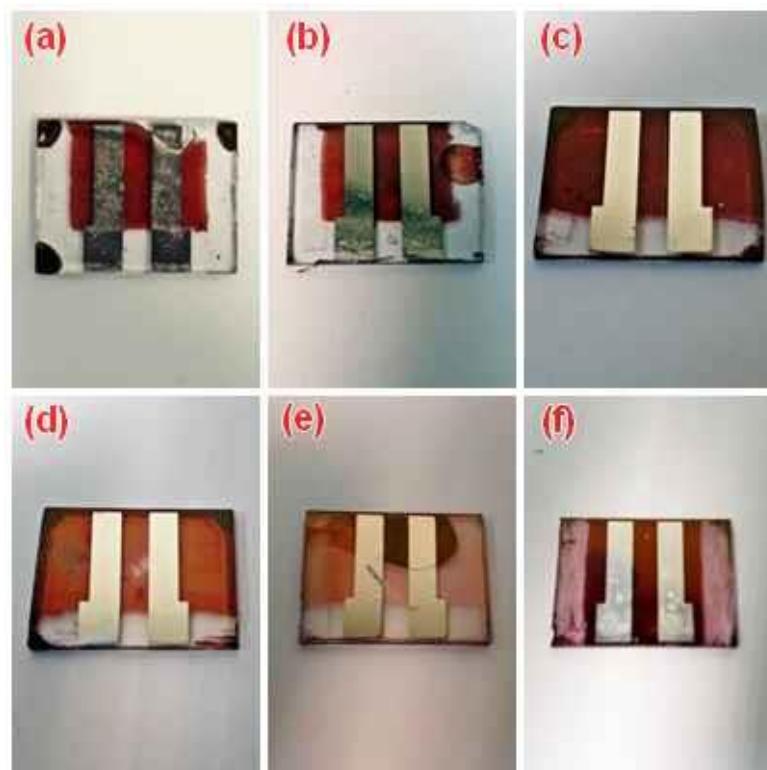


Figura 45. Dispositivos fotovoltaicos orgânicos preparados a partir da mistura P3HT:PCBM em cada um dos solventes. (a) – 2-metiltetrahidrofurano (substrato à temperatura ambiente); (b) – 2-metiltetrahidrofurano (substrato quente); (c) – 2-Metilciclohexanona (substrato à temperatura ambiente); (d) – 2-Metilciclohexanona (substrato quente); (e) – 2-Sec-butilciclohexanona (substrato à temperatura ambiente) e (f) – Ciclopentilmetyléter (substrato quente). Fonte. Elaborada pelo autor.

Vale ressaltar que, nas imagens, os contatos metálicos dos dispositivos encontram-se degradados devido ao contato com a umidade do ar e à consequente reação com a mesma, assim como ocorreu com os dispositivos de camada simples. Cada substrato mostrado acima contém seis dispositivos embutidos, conforme esquema mostrado na Figura 6.

Nas figuras a seguir, são mostradas as curvas corrente x tensão características (curvas J-V) obtidas para os dispositivos de heterojunção preparados a partir de cada um dos solventes utilizados.

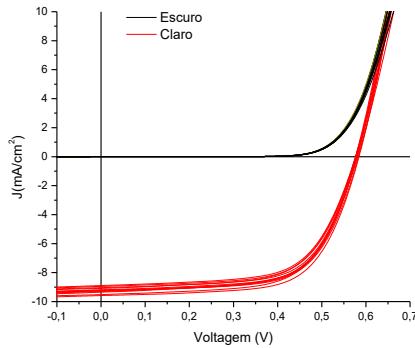


Figura 46. Curvas J-V de células solares com camadas ativas preparadas a partir de solução de P3HT em 1,2-diclorobenzeno. Fonte: Grupo de Polímeros Bernhard Gross (2019).

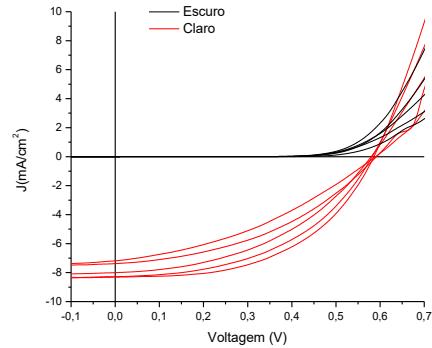


Figura 48. Curvas J-V de células solares com camadas ativas preparadas a partir de solução de P3HT em ciclohexanona. Fonte: Elaborada pelo autor.

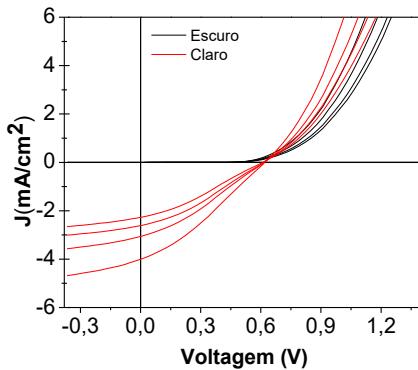


Figura 47. Curvas J-V de células solares com camadas ativas preparadas a partir de solução de P3HT:PCBM em 2-metiltetrahidrofurano (substrato a 120°C). Fonte: Elaborada pelo autor.

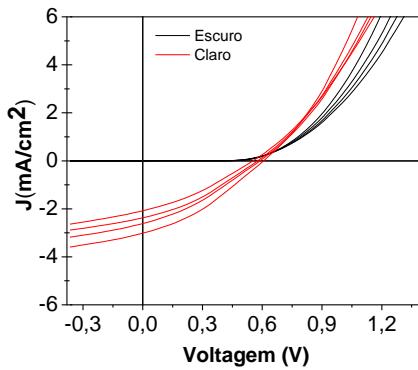


Figura 49. Curvas J-V de células solares com camadas ativas preparadas a partir de solução de P3HT:PCBM em 2-metiltetrahidrofurano (substrato à temperatura ambiente). Fonte: Elaborada pelo autor.

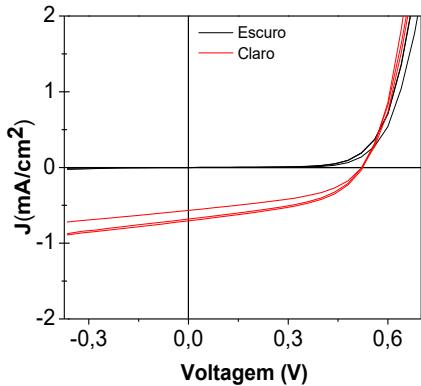


Figura 50. Curvas J-V de células solares com camadas ativas preparadas a partir de solução de P3HT:PCBM em 2-metilciclohexanona (substrato à temperatura ambiente). Fonte: Elaborada pelo autor.

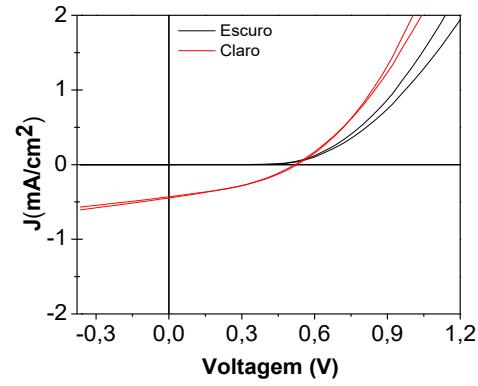


Figura 52. Curvas J-V de células solares com camadas ativas preparadas a partir de solução de P3HT:PCBM em 2-metilciclohexanona (substrato a 120°C). Fonte: Elaborada pelo autor.

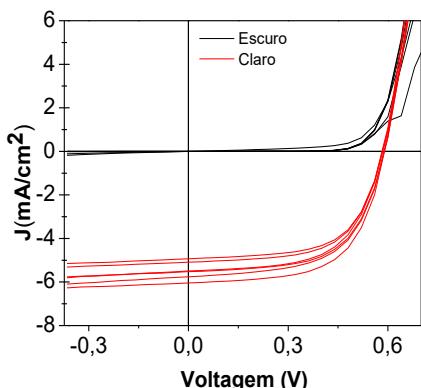


Figura 51. Curvas J-V de células solares com camadas ativas preparadas a partir de solução de P3HT:PCBM em ciclopentilmetyléter (substrato a 120°C). Fonte. Elaborada pelo autor.

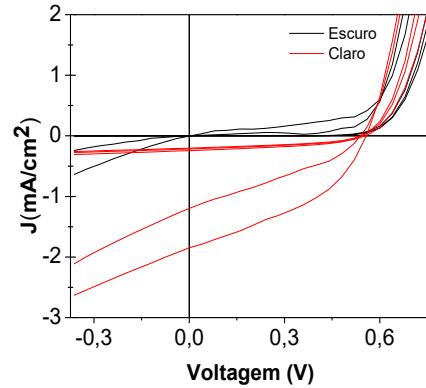


Figura 53. Curvas J-V de células solares com camadas ativas preparadas a partir de solução de P3HT:PCBM em 2-secbutilciclohexanona (substrato à temperatura ambiente). Fonte: Elaborada pelo autor.

A partir dessas curvas J-V correspondentes aos dispositivos de P3HT:PCBM em diferentes solventes, foram calculados os parâmetros de  $J_{sc}$ ,  $V_{oc}$ , FF e PCE relativos a cada tipo de dispositivo. A Tabela 4 mostra os parâmetros médios obtidos para cada tipo de célula solar de heterojunção preparada e os valores médios de espessura da camada ativa desses dispositivos. Observa-se que em alguns casos, há grandes variações das curvas, indicando que a qualidade da camada ativa e dos contatos metálicos precisa ser melhorada para que sejam obtidos resultados mais reproduutíveis.

Tabela 4. Variação dos valores de corrente de curto circuito ( $J_{sc}$ ) e potencial de circuito aberto ( $V_{oc}$ ), fator de preenchimento (FF) e eficiência (PCE) máximos e valor médio de espessura de cada tipo de dispositivo de heterojunção preparado a partir de diferentes solventes.

Solvente	$J_{sc}$ (mA/cm <sup>2</sup> )	$V_{oc}$ (V)	FF máximo (%)	PCE máximo (%)	Espessura (nm)
<b>1,2-Diclorobenzeno</b>	8,63	0,6	66	3,4	222±5
<b>Ciclohexanona</b>	Variando de 7,18 a 8,30	Variando de 0,58 a 0,59	50,8	2,19	287±8
<b>2-Metiltetrahidrofurano (substrato à T.A.)</b>	Variando de 2,62 a 3,02	Variando de 0,59 a 0,61	38	0,54	279±40
<b>2-Metiltetrahidrofurano (substrato a 120°C)</b>	Variando de 2,65 a 4,02	Variando de 0,61 a 0,62	42	0,67	252±29
<b>2-Metilciclohexanona (substrato à T.A.)</b>	0,71	0,53	44	0,15	238±16
<b>2-Metilciclohexanona (substrato a 120°C)</b>	0,44	0,52	38	0,076	219±10
<b>2-Sec-butilciclohexanona (substrato à T.A.)</b>	1,85	0,56	39	0,36	150±10
<b>Ciclopentilmetiléter (substrato a 120°C)</b>	Variando de 4,93 a 6,05	Variando de 0,58 a 0,59	61	1,91	268±9

Observa-se que os resultados são bastante diferentes dos obtidos com os dispositivos de camada simples, uma vez que envolvem não só o comportamento do P3HT nos diferentes solventes, mas sim o da mistura deste com o derivado de fulereno. Verificou-se que a eficiência do dispositivo preparado a partir ciclohexanona corresponde a aproximadamente 64,4% do valor total da eficiência correspondente ao dispositivo de 1,2-diclorobenzeno. Para o ciclopentilmetiléter, por sua vez, quando a deposição foi feita com o substrato ainda quente, obteve-se uma eficiência de 1,91%, o que corresponde a 56,2% da eficiência obtida com 1,2-diclorobenzeno, denotando que o uso desse solvente alternativo também deve ser estudado mais a fundo como potencial alternativa ao solvente halogenado.

Para os dispositivos preparados a partir de 2-metilciclohexanona e 2-secbutilciclohexanona, por outro lado, diferentemente do que foi observado com os dispositivos de camada simples (composta unicamente por P3HT dissolvido no solvente testado), foram obtidas eficiências consideravelmente baixas. Para dispositivos preparados a partir de 2-metilciclohexanona, vale salientar que houve uma diminuição da eficiência quando o substrato é mantido a temperaturas elevadas no momento da deposição. Já os valores de eficiência obtidos para os dispositivos preparados a partir de 2-metiltetrahidrofurano mostraram que o uso desse solvente, dentre todos testados, é o menos promissor para a confecção de OPVs, conforme já havia sido previsto na preparação de dispositivos de camada simples.

Em relação à espessura dos filmes obtidos a partir de cada um dos solventes, observou-se que as camadas ativas preparadas a partir de P3HT:PCBM em 2-metiltetrahidrofurano, 2-metilciclohexanona e ciclopentilmetiléter apresentaram espessura dentro da faixa ideal para uma boa performance dos dispositivos (entre 220 e 280nm), enquanto a camada ativa composta por 2-sec-butilciclohexanona ainda pode ter sua espessura otimizada de modo a se alcançar uma melhor eficiência (SHEN et al., 2015).

### **5.5. Preparação de protótipo de célula solar**

Sendo o dispositivo preparado a partir de ciclohexanona aquele que apresentou maior eficiência dentre aqueles preparados a partir de solventes alternativos, utilizou-se o solvente em questão para a preparação de um protótipo de células solares dispostas em

série. Nesse sentido, tentou-se realizar a deposição da camada ativa inicialmente com o substrato a temperatura ambiente. Todavia, devido às dimensões do substrato, não se verificou a formação de um filme, uma vez que a solução não espalhou e não houve a devida secagem da camada formada, conforme mostra a Figura 54.

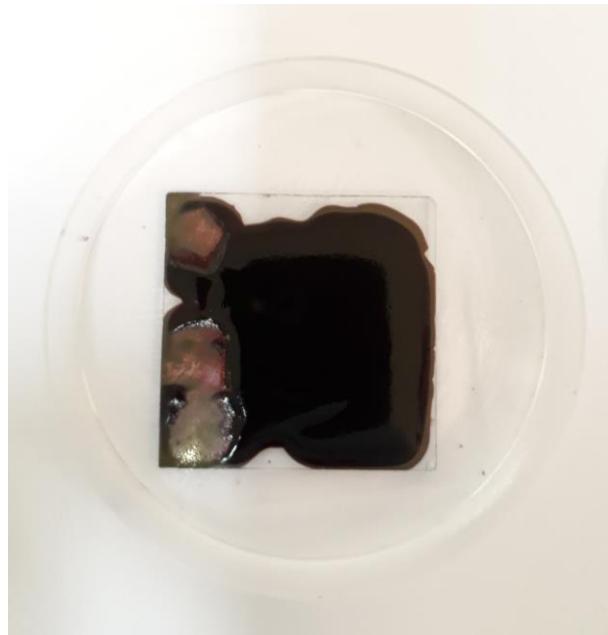


Figura 54. Resultado da tentativa de deposição da camada ativa do protótipo de células solares com substrato a temperatura ambiente. Fonte. Elaborada pelo autor.

Sendo assim, tentou-se depositar a solução de P3HT:PCBM em ciclohexanona sob temperaturas maiores ( $130^{\circ}\text{C}$ ). No entanto, verificou-se a formação de uma região no centro do substrato em que o filme apresentou aspecto fraco e desuniforme, o que provavelmente conduziria a formação de curto-círcuito no dispositivo resultante. Imaginou-se que o problema resultou da pequena dimensão do suporte fixador de amostra do spinner utilizado, que formaria uma região de espalhamento preferencial da solução. Além disso, verificou-se que também não houve um espalhamento adequado da solução sob essas condições. A Figura 55 mostra o resultado dessa deposição.

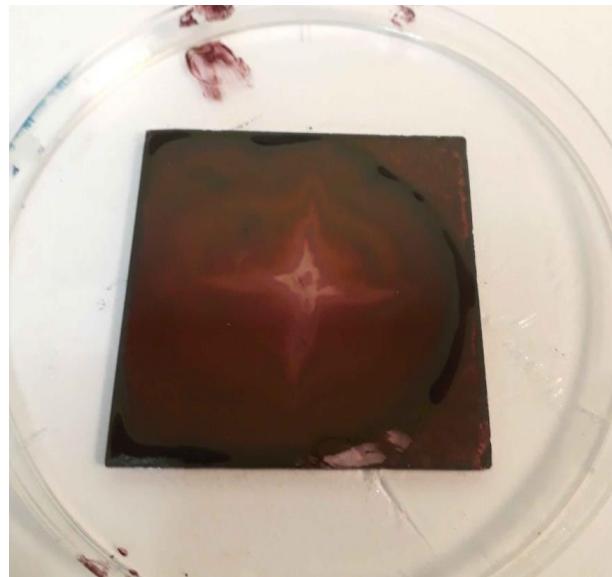


Figura 55. Resultado da tentativa de deposição da camada ativa do protótipo de células solares com solução a 130°C e substrato a temperatura ambiente. Fonte. Elaborada pelo autor.

Desse modo, procedeu-se à deposição da solução aquecida a 130°C com substrato aquecido a 120°C e um suporte fixador maio. Assim, obteve-se sucesso na deposição da camada ativa, pois verificou-se a formação de filme sobre o substrato. Desse modo, após a metalização, mediu-se a condução de corrente através dos contatos do protótipo sob iluminação de lanterna e foi verificada a existência de corrente, embora com valor baixo. O protótipo foi então submetido a medidas JxV sob simulador solar, seguindo praticamente a mesma metodologia de medição utilizada para os dispositivos menores, exceto a condição de atmosfera a vácuo. A Figura 56 mostra o momento da medição sob iluminação do simulador solar.

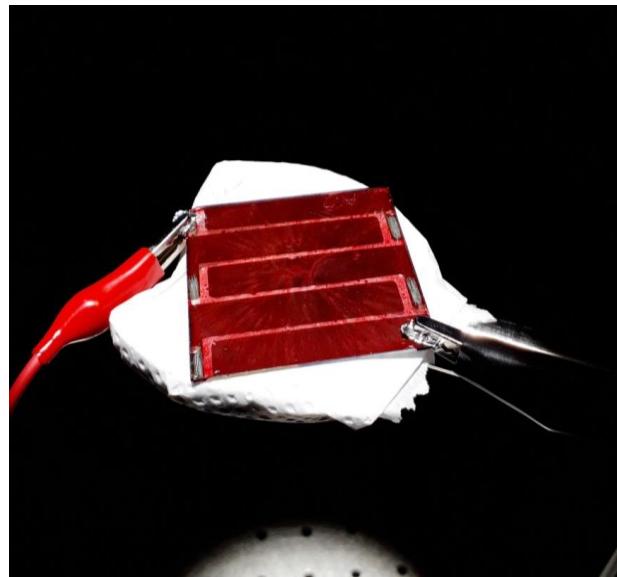


Figura 56. Protótipo de células solares sob iluminação do simulador solar. Fonte. Elaborada pelo autor.

A Figura 57 mostra as curvas corrente x tensão características (curvas J-V) obtidas para o protótipo de células solares em série preparado a partir de solução de P3HT:PCBM e ciclohexanona com concentração  $20 \text{ mg.mL}^{-1}$ , proporção 1:1.

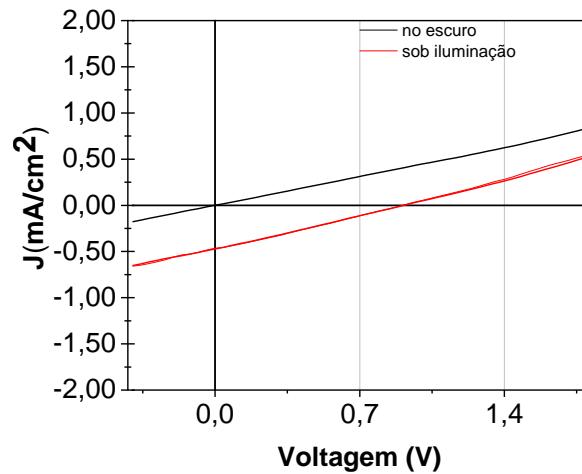


Figura 57. Curvas J-V do protótipo de células solares com camadas ativas preparadas a partir de solução de P3HT:PCBM em ciclohexanona  $20\text{mg.mL}^{-1}$  (substrato a  $120^\circ\text{C}$ ). Fonte. Elaborada pelo autor.

A partir deste gráfico, foi constada a geração de fotocorrente no protótipo preparado (embora baixa – cerca de  $0,5 \text{ mA/cm}^2$  ou  $1,68 \text{ mA}$  pelo dispositivo todo), já que houve deslocamento da curva do escuro para os quadrantes inferiores. No entanto, as curvas apresentaram um fator de preenchimento (FF) muito baixo (36,97) e um potencial de circuito aberto ( $V_{oc}$ ) da ordem de  $0,91\text{V}$ , valor este distante do esperado (cerca de  $3\text{V}$ , tendo-se em vista que o protótipo possui o equivalente a cinco dispositivos em série e cada dispositivo unitário gerou cerca de  $0,6\text{V}$ ). É possível que tais resultados se devam a problemas envolvendo o aumento da escala do dispositivo, gerando variações relativas à temperatura do substrato, à temperatura da solução e à própria rotação do substrato no momento da deposição, que acabam por comprometer a qualidade do filme formado, podendo gerar defeitos nas bordas do filme onde são feitos os contatos elétricos e, consequentemente, problemas de mau contato ou mesmo de curto-circuito. Assim, verifica-se a necessidade de novas otimizações das condições de deposição da camada ativa em substratos maiores para que os protótipos tenham a eficiência comparável a dos dispositivos menores preparados neste trabalho.

## 6. CONCLUSÕES

As análises de cromismo realizadas neste projeto para as soluções de P3HT em cada um dos solventes estudados revelaram mudanças na absorção da luz visível pelo P3HT tanto em função do solvente utilizado como da temperatura da solução. O P3HT apresentou solvatocromismo em alguns solventes, denotado pelos diferentes comprimentos de onda de máxima absorção: em xileno, 2-metilciclohexanona, 2-metiltetrahidrofurano e ciclometilpentiléter esse valor é aproximadamente 455 nm; em 2-secbutilciclohexanona, 470 nm; e em ciclohexanona, 498 nm. Observou-se que a solução do polímero em ciclohexanona apresenta o maior termocromismo (38 nm), evidenciando a grande mudança de conformação do polímero na solução com o aquecimento. Já as soluções do polímero em 2-secbutilciclohexanona, em 2-metiltetrahidrofurano e em ciclopentilmetiléter apresentam termocromismo

relativamente próximo (em torno de 22 nm) e, em seguida, a solução de P3HT em 2-metilciclohexanona, por outro lado, apresenta termocromismo relativamente mais baixo (17 nm).

Com base nas análises dos espectros na região do ultravioleta-visível das soluções nos seis solventes a 0,01mg/mL, observou-se que o polímero possivelmente adquire conformação mais agregada quando dissolvido em 2-metiltetrahidrofurano, ciclopentilmetiléter e 2-secbutilciclohexanona, denotado pelos ombros/picos secundários observados em maiores comprimentos de onda, sendo que no caso deste último, foi obtida uma curva espectrofotométrica larga, denotando uma boa aptidão do polímero para absorção de radiação nessa solução.

Em relação aos espectros obtidos dos filmes formados a partir de soluções mais concentradas, observou-se o caso inverso: uma possível conformação pouco agregada do polímero em 2-metilciclohexanona e 2-secbutilciclohexanona, formando filmes com morfologias mais uniformes, e uma possível formação de nanoagregados do polímero em 2-metiltetrahidrofurano e ciclopentilmetiléter, com formação e filmes de morfologia mais desuniformes (facilmente observada no caso do filme formado a partir de ciclopentilmetiléter).

Os dispositivos de camada simples preparados neste trabalho mostraram os valores de eficiência de conversão de potência (PCE) obtidos para cada tipo de dispositivo sugerem que os solventes 2-metilciclohexanona e 2-sec-butilciclohexanona despontam como potenciais alternativas aos solventes comumente usados para confecção da camada ativa de OPVs de camada simples.

A confecção de células solares utilizando alguns dos solventes alternativos estudados neste trabalho mostra-se mais trabalhosa do que no caso da maioria dos solventes convencionais, tendo-se em vista a necessidade de manutenção de condições específicas de temperatura das soluções para uma dissolução propícia do polímero e deposição ideal do filme. Todavia, apesar dessa observação, é de suma importância que essa atividade se enquadre na tendência atual da busca de redução das pressões sobre o meio ambiente como um todo, reduzindo, para isso, seus impactos ambientais e ocupacionais, visando a uma futura produção em larga escala.

Já para os dispositivos mistos de P3HT:PCBM (heterojunção) os melhores solventes foram a ciclohexanona e ciclometilpentilete , sendo que os dispositivos de heterojunção preparados com ciclohexanona como solvente apresentaram eficiência comparável àquelas observadas com o uso de 1,2-diclorobenzeno. Os dispositivos preparados a partir de ciclopentilmetyléter, por sua vez, apresentaram eficiência um pouco superior à metade da eficiência obtida com o uso do solvente convencional. Sendo assim, o uso desses solventes na preparação de células solares de P3HT:PCBM mostra-se promissor como alternativa aos solventes tradicionais.

Para pesquisas futuras, sugere-se um estudo detalhado da formação de filmes da mistura P3HT:PCBM nos solventes utilizados, de modo a identificar as melhores condições de formação desses filmes e das melhores condições de preparação de OPVs utilizando esses solventes, principalmente aqueles preparados a partir de ciclopentilmetyléter que, neste estudo, despontou como possível alternativa além da ciclohexanona aos solventes comumente utilizados para tal finalidade. Para a confecção de novos protótipos de células solares, por sua vez, de modo a se obter um aumento de eficiência, sugere-se o aumento da região dos contatos elétricos e a eliminação da presença de ITO e/ou metal das bordas do substrato a fim de evitar curto-circuito através de defeitos existentes na borda da camada ativa.

## 7. BIBLIOGRAFIA

- ANASTAS, P.; EGHBALI, N. Green Chemistry: Principles and Practice. **Chem. Soc. Rev.**, v. 39, n. 1, p. 301–312, 2010.
- BARAN, D. et al. Reducing the efficiency–stability–cost gap of organic photovoltaics with highly efficient and stable small molecule acceptor ternary solar cells. **Nature Materials**, v. 16, p. 363, 21 nov. 2016.
- BARANA, D. et al. Lignin Based Functional Additives for Natural Rubber. **ACS Sustainable Chemistry & Engineering**, v. 6, n. 9, p. 11843–11852, 4 set. 2018.
- BHATIA, S. C. Solar photovoltaic systems. In: BHATIA, S. C. (Ed.). **Advanced Renewable Energy Systems**. [s.l.] Woodhead Publishing India, 2014. p. 144–157.

BRASIL. Agência Nacional de Energia Elétrica (ANEEL). **Atlas da Energia Elétrica do Brasil.** Brasília – DF, 2005. 2<sup>a</sup> Edição. Disponível em: <<http://www.aneel.gov.br/aplicacoes/Atlas/download.htm>>. Acesso em 1 set. 2019.

BRASIL. Ministério de Minas e Energia. ANASTAS, P.; EGHBALI, N. Green Chemistry: Principles and Practice. **Chem. Soc. Rev.**, v. 39, n. 1, p. 301–312, 2010.

**Balanço Energético Nacional 2019: Relatório Síntese - Ano Base 2018.** , [s.d.]. Disponível em: <<http://www.epe.gov.br/sites-pt/publicacoes-dados-abertos/publicacoes/PublicacoesArquivos/publicacao-377/topicos-470/Relat%C3%B3rio%20S%C3%ADntese%20BEN%202019%20Ano%20Base%202018.pdf>>. Acesso em: 1 set. 2019

BARAN, D. et al. Reducing the efficiency–stability–cost gap of organic photovoltaics with highly efficient and stable small molecule acceptor ternary solar cells. **Nature Materials**, v. 16, p. 363, 21 nov. 2016.

BARANA, D. et al. Lignin Based Functional Additives for Natural Rubber. **ACS Sustainable Chemistry & Engineering**, v. 6, n. 9, p. 11843–11852, 4 set. 2018.

BENAZZOUZ, A. et al. Hansen approach versus COSMO-RS for predicting the solubility of an organic UV filter in cosmetic solvents. **Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects**, Formula VII: How Does Your Formulation Work? v. 458, p. 101–109, 20 set. 2014.

BHATIA, S. C. Solar photovoltaic systems. In: BHATIA, S. C. (Ed.). . **Advanced Renewable Energy Systems**. [s.l.] Woodhead Publishing India, 2014. p. 144–157.

CALIJURI, M. DO C.; FERNANDES, D. G. **Engenharia Ambiental: Conceitos, Tecnologia e Gestão**. 1. ed. Rio de Janeiro: Elsevier, 2013.

CASTELLAN, C. S. et al. Solubility study of phytochemical cross-linking agents on dentin stiffness. **Journal of Dentistry**, v. 38, n. 5, p. 431–436, 1 maio 2010.

CHEN, F.-C. Emerging Organic and Organic/Inorganic Hybrid Photovoltaic Devices for Specialty Applications: Low-Level-Lighting Energy Conversion and Biomedical Treatment. **Advanced Optical Materials**, v. 7, n. 1, p. 1800662, jan. 2019.

- CHEN, X. et al. Green-Solvent-Processed Molecular Solar Cells. **Angewandte Chemie International Edition**, v. 53, n. 52, p. 14378–14381, 22 dez. 2014.
- CHUEH, C.-C. et al. Non-halogenated solvents for environmentally friendly processing of high-performance bulk-heterojunction polymer solar cells. **Energy & Environmental Science**, v. 6, p. 3241–3248, 2013.
- COTFAS, D. T.; DEACONU, A. M.; COTFAS, P. A. Application of successive discretization algorithm for determining photovoltaic cells parameters. **Energy Conversion and Management**, v. 196, p. 545–556, set. 2019.
- DANG, M. T.; HIRSCH, L.; WANTZ, G. P3HT:PCBM, best seller in polymer photovoltaic research. **Advanced Materials**, v. 23, n. 31, p. 3597–3602, 2011.
- FARDI, T. et al. Artwork conservation materials and Hansen solubility parameters: A novel methodology towards critical solvent selection. **Journal of Cultural Heritage**, v. 15, n. 6, p. 583–594, 1 nov. 2014.
- FLEETHAM, T. et al. Photocurrent enhancements of organic solar cells by altering dewetting of plasmonic Ag nanoparticles. **Scientific Reports**, v. 5, p. 14250, 21 set. 2015.
- FUJIWARA, N.; YAMAMOTO, H. Evaluation of adsorption of organic solvents to modified hydrophobic silica adsorbents based on Hansen solubility parameter. **Separation and Purification Technology**, v. 210, p. 907–912, 8 fev. 2019.
- GREGG, B. A. Excitonic Solar Cells. **The Journal of Physical Chemistry B**, v. 107, n. 20, p. 4688–4698, 22 maio 2003.
- HE, Z. et al. Enhanced Power-Conversion Efficiency in Polymer Solar Cells Using an Inverted Device Structure. **Nature Photonics**, v. 6, p. 593–597, 2012.
- HE, Z. et al. Single-junction polymer solar cells with high efficiency and photovoltage. **Nature Photonics**, v. 9, p. 174, 9 fev. 2015.
- HOU, J. et al. Organic solar cells based on non-fullerene acceptors. **Nature Materials**, v. 17, p. 119, 23 jan. 2018.

- HUMMELEN, J. C. et al. Preparation and Characterization of Fulleroid and Methanofullerene Derivatives. **The Journal of Organic Chemistry**, v. 60, n. 3, p. 532–538, 1 fev. 1995.
- JOLLANDS, N. et al. The 25 IEA energy efficiency policy recommendations to the G8 Gleneagles Plan of Action. **Energy Policy**, v. 38, n. 11, p. 6409–6418, nov. 2010.
- KHAYET, M.; FERNÁNDEZ, V. Estimation of the solubility parameters of model plant surfaces and agrochemicals: a valuable tool for understanding plant surface interactions. **Theoretical Biology and Medical Modelling**, v. 9, n. 1, p. 45, 14 nov. 2012.
- KUS, M. et al. Synthesis of Nanoparticles. In: HUSSAIN, C. M. (Ed.). . **Handbook of Nanomaterials for Industrial Applications**. Micro and Nano Technologies. [s.l.] Elsevier, 2018. p. 392–429.
- LIANG, Y. et al. For the Bright Future-Bulk Heterojunction Polymer Solar Cells with Power Conversion Efficiency of 7.4%. **Advanced materials (Deerfield Beach, Fla.)**, v. 22, p. E135-8, 25 maio 2010.
- LIN, C.; PAN, W.-C.; TSAI, F.-Y. Optimization of the active-layer morphology with a non-halogenic solvent for bulk-heterojunction polymer solar cells. **Synthetic Metals**, v. 160, n. 23, p. 2643–2647, 1 dez. 2010.
- LIU, C. et al. Terpinolene processed PTB7:PC71BM blend film for polymer solar cells: a non-aromatic and non-chlorinated solvent predicted by Hansen solubility parameters. **Synthetic Metals**, v. 242, p. 17–22, ago. 2018.
- LOPES, I. S. **Produção de eletricidade e emissão de CO<sub>2</sub>: Um contributo para a literatura empírica**. Porto: Faculdade de Economia, Universidade do Porto, 2018.
- LU, L.; YU, L. Understanding Low Bandgap Polymer PTB7 and Optimizing Polymer Solar Cells Based on It. **Advanced Materials**, v. 26, n. 26, p. 4413–4430, 2014.
- MAZZIO, K. A.; LUSCOMBE, C. K. The future of organic photovoltaics. **Chemical Society Reviews**, v. 44, n. 1, p. 78–90, 8 dez. 2014.
- MOLITON, A.; NUNZI, J.-M. How to model the behaviour of organic photovoltaic cells. **Polymer International**, v. 55, n. 6, p. 583–600, jun. 2006.

MUNSHI, J. et al. Composition and processing dependent miscibility of P3HT and PCBM in organic solar cells by coarse-grained molecular simulations. **Computational Materials Science**, v. 155, p. 112–115, 2018.

PARK, C. D. et al. High performance bulk-heterojunction organic solar cells fabricated with non-halogenated solvent processing. **Organic Electronics: physics, materials, applications**, v. 12, n. 9, p. 1465–1470, set. 2011.

PATHAKOTI, K.; MANUBOLU, M.; HWANG, H.-M. Nanotechnology Applications for Environmental Industry. In: HUSSAIN, C. M. (Ed.). . **Handbook of Nanomaterials for Industrial Applications**. Micro and Nano Technologies. [s.l.] Elsevier, 2018. p. 894–907.

PETRICHENKO, K.; ÜRGE-VORSATZ, D.; CABEZA, L. F. Modeling global and regional potentials for building-integrated solar energy generation. **Energy and Buildings**, v. 198, p. 329–339, set. 2019.

PIAN, M. D. et al. Assembly of poly-3-(hexylthiophene) nanocrystals in marginal solvent: The role of PCBM. **European Polymer Journal**, v. 109, p. 222–228, 2018.

PRZYBYŁEK, M.; JELIŃSKI, T.; CYSEWSKI, P. **Application of Multivariate Adaptive Regression Splines (MARSplines) for Predicting Hansen Solubility Parameters Based on 1D and 2D Molecular Descriptors Computed from SMILES String.** Research article. Disponível em: <<https://www.hindawi.com/journals/jchem/2019/9858371/abs/>>. Acesso em: 15 set. 2019.

RAY, B. et al. Collection-limited theory interprets the extraordinary response of single semiconductor organic solar cells. **Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America**, v. 112, n. 36, p. 11193–11198, 8 set. 2015.

SAMITSU, S. et al. Effective Production of Poly(3-alkylthiophene) Nanofibers by means of Whisker Method using Anisole Solvent: Structural, Optical, and Electrical Properties. **Macromolecules**, v. 41, n. 21, p. 8000–8010, 11 nov. 2008.

SÁNCHEZ-CAMARGO, A. DEL P. et al. Hansen solubility parameters for selection of green extraction solvents. **TrAC Trends in Analytical Chemistry**, v. 118, p. 227–237, 1 set. 2019.

- SHAHEEN, S. E. et al. 2.5% efficient organic plastic solar cells. **Applied Physics Letters**, v. 78, n. 6, p. 841–843, 2001.
- SHEN, W. et al. Effective regulation of the micro-structure of thick P3HT:PC71BM film by the incorporation of ethyl benzenecarboxylate in toluene solution. **RSC Advances**, v. 5, n. 59, p. 47451–47457, 26 maio 2015.
- SHIN, H.-J. et al. Development and evaluation of topical formulations for a novel skin whitening agent (AP736) using Hansen solubility parameters and PEG-PCL polymers. **International Journal of Pharmaceutics**, v. 552, n. 1, p. 251–257, 1 dez. 2018.
- SILVA, R. M. DA. **Energia Solar no Brasil: dos incentivos aos desafios**, 2015.
- SØNDERGAARD, R. et al. Roll-to-roll fabrication of polymer solar cells. **Materials Today**, v. 15, n. 1, p. 36–49, 1 jan. 2012.
- STEFANELLO, C.; MARANGONI, F.; ZEFERINO, C. L. A importância das políticas públicas para o fomento da energia solar fotovoltaica no brasil. 2018.
- STEVOVIĆ, I.; MIRJANIĆ, D.; STEVOVIĆ, S. Possibilities for wider investment in solar energy implementation. **Energy**, v. 180, p. 495–510, ago. 2019.
- TANG, C. W. Two-layer organic photovoltaic cell. **Applied Physics Letters**, v. 48, n. 2, p. 183–185, 1986.
- VICHI, F. M.; MANSOR, M. T. C. Energia, meio ambiente e economia: o Brasil no contexto mundial. **Química Nova**, v. 32, n. 3, p. 757–767, 2009.
- WAHAB, A. et al. Solar energy systems – Potential of nanofluids. **Journal of Molecular Liquids**, v. 289, p. 111049, 2019.
- WALI, Q. et al. Tandem perovskite solar cells. **Renewable and Sustainable Energy Reviews**, v. 84, p. 89–110, 1 mar. 2018.
- XU, Y. et al. Thiophene: An eco-friendly solvent for organic solar cells. **Dyes and Pigments**, v. 168, p. 36–41, set. 2019.
- YAN, N. et al. Recent progress of thin-film photovoltaics for indoor application. **Chinese Chemical Letters**, p. S1001841719304954, ago. 2019.

- YANG, Z. et al. Facile preparation of nanoporous C60/P3HT thin films from PLA-b-C60-b-P3HT triblock copolymers. **Applied Surface Science**, v. 458, p. 70–76, 2018.
- YU, G. et al. Polymer Photovoltaic Cells: Enhanced Efficiencies via a Network of Internal Donor-Acceptor Heterojunctions. **Science**, v. 270, n. 5243, p. 1789–1791, 15 dez. 1995.
- ZHAN, Y.; MEI, Y.; ZHENG, L. Materials capability and device performance in flexible electronics for the Internet of Things. **Journal of Materials Chemistry C**, v. 2, n. 7, p. 1220–1232, 2014.
- ZHANG, S. et al. Green-solvent-processable organic solar cells. **Materials Today**, v. 19, n. 9, p. 533–543, 2016.

**SIGMA-ALDRICH**[sigma-aldrich.com](http://sigma-aldrich.com)**FICHA DE INFORMAÇÕES DE SEGURANÇA DE PRODUTOS  
QUÍMICOS**

Versão 5.5

Data de revisão 10.03.2015

Data de impressão 16.04.2015

---

**1. IDENTIFICAÇÃO DO PRODUTO E DA EMPRESA****1.1 Identificadores do produto**

Nome do produto : CICLOHEXANONA P.A

Referência do Produto : V001241

Marca : Vetec

**1.2 Outros meios de identificação**

Dados não disponíveis

**1.3 Utilizações identificadas relevantes da substância ou mistura e utilizações desaconselhadas** Só para utilização R&D. Não para utilização farmacêutica, doméstica ou outras utilizações.**1.4 Identificação do fornecedor da ficha de dados de segurança**Companhia : Sigma-Aldrich Brasil Ltda.  
Av. das Nações Unidas, 23.043  
04795-100 SÃO PAULO - SP  
BRAZIL

---

**2. IDENTIFICAÇÃO DE PERIGOS****2.1 Classificação GHS**

Líquidos inflamáveis (Categoria 3)  
Toxicidade aguda, Oral (Categoria 4)  
Toxicidade aguda, Inalação (Categoria 4)  
Toxicidade aguda, Dérmico (Categoria 4)  
Irritação cutânea (Categoria 2)  
Lesões oculares graves (Categoria 1)

## 2.2 Elementos da Etiqueta GHS, incluindo declarações de prevenção Pictograma

Palavra de advertência	Perigo
Frases de Perigo	
H226	Líquido e vapor inflamáveis.
H302 + H312 + H332	Nocivo por ingestão, contacto com a pele ou inalação
H315	Provoca irritação cutânea.
H318	Provoca lesões oculares graves.
Frases de Precaução	
Prevenção	
P210	Manter afastado do calor/faísca/chama aberta/ superfícies quentes. -
	Não fumar.
P233	Manter o recipiente bem fechado.
P261	Evitar respirar as poeiras/ fumos/ gases/ névoas/ vapores/ aerossóis.
P280	Usar luvas de protecção/ protecção ocular/ protecção facial.
Resposta	
P303 + P361 + P353	SE ENTRAR EM CONTACTO COM A PELE (ou o cabelo): retirar imediatamente toda a roupa contaminada. Enxaguar a pele com água/tomar um duche.
P305 + P351 + P338 + P310	SE ENTRAR EM CONTACTO COM OS OLHOS: enxaguar cuidadosamente com água durante vários minutos. Se usar lentes de contacto, retire-as, se tal lhe for possível. Continuar a enxaguar. Contacte imediatamente um CENTRO DE INFORMAÇÃO ANTIVENENOS ou um médico.
P362 + P364	Retirar a roupa contaminada e lavá-la antes de a voltar a usar.
P370 + P378	Em caso de incêndio: para extinguir utilizar areia seca, um produto químico seco ou espuma resistente ao álcool.
Armazenagem	
P403 + P235	Armazenar em local bem ventilado. Conservar em ambiente fresco.
Destruição	
P501	Eliminar o conteúdo/ recipiente em instalação aprovada de destruição de resíduos.

## 2.3 Outros Perigos - nenhum(a)

---

### **3. COMPOSIÇÃO E INFORMAÇÕES SOBRE OS INGREDIENTES**

#### **3.1 Substâncias**

Formula : C<sub>6</sub>H<sub>10</sub>O  
Peso molecular : 98.15 g/mol

Componente	Concentração
<b>Cyclohexanone</b>	
No. CAS	108-94-1
No. CE	203-631-1
No. de Index	606-010-00-7
	<= 100 %

---

### **4. MEDIDAS DE PRIMEIROS-SOCORROS**

#### **4.1 Descrição das medidas de primeiros socorros**

##### **Recomendação geral**

Consultar um médico. Mostrar esta ficha de segurança ao médico de serviço.

##### **Em caso de inalação**

Se for respirado, levar a pessoa para o ar fresco. Se não respirar, dar respiração artificial. Consultar um médico.

##### **Em caso de contacto com a pele**

Lavar com sabão e muita água. Consultar um médico.

##### **Se entrar em contacto com os olhos**

Lavar cuidadosamente com muita água, durante pelo menos quinze minutos, e consultar o médico.

##### **Em caso de ingestão**

NÃO provoca vômito. Nunca dar nada pela boca a uma pessoa inconsciente. Enxaguar a boca com água. Consultar um médico.

#### **4.2 Sintomas e efeitos mais importantes, tanto agudos como retardados**

A exposição da pele prolongada ou repetida provoca desengorduramento e dermatite., Tosse, Respiração superficial, Dor de cabeça, Náusea, Vómitos, Falta de coordenação., A inalação de concentrações elevadas pode provocar:, Depressão do sistema nervoso central, Até onde sabemos, as propriedades químicas, físicas e toxicológicas não foram minuciosamente investigadas.

#### **4.3 Indicações sobre cuidados médicos urgentes e tratamentos especiais necessários**

Dados não disponíveis

---

### **5. MEDIDAS DE COMBATE A INCÊNDIO**

#### **5.1 Meios de extinção**

##### **Meios adequados de extinção**

Utilizar água pulverizada, espuma resistente ao álcool, produto químico seco ou dióxido de carbono.

#### **5.2 Perigos especiais decorrentes da substância ou mistura Óxidos**

de carbono

**5.3 Recomendações para o pessoal de combate a incêndios**

Usar equipamento de respiração autónomo para combate a incêndios, se necessário.

**5.4 Outras informações**

Os jatos de água podem ser utilizados para arrefecer os contentores fechados.

**6. MEDIDAS DE CONTROLE PARA DERRAMAMENTO OU VAZAMENTO**

**6.1 Precauções individuais, equipamento de proteção e procedimentos de emergência**

Usar equipamento de proteção individual. Evitar a respiração do vapor/névoa/gas. Assegurar ventilação adequada. Cortar todas as fontes de ignição. Evacuar o pessoal para áreas de segurança. Atenção com a acumulação de vapores que pode formar concentrações explosivas. Os vapores podem-se acumular nas áreas baixas.

**6.2 Precauções a nível ambiental**

Prevenir dispersão ou derramamento, se seguro. Não permitir a entrada do produto no sistema de esgotos.

**6.3 Métodos e materiais de confinamento e limpeza**

Controlar e recuperar o líquido derramado com aspirador protegido electricamente ou varrer a seco e por o líquido dentro de contentores para a eliminação de acordo com as regulações locais (ver secção 13).

**6.4 Remissão para outras secções**

Para eliminação de resíduos ver secção 13.

**7. MANUSEIO E ARMAZENAMENTO**

**7.1 Precauções para um manuseamento seguro**

Evitar o contacto com a pele e os olhos. Evitar a inalação do vapor ou da névoa.

Manter afastado de qualquer chama ou fonte de ignição - Não fumar. Tome medidas para impedir a formação de electricidade estática.

**7.2 Condições de armazenagem segura, incluindo eventuais incompatibilidades**

Armazenar em local fresco. Guardar o recipiente herméticamente fechado em lugar seco e bem ventilado. Os contentores abertos devem ser cuidadosamente fechados de novo e têm que ficar direitos para evitar a dispersão.

**7.3 Utilizações finais específicas**

Dados não disponíveis

**8. CONTROLE DE EXPOSIÇÃO E PROTEÇÃO INDIVIDUAL**

**8.1 Parâmetros de controlo**

**Límites de exposição ocupacional**

**8.2 Controlo da exposição**

**Controlos técnicos adequados**

Manusear de acordo com as boas práticas industriais de higiene e segurança. Lavar as mãos antes dos intervalos e no final do dia de trabalho.

**Proteção individual**

**Protecção ocular/ facial**

Óculos de segurança bem ajustados. Proteção da face (mínimo de 8 polegadas (20 cm)). Use equipamento de proteção ocular testado e aprovado de acordo com as normas governamentais adequadas, tais como NIOSH (US) ou EN 166 (EU).

### **Protecção da pele**

Manusear com luvas. As luvas devem ser inspeccionadas antes da utilização. Use uma técnica adequada para a remoção das luvas (sem tocar a superfície exterior da luva) para evitar o contacto da pele com o produto. Descarte as luvas contaminadas após o uso, em conformidade com as leis e boas práticas de laboratório . Lavar e secar as mãos.

As luvas de protecção seleccionadas devem satisfazer as especificações da Directiva da UE 89/689/CEE e a norma EN 374 derivada dela.

### **Protecção do corpo**

Fato completo de protecção para produtos químicos, Tecido protector anti-estático retardador de chama., O tipo de equipamento de protecção deve ser escolhido de acordo com a concentração e a quantidade da substância perigosa no local de trabalho.

### **Protecção respiratória**

Nos casos em que a avaliação de risco mostrar que os respiradores purificadores do ar são apropriados, use um respirador de cobertura facial total com cartuchos de combinação multiobjectivos (E.U.A.) ou do tipo ABEK (EN 14387) como apoio a controlos de engenharia. Se o respirador for o único meio de protecção, usa um respirador de ar de cobertura facial total. Use respiradores e componentes testados e aprovados por normas governamentais apropriadas, tais como as NIOSH (E.U.A.) ou CEN (UE).

## **9. PROPRIEDADES FÍSICAS E QUÍMICAS**

### **9.1 Informações sobre propriedades físicas e químicas de base**

- a) Aspetto      Forma: claro, líquido  
Cor: incolor
- b) Odor      Dados não disponíveis
- c) Limite de Odor      Dados não disponíveis
- d) pH      Dados não disponíveis
- e) Ponto de fusão/ponto      Ponto/intervalo de fusão: -30.99 °C de congelamento
- f) Ponto de ebuição inicial 154 - 156 °C a 1,013 hPa e intervalo de ebuição
- g) Ponto de fulgor      44 °C - câmara fechada
- h) Taxa de evaporação      Dados não disponíveis
- i) Inflamabilidade (sólido,      Dados não disponíveis gás)
- j) Limites de Limite superior de explosão: 9.4 %(V) inflamabilidade superior Limite inferior de explosão: 1.1 %(V)  
/ inferior ou  
explosividade
- k) Pressão de vapor 4.5 hPa a 20 °C  
13.3 hPa a 38.7 °C
- l) Densidade de vapor      3.39 - (Ar = 1.0)
- m) Densidade relativa 0.947 g/cm<sup>3</sup>
- n) Hidrossolubilidade 86 g/l a 20 °C

- o) Coeficiente de partição n-octanol/água log Pow: 0.81
- p) Temperatura de auto-ignição 420 °C a 1,013 hPa
- q) Temperatura de decomposição Dados não disponíveis
- r) Viscosidade Dados não disponíveis

## **10. ESTABILIDADE E REATIVIDADE**

### **10.1 Reatividade**

Dados não disponíveis

### **10.2 Estabilidade química** Dados não disponíveis

### **10.3 Possibilidade de reações perigosas** Dados não disponíveis

### **10.4 Condições a evitar** Calor, chamas e faíscas.

### **10.5 Materiais incompatíveis** Oxidantes, Plásticos

### **10.6 Produtos de decomposição perigosos**

Outros produtos de decomposição perigosos - Dados não disponíveis

## **11. INFORMAÇÕES TOXICOLÓGICAS**

### **11.1 Informações sobre os efeitos toxicológicos**

#### **Toxicidade aguda**

DL50 Oral - Ratazana - 1,534 mg/kg

CL50 Inalação - Ratazana - 4 h - > 6.2 mg/l

DL50 Dérmico - Coelho - 794 - 3,160 mg/kg

#### **Corrosão/irritação cutânea**

Pele - Coelho - Irritante para a pele. - Directrizes do Teste OECD 404

#### **Lesões oculares graves/irritação ocular**

Olhos - Coelho - Risco de lesões oculares graves. - 24 h

#### **Sensibilização respiratória ou cutânea**

Dados não disponíveis

#### **Mutagenicidade em células germinativas**

Não mutagénico no teste Ames.

Genotoxicidade in vitro - Teste de Ames - *S. typhimurium* - com ou sem activação metabólica - negativo

Genotoxicidade in vitro - Humano - fibroblasto - com ou sem activação metabólica - Experimentos laboratoriais demonstraram efeitos mutagênicos.

#### **Carcinogenicidade**

Este produto é ou contém um componente que não é classificável quanto à sua carcinogenicidade segundo sua classificação pela IARC, ACGIH, NTP ou EPA.

IARC: 3 - Grupo 3: Não classificado quanto à sua carcinogenicidade para os humanos  
(Cyclohexanone)

### **Toxicidade à reprodução e lactação**

Tendo em base experimentos com animais de laboratório, a exposição excessiva pode provocar desordem(ns) reprodutiva(s).

### **Toxicidade sistêmica para órgãos-alvo específicos - exposição única**

Dados não disponíveis

Toxicidade aguda por via inalatória - Dificuldade em respirar

### **Toxicidade sistêmica para órgãos-alvo específicos - exposição repetida**

Dados não disponíveis

### **Perigo de aspiração**

Dados não disponíveis

### **Possíveis danos para a saúde**

**Inalação** Nocivo se for inalado. Causa uma irritação no aparelho respiratório.

**Ingestão** Nocivo por ingestão.

**Pele** Perigoso se for absorto pela pele. Causa uma irritação da pele. **Olhos** Causa queimaduras nos olhos.

### **Sinais e sintomas de exposição**

A exposição da pele prolongada ou repetida provoca desengorduramento e dermatite., Tosse, Respiração superficial, Dor de cabeça, Náusea, Vómitos, Falta de coordenação., A inalação de concentrações elevadas pode provocar:, Depressão do sistema nervoso central, Até onde sabemos, as propriedades químicas, físicas e toxicológicas não foram minuciosamente investigadas.

### **Informação adicional**

RTECS: GW1050000

## **12. INFORMAÇÕES ECOLÓGICAS**

### **12.1 Ecotoxicidade**

Toxicidade em dáfniias e CE50 - Daphnia magna - 820 mg/l - 24 h  
outros invertebrados aquáticos

### **12.2 Persistência e degradabilidade**

Biodegradabilidade Resultado: 90 - 100 % - Rapidamente biodegradável.

### **12.3**

#### **Potencial biocumulativo**

Dados não disponíveis

### **12.4 Mobilidade no solo**

Dados não disponíveis

### **12.5 Resultados da avaliação PBT e mPmB**

Dados não disponíveis

### **12.6 Outros efeitos adversos**

Dados não disponíveis

---

## **13. CONSIDERAÇÕES SOBRE TRATAMENTO E DISPOSIÇÃO**

---

### **13.1 Métodos de tratamento de resíduos**

#### **Produto**

Queimar em um incinerador químico equipado com pós-combustor e purificador de gases, mas tomar precauções adicionais ao colocar esse material em ignição, visto que é altamente inflamável. Propor a entrega de soluções excedentes e não recicláveis a uma empresa idónea de tratamento de resíduos.

#### **Embalagens contaminadas**

Eliminar como produto Não utilizado.

---

## **14. INFORMAÇÕES SOBRE TRANSPORTE**

---

### **14.1 Número ONU**

ADR/RID:	1915	DOT (US):	1915
----------	------	-----------	------

IMDG:	1915	IATA:	1915
-------	------	-------	------

ANTT:	1915		
-------	------	--	--

### **14.2 Designação oficial de transporte da ONU**

ADR/RID:	CICLOHEXANONA		
----------	---------------	--	--

DOT (US):	Cyclohexanone		
-----------	---------------	--	--

IMDG:	CYCLOHEXANONE		
-------	---------------	--	--

IATA:	Cyclohexanone		
-------	---------------	--	--

ANTT:	CICLO-HEXANONA		
-------	----------------	--	--

### **14.3 Classes de perigo para efeitos de transporte**

ADR/RID: 3	DOT (US): 3	IMDG: 3	IATA: 3	ANTT: 3
------------	-------------	---------	---------	---------

### **14.4 Grupo de embalagem**

ADR/RID: III	DOT (US): III	IMDG: III	IATA: III	ANTT: III
--------------	---------------	-----------	-----------	-----------

### **14.5 Perigos para o ambiente**

ADR/RID: não	DOT (US): não	IMDG Poluente marinho: não	IATA: não
--------------	---------------	----------------------------	-----------

### **14.6 Precauções especiais para o utilizador** Dados não disponíveis

### **14.7 Numero De Risco 30**

---

## **15. REGULAMENTAÇÕES**

---

### **15.1 Regulamentação/legislação específica para a substância ou mistura em matéria de saúde, segurança e ambiente**

Esta Ficha de Informações de Produtos Químicos foi preparada de acordo com a NBR 14725-4/2012 da ABNT (Associação Brasileira de Normas Técnicas)

---

## **16. OUTRAS INFORMAÇÕES**

---

#### **Outras informações**

Direitos exclusivos, 2015, da Sigma-Aldrich Co. LLC. Permissão concedida para fazer número ilimitado de cópias em papel, somente para uso interno.

Acredita-se que as informações acima estejam correctas, embora não pretendam ser totalmente abrangentes, devendo ser usadas apenas como um guia. A informação contida neste documento esta baseada no presente estado do nosso conhecimento e é aplicável ás precauções de segurança apropriadas para o produto. Não representa nenhuma garantia das propriedades do produto.

A Corporação Sigma-Aldrich e as suas companhias afiliadas, não responderão por nenhum dano resultante do manuseio ou do contato com o produto acima. Consultar [www.sigma-aldrich.com](http://www.sigma-aldrich.com) e/ou o verso da factura ou nota que acompanha o produto para tomar conhecimento dos termos adicionais e condições de venda.

---

# SIGMA-ALDRICH

[sigma-aldrich.com](http://sigma-aldrich.com)

## FICHA DE INFORMAÇÕES DE SEGURANÇA DE PRODUTOS QUÍMICOS

Versão 5.3

Data de revisão 13.11.2015

Data de impressão 09.08.2017

---

### 1. IDENTIFICAÇÃO DO PRODUTO E DA EMPRESA

#### 1.1 Identificadores do produto

Nome do produto : Xileno

Referência do Produto : 214736

Marca : Aldrich

#### 1.2 Outros meios de identificação

Xylene mixture of isomers

#### 1.3 Utilizações identificadas relevantes da substância ou mistura e

utilizações desaconselhadas Só para utilização R&D. Não para

utilização farmacêutica, doméstica ou outras utilizações.

#### 1.4 Identificação do fornecedor da ficha de dados de segurança

Companhia : Sigma-Aldrich Brasil Ltda.  
Av. das Nações Unidas, 23.043  
04795-100 SÃO PAULO - SP  
BRAZIL

Telefone : +55 11 3732 3100

Número de Fax : +55 11 5522 9895

Email endereço : [sigmabr@sial.com](mailto:sigmabr@sial.com)

#### 1.5 Número de telefone de emergência

0800-720-8000

---

## 2. IDENTIFICAÇÃO DE PERIGOS

### 2.1 Classificação GHS

Líquidos inflamáveis (Categoria 3)  
 Toxicidade aguda, Oral (Categoria 5)  
 Toxicidade aguda, Inalação (Categoria 4)  
 Irritação cutânea (Categoria 2)  
 Irritação ocular (Categoria 2A)  
 Toxicidade para órgãos-alvo específicos - exposição única (Categoria 3), Sistema respiratório  
 Toxicidade para órgãos-alvo específicos - exposição repetida, Inalação (Categoria 2), Sistema nervoso central, Fígado, Rim  
 Perigo de aspiração (Categoria 1)  
 Toxicidade aguda para o ambiente aquático (Categoria 2)

### 2.2 Elementos da Etiqueta GHS, incluindo declarações de prevenção Pictograma

Palavra de advertência	Perigo
Frases de Perigo	

H226	Líquido e vapor inflamáveis.
H303	Pode ser perigoso por ingestão.
H304	Pode ser mortal por ingestão e penetração nas vias respiratórias.
H315	Provoca irritação cutânea.
H319	Provoca irritação ocular grave.
H332	Nocivo por inalação.
H335	Pode provocar irritação das vias respiratórias.
H373	Pode afectar os órgãos (Sistema nervoso central, Fígado, Rim) após exposição prolongada ou repetida por inalação.
H401	Tóxico para os organismos aquáticos.

Frases de Precaução

Prevenção

P210 Manter afastado do calor/faísca/chama aberta/ superfícies quentes. Não fumar.

P260 Não respirar as poeiras/ fumos/ gases/ névoas/ vapores/ aerossóis.

Resposta

P301 + P310 EM CASO DE INGESTÃO: contacte imediatamente um CENTRO DE INFORMAÇÃO ANTIVENENOS ou um médico.

P331 NÃO provocar o vômito.

P370 + P378 Em caso de incêndio: para extinguir utilizar areia seca, um produto químico seco ou espuma resistente ao álcool.

Armazenagem

P403 + P233 Armazenar em local bem ventilado. Manter o recipiente bem fechado.

### 2.3 Outros Perigos - nenhum(a)

---

### 3. COMPOSIÇÃO E INFORMAÇÕES SOBRE OS INGREDIENTES

#### 3.1 Substâncias

Sinónimos	:	Xylene mixture of isomers
Formula	:	C8H10
Peso molecular	:	106.17 g/mol
No. CAS	:	1330-20-7

Componente	Concentração
No. CAS	1330-20-7
No. CE	215-535-7
No. de Index	601-022-00-9
	<= 100 %

---

### 4. MEDIDAS DE PRIMEIROS-SOCORROS

#### 4.1 Descrição das medidas de primeiros socorros

##### Recomendação geral

Consultar um médico. Mostrar esta ficha de segurança ao médico de serviço.

##### Em caso de inalação

Se for respirado, levar a pessoa para o ar fresco. Se não respirar, dar respiração artificial. Consultar um médico.

##### Em caso de contacto com a pele

Lavar com sabão e muita água. Consultar um médico.

##### Se entrar em contacto com os olhos

Lavar cuidadosamente com muita água, durante pelo menos quinze minutos, e consultar o médico.

##### Em caso de ingestão

NÃO provoca vômito. Nunca dar nada pela boca a uma pessoa inconsciente. Enxaguar a boca com água. Consultar um médico.

#### 4.2 Sintomas e efeitos mais importantes, tanto agudos como retardados

Visão desfocada, Falta de coordenação., Dor de cabeça, Náusea, Vómitos, Vertigem, Debilidade, anemia, A exposição da pele prolongada ou repetida provoca desengorduramento e dermatite.

Até onde sabemos, as propriedades químicas, físicas e toxicológicas não foram minuciosamente investigadas.

#### 4.3 Indicações sobre cuidados médicos urgentes e tratamentos especiais necessários

Dados não disponíveis

---

### 5. MEDIDAS DE COMBATE A INCÊNDIO

#### 5.1 Meios de extinção

##### Meios adequados de extinção

Utilizar água pulverizada, espuma resistente ao álcool, produto químico seco ou dióxido de carbono.

- 5.2 Perigos especiais decorrentes da substância ou mistura** Óxidos de carbono
- 5.3 Recomendações para o pessoal de combate a incêndios**  
Usar equipamento de respiração autónomo para combate a incêndios, se necessário.
- 5.4 Outras informações**  
Os jatos de água podem ser utilizados para arrefecer os contentores fechados.

## 6. MEDIDAS DE CONTROLE PARA DERRAMAMENTO OU VAZAMENTO

- 6.1 Precauções individuais, equipamento de proteção e procedimentos de emergência**  
Usar equipamento de proteção individual. Evitar a respiração do vapor/névoa/gas. Assegurar ventilação adequada. Cortar todas as fontes de ignição. Evacuar o pessoal para áreas de segurança. Atenção com a acumulação de vapores que pode formar concentrações explosivas. Os vapores podem-se acumular nas áreas baixas.
- 6.2 Precauções a nível ambiental**  
Prevenir dispersão ou derramamento, se seguro. Não permitir a entrada do produto no sistema de esgotos. A descarga no meio ambiente deve ser evitada.
- 6.3 Métodos e materiais de confinamento e limpeza**  
Controlar e recuperar o líquido derramado com aspirador protegido electricamente ou varrer a seco e por o líquido dentro de contentores para a eliminação de acordo com as regulações locais (ver secção 13).
- 6.4 Remissão para outras secções**  
Para eliminação de resíduos ver secção 13.

## 7. MANUSEIO E ARMAZENAMENTO

- 7.1 Precauções para um manuseamento seguro**  
Evitar o contacto com a pele e os olhos. Evitar a inalação do vapor ou da névoa. Manter afastado de qualquer chama ou fonte de ignição - Não fumar. Tome medidas para impedir a formação de electricidade estática.
- 7.2 Condições de armazenagem segura, incluindo eventuais incompatibilidades**  
Armazenar em local fresco. Guardar o recipiente herméticamente fechado em lugar seco e bem ventilado. Os contentores abertos devem ser cuidadosamente fechados de novo e têm que ficar direitos para evitar a dispersão.
- 7.3 Utilizações finais específicas**  
Dados não disponíveis

## 8. CONTROLE DE EXPOSIÇÃO E PROTEÇÃO INDIVIDUAL

### 8.1 Parâmetros de controlo

#### Límites de exposição ocupacional

Componente	No. CAS	Valor	Parâmetros de controlo	Bases
Xylene	1330-20-7	LT 78 ppm 340 mg/m <sup>3</sup>		AGENTES QUÍMICOS CUJA INSALUBRIDADE É CARACTERIZADA POR LIMITE DE TOLERÂNCIA E INSPEÇÃO NO LOCAL DE TRABALHO
	Observações	Grau de insalubridade: médio		

#### Limites profissionais biológicas de exposição

Componente	No. CAS	Parametros	Valor	Amostras biológicas	Bases
Xylene	1330-20-7	Ác. MetilHipúrico	1.5g/g creatinina	Urina	NR 7 - Programa de controle medico de saúde ocupacional

## 8.2 Controlo da exposição

### Controlos técnicos adequados

Manusear de acordo com as boas práticas industriais de higiene e segurança. Lavar as mãos antes dos intervalos e no final do dia de trabalho.

### Proteção individual

#### Protecção ocular/ facial

Mascarares de protecção e óculos de segurança. Use equipamento de protecção ocular testado e aprovado de acordo com as normas governamentais adequadas, tais como NIOSH (US) ou EN 166 (EU).

#### Protecção da pele

Manusear com luvas. As luvas devem ser inspeccionadas antes da utilização. Use uma técnica adequada para a remoção das luvas (sem tocar a superfície exterior da luva) para evitar o contacto da pele com o produto. Descarte as luvas contaminadas após o uso, em conformidade com as leis e boas práticas de laboratório . Lavar e secar as mãos.

As luvas de protecção seleccionadas devem satisfazer as especificações da Directiva da UE 89/689/CEE e a norma EN 374 derivada dela.

#### Contacto total

Material: Borracha com flúor  
espessura mínima da capa: 0.7  
mm

Pausa através do tempo: 480 min

Material ensaiado: Vitoject® (KCL 890 / Aldrich Z677698, Tamanho M)

#### Contacto com salpicos Material:

Borracha de nitrilo espessura  
mínima da capa: 0.4 mm  
Pausa através do tempo: 35 min

Material ensaiado: Camatril® (KCL 730 / Aldrich Z677442, Tamanho M)

fonte de dados: KCL GmbH, D-36124 Eichenzell, Telefone +49 (0)6659 87300, e-mail sales@kcl.de, Método de ensaio: EN374

Se for utilizado em solução, ou misturado com outras substâncias, e sob condições que diferem da EN 374, contactar o fornecedor de luvas da CE. Esta recomendação é apenas desejável e deve ser avaliada por um responsável de segurança e higiene industrial familiarizado com a situação específica de utilização pretendida pelos nossos clientes. Não deve ser interpretado como uma oferta de aprovação para qualquer cenário de uso específico

#### Protecção do corpo

Fato completo de protecção para produtos químicos, Tecido protector anti-estático retardador de chama., O tipo de equipamento de protecção deve ser escolhido de acordo com a concentração e a quantidade da substância perigosa no local de trabalho.

#### Protecção respiratória

Nos casos em que a avaliação de risco mostrar que os respiradores purificadores do ar são apropriados, use um respirador de cobertura facial total com cartuchos de combinação multiobjectivos (E.U.A.) ou do tipo ABEK (EN 14387) como apoio a controlos de engenharia. Se o respirador for o único meio de protecção, usa um respirador de ar de cobertura facial total. Use respiradores e componentes testados e aprovados por normas governamentais apropriadas, tais como as NIOSH (E.U.A.) ou CEN (UE).

---

## 9. PROPRIEDADES FÍSICAS E QUÍMICAS

### 9.1 Informações sobre propriedades físicas e químicas de base

- a) Aspetto Forma: claro, líquido  
Cor: incolor
- b) Odor Dados não disponíveis
- c) Limite de Odor Dados não disponíveis
- d) pH Dados não disponíveis
- e) Ponto de fusão/ponto < 0 °C de congelamento
- f) Ponto de ebulação inicial 137 - 140 °C - lit.  
e intervalo de ebulação
- g) Ponto de fulgor 25 °C - câmara fechada
- h) Taxa de evaporação Dados não disponíveis
- i) Inflamabilidade (sólido, Dados não disponíveis gás)
- j) Limites de inflamabilidade superior Limite inferior de explosão: 7 %(V)  
/ inferior ou  
explosividade
- k) Pressão de vapor 24 hPa a 37.70 °C
- l) Densidade de vapor 3.67 - (Ar = 1.0)
- m) Densidade relativa Dados não disponíveis
- n) Hidrossolubilidade Dados não disponíveis
- o) Coeficiente de partição Dados não disponíveis n-octanol/água
- p) Temperatura de auto- Dados não disponíveis ignição
- q) Temperatura de Dados não disponíveis decomposição
- r) Viscosidade Dados não disponíveis

---

## 10. ESTABILIDADE E REATIVIDADE

### 10.1 Reatividade

Dados não disponíveis

### 10.2 Estabilidade química

Dados não disponíveis

### 10.3 Possibilidade de reações perigosas

Dados não disponíveis

### 10.4 Condições a evitar

Calor, chamas e faíscas.

### 10.5 Materiais incompatíveis

Agentes oxidantes fortes

### 10.6 Produtos de decomposição perigosos

Outros produtos de decomposição perigosos - Dados não disponíveis

---

## 11. INFORMAÇÕES TOXICOLÓGICAS

### 11.1 Informações sobre os efeitos toxicológicos

#### Toxicidade aguda

DL50 Oral - Ratazana - 3,523 mg/kg

CL50 Inalação - Ratazana - 4 h - 5000 ppm

DL50 Dérmico - Coelho - 12,126 mg/kg

#### **Corrosão/irritação cutânea**

Pele - Coelho - Irritação cutânea - 24 h

#### **Lesões oculares graves/irritação ocular**

Olhos - Coelho - Irritação moderada dos olhos

**Sensibilização respiratória ou cutânea** Dados não disponíveis

#### **Mutagenicidade em células germinativas**

Dados não disponíveis

#### **Carcinogenicidade**

IARC: 3 - Grupo 3: Não classificado quanto à sua carcinogenicidade para os humanos (Xylene)

#### **Toxicidade à reprodução e lactação**

Dados não disponíveis

#### **Toxicidade sistêmica para órgãos-alvo específicos - exposição única**

Pode provocar irritação das vias respiratórias.

#### **Toxicidade sistêmica para órgãos-alvo específicos - exposição repetida**

Inalação - Pode afectar os órgãos após exposição prolongada ou repetida. - Sistema nervoso central, Fígado, Rim

#### **Perigo de aspiração**

Pode ser mortal por ingestão e penetração nas vias respiratórias.

#### **Possíveis danos para a saúde**

**Inalação** Nocivo se for inalado. Causa uma irritação no aparelho respiratório.

**Ingestão** Pode ser perigoso se for engolido. Perigo de aspiração se for engolido - pode entrar nos pulmões e causar danos.

**Pele** Pode ser perigoso se for absorbo pela pele. Causa uma irritação da pele. **Olhos** Provoca irritação ocular grave.

#### **Sinais e sintomas de exposição**

Visão desfocada, Falta de coordenação., Dor de cabeça, Náusea, Vómitos, Vertigem, Debilidade, anemia, A exposição da pele prolongada ou repetida provoca desengorduramento e dermatite. Até onde sabemos, as propriedades químicas, físicas e toxicológicas não foram minuciosamente investigadas.

#### **Informação adicional**

RTECS: Dados não disponíveis

## **12. INFORMAÇÕES ECOLÓGICAS**

### **12.1 Ecotoxicidade**

Toxicidade em peixes CL50 - Oncorhynchus mykiss (truta arco-íris) - 3.3 mg/l - 96 h

Toxicidade em dáfnias e CE50 - Daphnia magna - 75.49 mg/l - 24 h  
outros invertebrados  
aquáticos

Toxicidade em algas Inibição do crescimento CE50 - Pseudokirchneriella subcapitata - 72 mg/l - 14 d

**12.2 Persistência e degradabilidade**

Biodegradabilidade      Resultado: - Rapidamente biodegradável.

**12.3 Potencial biocumulativo** Dados não disponíveis**12.4 Mobilidade no solo** Dados não disponíveis**12.5 Resultados da avaliação PBT e mPmB** Dados não disponíveis**12.6 Outros efeitos adversos**

Tóxico para os organismos aquáticos.

**13. CONSIDERAÇÕES SOBRE TRATAMENTO E DISPOSIÇÃO****13.1 Métodos de tratamento de resíduos****Produto**

Queimar em um incinerador químico equipado com pós-combustor e purificador de gases, mas tomar precauções adicionais ao colocar esse material em ignição, visto que é altamente inflamável. Propor a entrega de soluções excedentes e não recicláveis a uma empresa idónea de tratamento de resíduos.

**Embalagens contaminadas**

Eliminar como produto Não utilizado.

**14. INFORMAÇÕES SOBRE TRANSPORTE****14.1 Número ONU**

ADR/RID: 1307	DOT (US): 1307	IMDG: 1307	IATA: 1307	ANTT: 1307
---------------	----------------	------------	------------	------------

**14.2 Designação oficial de transporte da ONU**

ADR/RID: XILENOS

DOT (US): Xylenes

IMDG: XYLENES

IATA: Xylenes

ANTT: XILENOS

**14.3 Classes de perigo para efeitos de transporte**

ADR/RID: 3	DOT (US): 3	IMDG: 3	IATA: 3	ANTT: 3
------------	-------------	---------	---------	---------

**14.4 Grupo de embalagem**

ADR/RID: III	DOT (US): III	IMDG: III	IATA: III	ANTT: III
--------------	---------------	-----------	-----------	-----------

**14.5 Perigos para o ambiente**

ADR/RID: não	DOT (US): não	IMDG Poluente marinho: não	IATA: não
--------------	---------------	----------------------------	-----------

**14.6 Precauções especiais para o utilizador**

Dados não disponíveis

**14.7 Numero De Risco 30****15. REGULAMENTAÇÕES****15.1 Regulamentação/legislação específica para a substância ou mistura em matéria de saúde, segurança e ambiente**

Esta Ficha de Informações de Produtos Químicos foi preparada de acordo com a NBR 14725-4/2012 da ABNT (Associação Brasileira de Normas Técnicas)

---

## 16. OUTRAS INFORMAÇÕES

### Outras informações

Direitos exclusivos, 2015, da Sigma-Aldrich Co. LLC. Permissão concedida para fazer número ilimitado de cópias em papel, somente para uso interno.

Acredita-se que as informações acima estejam correctas, embora não pretendam ser totalmente abrangentes, devendo ser usadas apenas como um guia. A informação contida neste documento esta baseada no presente estado do nosso conhecimento e é aplicável ás precauções de segurança apropriadas para o produto. Não representa nenhuma garantia das propriedades do produto.

A Corporação Sigma-Aldrich e as suas companhias afiliadas, não responderão por nenhum dano resultante do manuseio ou do contato com o produto acima. Consultar [www.sigma-aldrich.com](http://www.sigma-aldrich.com) e/ou o verso da factura ou nota que acompanha o produto para tomar conhecimento dos termos adicionais e condições de venda.

**SIGMA-ALDRICH**[sigma-aldrich.com](http://sigma-aldrich.com)**FICHA DE INFORMAÇÕES DE SEGURANÇA DE PRODUTOS QUÍMICOS**

Versão 5.4

Data de revisão 31.05.2017

Data de impressão 14.10.2019

**1. IDENTIFICAÇÃO DO PRODUTO E DA EMPRESA****1.1 Identificadores do produto**

Nome do produto : 2-Methylcyclohexanone

Referência do Produto : W394602

Marca : Aldrich

**1.2 Outros meios de identificação**

Tetrahydro-o-cresol

**1.3 Utilizações identificadas relevantes da substância ou mistura e utilizações desaconselhadas** Só para utilização R&D. Não para utilização farmacêutica, doméstica ou outras utilizações.**1.4 Identificação do fornecedor da ficha de dados de segurança**Companhia : Sigma-Aldrich Brasil Ltda.  
Rua Torre Eiffel, 100, galpão 2 Parque Rincão  
06705-481 COTIA - SP  
BRAZIL

Telefone : +55 11 2170 8484

Número de Fax : +55 11 4191 2586

Email endereço : sigmabr@sial.com

**1.5 Número de telefone de emergência**

0800-707-7022 / 0800 17 2020

**2. IDENTIFICAÇÃO DE PERIGOS****2.1 Classificação GHS**Líquidos inflamáveis (Categoria 3)  
Toxicidade aguda, Inalação (Categoria 4)



## 2.2 Elementos da Etiqueta GHS, incluindo declarações de prevenção Pictograma

Palavra de advertência	Atenção
Frases de Perigo H226 H332	Líquido e vapor inflamáveis. Nocivo por inalação.
Frases de Precaução	
Prevenção P210	Manter afastado do calor/faísca/chama aberta/ superfícies quentes. Não fumar.
P233	Manter o recipiente bem fechado.
P240	Ligaçāo à terra/equipotencial do recipiente e do equipamento receptor.
P241	Utilizar equipamento eléctrico/ de ventilação/ de iluminação/ à prova de explosão.
P242	Utilizar apenas ferramentas antichispa.
P261	Evitar respirar as poeiras/ fumos/ gases/ névoas/ vapores/ aerossóis.
Resposta	
P303 + P361 + P353	SE ENTRAR EM CONTACTO COM A PELE (ou o cabelo): retirar imediatamente toda a roupa contaminada. Enxaguar a pele com água/tomar um duche.
P370 + P378	Em caso de incêndio: para extinguir utilizar areia seca, um produto químico seco ou espuma resistente ao álcool.
Armazenagem P403 + P235	Armazenar em local bem ventilado. Conservar em ambiente fresco.
Destruição P501	Eliminar o conteúdo/ recipiente em instalação aprovada de destruição de resíduos.

## 2.3 Outros Perigos - nenhum(a)

---

## 3. COMPOSIÇÃO E INFORMAÇÕES SOBRE OS INGREDIENTES

### 3.1 Substâncias

Sinónimos	:	Tetrahydro-o-cresol
Formula	:	C7H12O
Peso molecular	:	112.17 g/mol
No. CAS	:	583-60-8

Componente	Concentração
No. CAS	583-60-8
No. CE	209-513-6
No. de Index	606-011-00-2
	<= 100 %

#### 4. MEDIDAS DE PRIMEIROS-SOCORROS

##### 4.1 Descrição das medidas de primeiros socorros

###### Recomendação geral

Consultar um médico. Mostrar esta ficha de segurança ao médico de serviço.

###### Em caso de inalação

Se for respirado, levar a pessoa para o ar fresco. Se não respirar, dar respiração artificial. Consultar um médico.

###### Em caso de contacto com a pele

Lavar com sabão e muita água. Consultar um médico.

###### Se entrar em contacto com os olhos

Lavar os olhos com água como precaução.

###### Em caso de ingestão

NÃO provoca vômito. Nunca dar nada pela boca a uma pessoa inconsciente. Enxaguar a boca com água. Consultar um médico.

##### 4.2 Sintomas e efeitos mais importantes, tanto agudos como retardados

Até onde sabemos, as propriedades químicas, físicas e toxicológicas não foram minuciosamente investigadas.

##### 4.3 Indicações sobre cuidados médicos urgentes e tratamentos especiais necessários

Dados não disponíveis

---

#### 5. MEDIDAS DE COMBATE A INCÊNDIO

##### 5.1 Meios de extinção

###### Meios adequados de extinção

Pó seco Areia seca

###### Meios inadequados de extinção

NÃO UTILIZAR jactos de água.

##### 5.2 Perigos especiais decorrentes da substância ou mistura

Dados não disponíveis

##### 5.3 Recomendações para o pessoal de combate a incêndios

Usar equipamento de respiração autónomo para combate a incêndios, se necessário.

##### 5.4 Informações adicionais

Os jatos de água podem ser utilizados para arrefecer os contentores fechados.

---

## **6. MEDIDAS DE CONTROLE PARA DERRAMAMENTO OU VAZAMENTO**

### **6.1 Precauções individuais, equipamento de proteção e procedimentos de emergência**

Usar equipamento de proteção individual. Evitar a respiração do vapor/névoa/gas. Assegurar ventilação adequada. Cortar todas as fontes de ignição. Atenção com a acumulação de vapores que pode formar concentrações explosivas. Os vapores podem-se acumular nas áreas baixas.

### **6.2 Precauções a nível ambiental**

Prevenir dispersão ou derramamento, se seguro. Não permitir a entrada do produto no sistema de esgotos.

### **6.3 Métodos e materiais de confinamento e limpeza**

Controlar e recuperar o líquido derramado com um produto absorvente não combustível, (por exemplo areia, terra, terra diatomácea, vermiculite) e pôr o líquido dentro de contentores para eliminação de acordo com os regulamentos locais / nacionais (ver secção 13).

### **6.4 Remissão para outras secções**

Para eliminação de resíduos ver secção 13.

---

## **7. MANUSEIO E ARMAZENAMENTO**

### **7.1 Precauções para um manuseamento seguro**

Evitar o contacto com a pele e os olhos. Evitar a inalação do vapor ou da névoa.

Manter afastado de qualquer chama ou fonte de ignição - Não fumar. Tome medidas para impedir a formação de electricidade estática.

### **7.2 Condições de armazenagem segura, incluindo eventuais incompatibilidades**

Guardar o recipiente herméticamente fechado em lugar seco e bem ventilado. Os contentores abertos devem ser cuidadosamente fechados de novo e têm que ficar direitos para evitar a dispersão.

### **7.3 Utilização(ões) final(is) específica(s)**

Dados não disponíveis

---

## **8. CONTROLE DE EXPOSIÇÃO E PROTEÇÃO INDIVIDUAL**

### **8.1 Parâmetros de controlo**

#### **Límites de exposição ocupacional**

### **8.2 Controlo da exposição**

#### **Controlos técnicos adequados**

Manusear de acordo com as boas práticas industriais de higiene e segurança. Lavar as mãos antes dos intervalos e no final do dia de trabalho.

#### **Proteção individual**

##### **Protecção ocular/ facial**

Mascara de protecção e óculos de segurança. Use equipamento de proteção ocular testado e aprovado de acordo com as normas governamentais adequadas, tais como NIOSH (US) ou EN 166 (EU).

##### **Protecção da pele**

Manusear com luvas. As luvas devem ser inspecionadas antes da utilização. Use uma técnica adequada para a remoção das luvas (sem tocar a superfície exterior da luva) para evitar o contacto da pele com o produto. Descarte as luvas contaminadas após o uso, em conformidade com as leis e boas práticas de laboratório . Lavar e secar as mãos.

As luvas de protecção seleccionadas devem satisfazer as especificações da Directiva da UE 89/689/CEE e a norma EN 374 derivada dela.

##### **Contacto total**

Material: borracha butílica

espessura mínima da capa: 0.3

mm

Pausa através do tempo: 480 min

Material ensaiado:Butoject® (KCL 897 / Aldrich Z677647, Tamanho M)

Contacto com salpicos

Material: Borracha de nitrilo

espessura mínima da capa: 0.4

mm

Pausa através do tempo: 30 min

Material ensaiado:Camatril® (KCL 730 / Aldrich Z677442, Tamanho M)

fonte de dados: KCL GmbH, D-36124 Eichenzell, Telefone +49 (0)6659 87300, e-mail sales@kcl.de, Método de ensaio: EN374

Se for utilizado em solução, ou misturado com outras substâncias, e sob condições que diferem da EN 374, contactar o fornecedor de luvas da CE. Esta recomendação é apenas desejável e deve ser avaliada por um responsável de segurança e higiene industrial familiarizado com a situação específica de utilização pretendida pelos nossos clientes. Não deve ser interpretado como uma oferta de aprovação para qualquer cenário de uso específico

### **Protecção do corpo**

Fato completo de protecção para produtos químicos, Tecido protector anti-estático retardador de chama., O tipo de equipamento de protecção deve ser escolhido de acordo com a concentração e a quantidade da substância perigosa no local de trabalho.

### **Protecção respiratória**

Nos casos em que a avaliação de risco mostrar que os respiradores purificadores do ar são apropriados, use um respirador de cobertura facial total com cartuchos de combinação multiobjectivos (E.U.A.) ou do tipo ABEK (EN 14387) como apoio a controlos de engenharia. Se o respirador for o único meio de protecção, usa um respirador de ar de cobertura facial total. Use respiradores e componentes testados e aprovados por normas governamentais apropriadas, tais como as NIOSH (E.U.A.) ou CEN (UE).

## **9. PROPRIEDADES FÍSICAS E QUÍMICAS**

### **9.1 Informações sobre propriedades físicas e químicas de base**

- a) Aspetto      Forma: claro, líquido  
Cor: amarelo claro
- b) Odor      Dados não disponíveis
- c) Limite de Odor      Dados não disponíveis
- d) pH      Dados não disponíveis
- e) Ponto de fusão/ponto      Ponto/intervalo de fusão: -13.9 °C de congelamento
- f) Ponto de ebulição inicial 162 - 163 °C - lit.  
e intervalo de ebulição
- g) Ponto de fulgor      48 °C - câmara fechada
- h) Taxa de evaporação      Dados não disponíveis
- i) Inflamabilidade (sólido,      Dados não disponíveis gás)
- j) Limites de Limite inferior de explosão: 1.2 %(V) inflamabilidade superior / inferior ou  
explosividade
- k) Pressão de vapor 1 hPa a 20 °C

- l) Densidade de vapor 3.87 - (Ar = 1.0)
- m) Densidade relativa 0.924 g/cm<sup>3</sup> a 25 °C
- n) Hidrossolubilidade insolúvel
- o) Coeficiente de partição Dados não disponíveis n-octanol/água
- p) Temperatura de auto- Dados não disponíveis ignição
- q) Temperatura de Dados não disponíveis decomposição
- r) Viscosidade Dados não disponíveis

## **10. ESTABILIDADE E REATIVIDADE**

**10.1 Reatividade** Dados não disponíveis

**10.2 Estabilidade química** Dados não disponíveis

**10.3 Possibilidade de reações perigosas** Dados não disponíveis

**10.4 Condições a evitar** Calor, chamas e faíscas.

**10.5 Materiais incompatíveis**

Agentes oxidantes fortes, Agentes redutores fortes, Bases fortes

**10.6 Produtos de decomposição perigosos**

Produtos perigosos de decomposição formados durante os incêndios. - Óxidos de carbono  
Outros produtos de decomposição perigosos - Dados não disponíveis

## **11. INFORMAÇÕES TOXICOLÓGICAS**

**11.1 Informações sobre os efeitos toxicológicos**

**Toxicidade aguda**

Dados não disponíveis

Inalação: Dados não disponíveis

Dérmico: Dados não disponíveis

**Corrosão/irritação cutânea**

Dados não disponíveis

**Lesões oculares graves/irritação ocular**

Dados não disponíveis

**Sensibilização respiratória ou cutânea**

Dados não disponíveis

**Mutagenicidade em células germinativas**

Dados não disponíveis

**Carcinogenicidade**

IARC: Nenhum componente deste produto presente a níveis maiores ou iguais a 0.1% é identificado como carcinogénio provável, possível ou confirmado pelo IARC.

**Toxicidade à reprodução e lactação**

Dados não disponíveis

**Toxicidade sistêmica para órgãos-alvo específicos - exposição única**

Dados não disponíveis

**Toxicidade sistêmica para órgãos-alvo específicos - exposição**

**repetida** Dados não disponíveis

**Perigo de aspiração**

Dados não disponíveis

**Possíveis danos para a saúde**

<b>Inalação</b>	Nocivo se for inalado. Pode causar uma irritação do aparelho respiratório.
<b>Ingestão</b>	Pode ser perigoso se for engolido.
<b>Pele</b>	Pode ser perigoso se for absorso pela pele. Pode causar uma irritação da pele.
<b>Olhos</b>	Pode causar uma irritação dos olhos.

**Sinais e sintomas de exposição**

Até onde sabemos, as propriedades químicas, físicas e toxicológicas não foram minuciosamente investigadas.

**Informação adicional**

RTECS: GW1750000

**12. INFORMAÇÕES ECOLÓGICAS****12.1 Ecotoxicidade**

Toxicidade em peixes CL0 - Leuciscus idus melanotus - 370 mg/l - 48 h

CL50 - Leuciscus idus (Carpa dourada) - 470 - 500 mg/l - 48 h

Toxicidade em dáfnias e CE50 - Daphnia magna - 377 mg/l - 24 h outros invertebrados aquáticos

**12.2 Persistência e**

**degradabilidade** Dados não disponíveis

**12.3 Potencial biocumulativo**

Dados não disponíveis

**12.4 Mobilidade no solo** Dados não

disponíveis

**12.5 Resultados da avaliação PBT**

**e mPmB** Dados não disponíveis

**12.6 Outros efeitos adversos**

Dados não disponíveis

**13. CONSIDERAÇÕES SOBRE TRATAMENTO E DISPOSIÇÃO****13.1 Métodos de tratamento de resíduos****Produto**

Queimar em um incinerador químico equipado com pós-combustor e purificador de gases, mas tomar precauções adicionais ao colocar esse material em ignição, visto que é altamente inflamável. Deve ser eliminado como resíduo perigoso de acordo com a legislação local. O tratamento e a disposição devem ser avaliados especificamente para cada produto. Devem ser consultadas legislações federais, estaduais e municipais. Manter restos de produto em suas embalagens originais e devidamente fechadas. O descarte deve ser realizado conforme o estabelecido para o produto.

**Embalagens contaminadas**

Não reutilize embalagens vazias. Estas podem conter restos do produto e devem ser mantidas fechadas e encaminhadas para descarte apropriado conforme estabelecido para o produto.

---

## 14. INFORMAÇÕES SOBRE TRANSPORTE

### 14.1 Número ONU

ADR/RID: 2297      DOT (US): 2297      IMDG: 2297      IATA: 2297      ANTT: 2297

### 14.2 Designação oficial de transporte da ONU

ADR/RID: METILCICLOHEXANONA  
DOT (US): Methylcyclohexanone  
IMDG: METHYLCYCLOHEXANONE  
IATA: Methylcyclohexanone  
ANTT: METILCICLO-HEXANONA

### 14.3 Classes de perigo para efeitos de transporte

ADR/RID: 3      DOT (US): 3      IMDG: 3      IATA: 3      ANTT: 3

### 14.4 Grupo de embalagem

ADR/RID: III      DOT (US): III      IMDG: III      IATA: III      ANTT: III

### 14.5 Perigos para o ambiente

ADR/RID: não      DOT (US): não      IMDG Poluent<sub>E</sub> marinho: não      IATA: não

### 14.6 Precauções especiais para o utilizador

Dados não disponíveis

### 14.7 Numero De Risco 30

---

## 15. REGULAMENTAÇÕES

### 15.1 Regulamentação/legislação específica para a substância ou mistura em matéria de saúde, segurança e ambiente

Esta Ficha de Informações de Produtos Químicos foi preparada de acordo com a NBR 14725-4/2014 da ABNT (Associação Brasileira de Normas Técnicas)

---

## 16. OUTRAS INFORMAÇÕES

### Informações adicionais

Direitos exclusivos, 2016, da Sigma-Aldrich Co. LLC. Permissão concedida para fazer número ilimitado de cópias em papel, somente para uso interno.

Acredita-se que as informações acima estejam correctas, embora não pretendam ser totalmente abrangentes, devendo ser usadas apenas como um guia. A informação contida neste documento esta baseada no presente estado do nosso conhecimento e é aplicável às precauções de segurança apropriadas para o produto. Não representa nenhuma garantia das propriedades do produto. A Corporação Sigma-Aldrich e as suas companhias afiliadas, não responderão por nenhum dano resultante do manuseio ou do contato com o produto acima. Consultar [www.sigma-aldrich.com](http://www.sigma-aldrich.com) e/ou o verso da factura ou nota que acompanha o produto para tomar conhecimento dos termos adicionais e condições de venda.

# FICHA DE DADOS DE SEGURANÇA

Data de revisão 24.07.2019 Versão 6.2

Data de impressão 15.10.2019

## 1. IDENTIFICAÇÃO DO PRODUTO E DA EMPRESA

### 1.1 Identificadores do produto

Nome do produto : 2-sec-Butylcyclohexanone

Referência do Produto : W326100

Marca : Aldrich

No. REACH : Um número de registo não está disponível para esta substancia,  
já que a substancia ou os seus usos estão isentos do registo,  
a tonelagem anual não requere registo ou este registo está  
previsto para uma data posterior

No. CAS : 14765-30-1

### 1.2 Utilizações identificadas relevantes da substância ou mistura e utilizações desaconselhadas

Utilizações : Produtos químicos de laboratório, Fabrico de substâncias identificadas

### 1.3 Identificação do fornecedor da ficha de dados de segurança

Companhia : Sigma-Aldrich Brasil Ltda.

Av. das Nações Unidas 23.043  
SÃO PAULO - SP

04795-100  
BRAZIL

Telefone : +55 11 3732 3100

Número de Fax : +55 11 5522 7409

### 1.4 Número de telefone de emergência

Número de Telefone de : 0800-707-7022 / 0800 17 2020

Emergência

---

## 2. IDENTIFICAÇÃO DE PERIGOS

### 2.1 Classificação da substância ou mistura

#### **Classificação de acordo com el Regulamento (CE) 1272/2008**

Líquidos inflamáveis (Categoria 4), H227

Toxicidade aguda, Oral (Categoria 5), H303

Para o pleno texto das DECLARAÇÕES H mencionadas nesta Secção, ver a Secção 16.

### 2.2 Elementos do rótulo

#### **Rotulagem de acordo com o Regulamento (CE) 1272/2008**

Pictograma	nenhum(a)
------------	-----------

Palavra-sinal	Atenção
---------------	---------

Declaração de perigo

H227	Líquido combustível.
H303	Pode ser perigoso por ingestão.

declaração de precaução

Prevenção	
P210	Manter afastado do calor/faísca/chama aberta/ superfícies quentes. Não fumar.
P280	Usar luvas de proteção/ vestuário de proteção/ proteção ocular/ proteção facial.
Resposta	
P312	Caso sinta indisposição, contacte um CENTRO DE INFORMAÇÃO ANTIVENENOS/médico.
P370 + P378	Em caso de incêndio: para a extinção utilizar areia seca, um produto químico seco ou espuma resistente ao álcool.
Armazenagem	
P403 + P235	Armazenar em local bem ventilado. Conservar em ambiente fresco.
Destruição	
P501	Eliminar o conteúdo/ recipiente em instalação aprovada de destruição de resíduos.

### 2.3 Outros Perigos - nenhum(a)

### 3. COMPOSIÇÃO E INFORMAÇÕES SOBRE OS INGREDIENTES

#### 3.1 Substâncias

Sinónimos	: peppermint cyclohexanone
Formula	: C10H18O
Peso molecular	: 154.25 g/mol
No. CAS	: 14765-30-1
No. CE	: 238-830-2

Componente	Classificação	Concentração
<b>2-sec-Butylcyclohexan-1-one</b>		
	Flam. Liq. 4; Acute Tox. 5; H227, H303	<= 100 %

Para o pleno texto das DECLARAÇÕES H mencionadas nesta Secção, ver a Secção 16.

### 4. MEDIDAS DE PRIMEIROS-SOCORROS

#### 4.1 Descrição das medidas de primeiros socorros

##### Recomendação geral

Consultar um médico. Mostrar esta ficha de segurança ao médico de serviço.

##### Em caso de inalação

Se for respirado, levar a pessoa para o ar fresco. Se não respirar, dar respiração artificial. Consultar um médico.

##### Em caso de contacto com a pele

Lavar com sabão e muita água. Consultar um médico.

##### Se entrar em contacto com os olhos

Lavar os olhos com água como precaução.

##### Em caso de ingestão

NÃO provoca vômito. Nunca dar nada pela boca a uma pessoa inconsciente. Enxaguar a boca com água. Consultar um médico.

#### 4.2 Sintomas e efeitos mais importantes, tanto agudos como retardados

Os sintomas e efeitos mais importantes conhecidos descrevem-se na etiqueta (ver secção 2.2) e / ou na secção 11

#### 4.3 Indicações sobre cuidados médicos urgentes e tratamentos especiais necessários

Dados não disponíveis

---

## 5. MEDIDAS DE COMBATE A INCÊNDIO

### 5.1 Meios de extinção

#### **Meios adequados de extinção**

Utilizar água pulverizada, espuma resistente ao álcool, pó químico seco ou dióxido de carbono.

#### **5.2 Perigos especiais decorrentes da substância ou mistura** Óxidos de carbono

#### **5.3 Recomendações para o pessoal de combate a incêndios**

Usar equipamento de respiração autónomo para combate a incêndios, se necessário.

#### **5.4 Informações adicionais**

Os jatos de água podem ser utilizados para arrefecer os contentores fechados.

---

## 6. MEDIDAS DE CONTROLE PARA DERRAMAMENTO OU VAZAMENTO

### 6.1 Precauções individuais, equipamento de proteção e procedimentos de emergência

Usar equipamento de proteção individual. Evitar a respiração do vapor/névoa/gas. Cortar todas as fontes de ignição. Atenção com a acumulação de vapores que pode formar concentrações explosivas. Os vapores podem-se acumular nas áreas baixas. Para a proteção individual ver a secção 8.

### 6.2 Precauções a nível ambiental

Prevenir dispersão ou derramamento, se seguro. Não permitir a entrada do produto no sistema de esgotos.

### 6.3 Métodos e materiais de confinamento e limpeza

Controlar e recuperar o líquido derramado com aspirador protegido electricamente ou varrer a seco e por o líquido dentro de contentores para a eliminação de acordo com as regulações locais (ver secção 13). Manter em recipientes fechados adequados, para eliminação.

### 6.4 Remissão para outras secções

Para eliminação de resíduos ver secção 13.

---

## 7. MANUSEIO E ARMAZENAMENTO

### 7.1 Precauções para um manuseamento seguro

Evitar a inalação do vapor ou da névoa.

Manter afastado de qualquer chama ou fonte de ignição - Não fumar. Tome medidas para impedir a formação de electricidade estática. Ver precauções na secção 2.2

## **7.2 Condições de armazenagem segura, incluindo eventuais incompatibilidades**

Armazenar em local fresco. Guardar o recipiente herméticamente fechado em lugar seco e bem ventilado. Os contentores abertos devem ser cuidadosamente fechados de novo e têm que ficar direitos para evitar a dispersão.

## **7.3 Utilização(ões) final(is) específica(s)**

Aparte dos usos mencionados na secção 1.2 não se estipulam outros usos específicos

## **8. CONTROLE DE EXPOSIÇÃO E PROTEÇÃO INDIVIDUAL**

### **8.1 Parâmetros de controlo**

#### **Componentes a controlar com relação ao local de trabalho**

Nós não temos conhecimento de nenhuma limite de exposição nacional.

### **8.2 Controlo da exposição**

#### **Controlos técnicos adequados**

Manusear de acordo com as boas práticas industriais de higiene e segurança. Lavar as mãos antes dos intervalos e no final do dia de trabalho.

#### **Proteção individual**

##### **Protecção ocular/ facial**

Óculos de protecção com um lado protector de acordo com EN 166 Use equipamento de proteção ocular testado e aprovado de acordo com as normas governamentais adequadas, tais como NIOSH (US) ou EN 166 (EU).

##### **Protecção da pele**

Manusear com luvas. As luvas devem ser inspeccionadas antes da utilização. Use uma técnica adequada para a remoção das luvas (sem tocar a superfície exterior da luva) para evitar o contacto da pele com o produto. Descarte as luvas contaminadas após o uso, em conformidade com as leis e boas práticas de laboratório . Lavar e secar as mãos.

As luvas de proteção seleccionadas têm de estar de acordo com as especificações da Diretiva da UE 2016/425 e da norma EN 374 dela derivada.

Contacto total

Material: borracha butílica  
espessura mínima da capa: 0.3 mm  
Pausa através do tempo: 480 min

Material ensaiado:Butoject® (KCL 897 / Aldrich Z677647, Tamanho M)

Contacto com salpicos

Material: Borracha natural latex/cloropreno  
espessura mínima da capa: 0.6 mm

Pausa através do tempo: 30 min

Material ensaiado:Lapren® (KCL 706 / Aldrich Z677558, Tamanho M)

fonte de dados: KCL GmbH, D-36124 Eichenzell, Telefone +49 (0)6659 87300, email sales@kcl.de, Método de ensaio: EN374

Se for utilizado em solução, ou misturado com outras substâncias, e sob condições que diferem da EN 374, contactar o fornecedor de luvas da CE. Esta recomendação é apenas desejável e deve ser avaliada por um responsável de segurança e higiene industrial familiarizado com a situação específica de utilização pretendida pelos nossos clientes. Não deve ser interpretado como uma oferta de aprovação para qualquer cenário de uso específico

### **Protecção do corpo**

Roupas impermeáveis, O tipo de equipamento de protecção deve ser escolhido de acordo com a concentração e a quantidade da substância perigosa no local de trabalho.

### **Protecção respiratória**

Nos casos em que a avaliação de risco mostrar que os respiradores purificadores do ar são apropriados, use um respirador de cobertura facial total com cartuchos de combinação multi-objectivos (E.U.A.) ou do tipo ABEK (EN 14387) como apoio a controlos de engenharia. Se o respirador for o único meio de protecção, usa um respirador de ar de cobertura facial total. Use respiradores e componentes testados e aprovados por normas governamentais apropriadas, tais como as NIOSH (E.U.A.) ou CEN (UE).

### **Controlo da exposição ambiental**

Prevenir dispersão ou derramamento, se seguro. Não permitir a entrada do produto no sistema de esgotos.

## **9. PROPRIEDADES FÍSICAS E QUÍMICAS**

### **9.1 Informações sobre propriedades físicas e químicas de base**

- a) Aspetto Forma: claro, líquido  
Cor: amarelo claro
- b) Odor Dados não disponíveis
- c) Limiar olfativo Dados não disponíveis
- d) pH Dados não disponíveis

- e) Ponto de fusão/ponto Dados não disponíveis de congelação
- f) Ponto de ebulação 76 - 78 °C a 8 mmHg - lit. inicial e intervalo de ebulação
- g) Ponto de inflamação 83 °C - câmara fechada
- h) Taxa de evaporação Dados não disponíveis
- i) Inflamabilidade Dados não disponíveis  
(sólido, gás)
- j) limites de Dados não disponíveis inflamabilidade superior / inferior ou explosivas
- k) Pressão de vapor Dados não disponíveis
- l) Densidade de vapor Dados não disponíveis
- m) Densidade relativa 0.912 gr/cm<sup>3</sup> a 25 °C
- n) Hidrossolubilidade Dados não disponíveis
- o) Coeficiente de Dados não disponíveis partição: noctanol/água
- p) Temperatura de Dados não disponíveis auto-ignição
- q) Temperatura de Dados não disponíveis decomposição
- r) Viscosidade Dados não disponíveis
- s) Propriedades Dados não disponíveis explosivas
- t) Propriedades Dados não disponíveis comburentes

## **9.2 Outra informação de segurança**

Dados não disponíveis

## **10. ESTABILIDADE E REATIVIDADE**

### **10.1 Reactividade** Dados não disponíveis

### **10.2 Estabilidade química**

Estável sob as condições recomendadas de armazenamento.

### **10.3 Possibilidade de reações**

**perigosas** Dados não disponíveis

### **10.4 Condições a evitar** Calor, chamas e faíscas.

### **10.5 Materiais incompatíveis** Dados não disponíveis

### **10.6 Produtos de decomposição perigosos**

Produtos perigosos de decomposição formados durante os incêndios. - Óxidos de carbono

Outros produtos de decomposição perigosos - Dados não disponíveis  
Em caso de incêndio: veja-se seção 5

---

## 11. INFORMAÇÕES TOXICOLÓGICAS

### 11.1 Informações sobre os efeitos toxicológicos

#### Toxicidade aguda

DL50 Oral - Ratazana - 2,400 mg/kg

DL50 Dérmico - Coelho - > 5,000 mg/kg

#### Corrosão/irritação cutânea

Dados não disponíveis

#### Lesões oculares graves/irritação ocular

Dados não disponíveis

#### Sensibilização respiratória ou cutânea

Dados não disponíveis

#### Mutagenicidade em células germinativas

Dados não disponíveis

#### Carcinogenicidade

IARC: Nenhum componente deste produto presente a níveis maiores ou iguais a 0.1% é identificado como carcinogénio provável, possível ou confirmado pelo IARC.

#### Toxicidade reprodutiva

Dados não disponíveis

#### Toxicidade para órgãos-alvo específicos - exposição única

Dados não disponíveis

#### Toxicidade para órgãos-alvo específicos - exposição repetida

Dados não disponíveis

#### Perigo de aspiração

Dados não disponíveis

#### Informação adicional

RTECS: GW1804000

---

## 12. INFORMAÇÕES ECOLÓGICAS

### 12.1 Toxicidade

Dados não disponíveis

### 12.2 Persistência e degradabilidade

Dados não disponíveis

### 12.3 Potencial de bioacumulação

Dados não disponíveis

### 12.4 Mobilidade no solo

Dados não disponíveis

### 12.5 Resultados da avaliação PBT e mPmB

A valoração de PBT / mPmB não está disponível já que a avaliação de segurança química não é necessária / não se realizou

### 12.6 Outros efeitos adversos

Dados não disponíveis

---

## 13. CONSIDERAÇÕES SOBRE TRATAMENTO E DISPOSIÇÃO

### 13.1 Métodos de tratamento de resíduos

#### Produto

Esse material combustível deve ser queimado em um incinerador químico equipado com um pós-combustor e purificador de gases. Propor a entrega de soluções excedentes e não recicláveis a uma empresa idónea de tratamento de resíduos.

#### Embalagens contaminadas

Eliminar como produto Não utilizado.

---

## **14. INFORMAÇÕES SOBRE TRANSPORTE**

### **14.1 Número ONU**

ADR/RID: -                    DOT (US): 1993 IMDG: -                    IATA: -                    ANTT: -

### **14.2 Designação oficial de transporte da ONU**

ADR/RID: Mercadorias não perigosas  
 DOT (US): Combustible liquid, n.o.s. (2-sec-Butylcyclohexan-1-one)  
 IMDG: Mercadorias não perigosas  
 IATA: Mercadorias não perigosas  
 ANTT: Mercadorias não perigosas

### **14.3 Classes de perigo para efeitos de transporte**

ADR/RID: -                    DOT (US):                    IMDG: -                    IATA: -                    NONE                    ANTT: -

### **14.4 Grupo de embalagem**

ADR/RID: -                    DOT (US): III                    IMDG: -                    IATA: -                    ANTT: -

### **14.5 Perigos para o ambiente**

ADR/RID: não                    DOT (US): não                    IMDG Poluente                    IATA: não marinho: não

### **14.6 Precauções especiais para o utilizador** Dados não disponíveis

### **14.7 Numero De Risco**

---

## **15. REGULAMENTAÇÕES**

### **15.1 Regulamentação/legislação específica para a substância ou mistura em matéria de saúde, segurança e ambiente**

Esta Ficha de Informações de Produtos Químicos foi preparada de acordo com a NBR 14725-4/2014 da ABNT (Associação Brasileira de Normas Técnicas)

---

## **16. OUTRAS INFORMAÇÕES**

### **Informações adicionais**

Direitos exclusivos, 2018, da Sigma-Aldrich Co. LLC. Permissão concedida para fazer número ilimitado de cópias em papel, somente para uso interno.

Acredita-se que as informações acima estejam correctas, embora não pretendam ser totalmente abrangentes, devendo ser usadas apenas como um guia. A informação contida neste documento está baseada no presente estado do nosso conhecimento e é aplicável às precauções de segurança apropriadas para o produto. Não representa nenhuma garantia das propriedades do produto. A Corporação Sigma-Aldrich e as suas companhias afiliadas, não responderão por nenhum dano resultante do manuseio ou do contato com o produto acima. Consultar [www.sigma-aldrich.com](http://www.sigma-aldrich.com) e/ou o verso da factura ou nota que acompanha o produto para tomar conhecimento dos termos adicionais e condições de venda.

A marca no cabeçalho e/ou rodapé deste documento pode não corresponder temporariamente ao produto adquirido, uma vez que alteramos a nossa marca. No entanto, todas as informações no documento referentes ao produto não sofreram alterações e correspondem ao produto encomendado. Para obter mais informações, envie um e-mail para [mlsbranding@sial.com](mailto:mlsbranding@sial.com).

**SIGMA-ALDRICH**[sigma-aldrich.com](http://sigma-aldrich.com)**FICHA DE INFORMAÇÕES DE SEGURANÇA DE PRODUTOS  
QUÍMICOS**

Versão 5.7

Data de revisão 25.12.2016

Data de impressão 14.10.2019

---

**1. IDENTIFICAÇÃO DO PRODUTO E DA EMPRESA****1.1 Identificadores do produto**

Nome do produto : 2-Methyltetrahydrofuran

Referência do Produto : 85488

Marca : Sigma-Aldrich

**1.2 Outros meios de identificação**

Tetrahydrosilvan

Tetrahydro-2-methylfuran

**1.3 Utilizações identificadas relevantes da substância ou mistura e utilizações desaconselhadas** Só para utilização R&D. Não para utilização farmacêutica, doméstica ou outras utilizações.**1.4 Identificação do fornecedor da ficha de dados de segurança**

Companhia : Sigma-Aldrich Brasil Ltda.

Rua Torre Eiffel, 100, galpão 2 Parque Rincão  
06705-481 COTIA - SP  
BRAZIL

Telefone : +55 11 2170 8484

Número de Fax : +55 11 4191 2586

Email endereço : sigmabr@sial.com

**1.5 Número de telefone de emergência**

0800-707-7022 / 0800 17 2020

---

**2. IDENTIFICAÇÃO DE PERIGOS****2.1 Classificação GHS**

Líquidos inflamáveis (Categoria 2)

Toxicidade aguda, Oral (Categoria 4)

Toxicidade aguda, Inalação (Categoria 5)

Toxicidade aguda, Dérmico (Categoria 5)

Irritação cutânea (Categoria 2)

Lesões oculares graves (Categoria 1)

## 2.2 Elementos da Etiqueta GHS, incluindo declarações de prevenção Pictograma



Frases de

Palavra de advertência	Perigo
Frases de Perigo	
H225	Líquido e vapor facilmente inflamáveis.
H302	Nocivo por ingestão.
H313 + H333	Pode ser perigoso em contacto com a pele ou se for inalado.
H315	Provoca irritação cutânea.
H318	Provoca lesões oculares graves.
Precaução	
Prevenção	
P210	Manter afastado do calor/faísca/chama aberta/ superfícies quentes. Não fumar.
P233	Manter o recipiente bem fechado.
P280	Usar luvas de protecção/ protecção ocular/ protecção facial.
Resposta	
P303 + P361 + P353	SE ENTRAR EM CONTACTO COM A PELE (ou o cabelo): retirar imediatamente toda a roupa contaminada. Enxaguar a pele com água/tomar um duche.
P304 + P312	EM CASO DE INALAÇÃO: Caso sinta indisposição, contacte um CENTRO DE INFORMAÇÃO ANTIVENENOS/médico.
P305 + P351 + P338 + P310	SE ENTRAR EM CONTACTO COM OS OLHOS: enxaguar cuidadosamente com água durante vários minutos. Se usar lentes de contacto, retire-as, se tal lhe for possível. Continuar a enxaguar. Contacte imediatamente um CENTRO DE INFORMAÇÃO ANTIVENENOS/ médico.
P312	Caso sinta indisposição, contacte um CENTRO DE INFORMAÇÃO ANTIVENENOS/médico.
P370 + P378 Armazenagem	Em caso de incêndio: para extinguir utilizar areia seca, um produto químico seco ou espuma resistente ao álcool.
P403 + P235	Armazenar em local bem ventilado. Conservar em ambiente fresco.
Destruição	
P501	Eliminar o conteúdo/ recipiente em instalação aprovada de destruição de resíduos.

## 2.3 Outros Perigos - nenhum(a)

### 3. COMPOSIÇÃO E INFORMAÇÕES SOBRE OS INGREDIENTES

#### 3.1 Substâncias

Sinónimos	:	Tetrahydrosilvan Tetrahydro-2-methylfuran
Formula	:	C5H10O

Peso molecular : 86.13 g/mol  
 No. CAS : 96-47-9

Componente	Concentração
No. CAS 96-47-9 No. CE 202-507-4	<= 100 %

#### 4. MEDIDAS DE PRIMEIROS-SOCORROS

##### 4.1 Descrição das medidas de primeiros socorros

###### Recomendação geral

Consultar um médico. Mostrar esta ficha de segurança ao médico de serviço.

###### Em caso de inalação

Se for respirado, levar a pessoa para o ar fresco. Se não respirar, dar respiração artificial. Consultar um médico.

###### Em caso de contacto com a pele

Lavar com sabão e muita água. Consultar um médico.

###### Se entrar em contacto com os olhos

Lavar cuidadosamente com muita água, durante pelo menos quinze minutos, e consultar o médico.

###### Em caso de ingestão

NÃO provoca vômito. Nunca dar nada pela boca a uma pessoa inconsciente. Enxaguar a boca com água. Consultar um médico.

#### 4.2 Sintomas e efeitos mais importantes, tanto agudos como retardados

Até onde sabemos, as propriedades químicas, físicas e toxicológicas não foram minuciosamente investigadas.

#### 4.3 Indicações sobre cuidados médicos urgentes e tratamentos especiais necessários

Dados não disponíveis

---

#### 5. MEDIDAS DE COMBATE A INCÊNDIO

##### 5.1 Meios de extinção

###### Meios adequados de extinção

Utilizar água pulverizada, espuma resistente ao álcool, produto químico seco ou dióxido de carbono.

##### 5.2 Perigos especiais decorrentes da substância ou mistura

Dados não disponíveis

##### 5.3 Recomendações para o pessoal de combate a incêndios

Usar equipamento de respiração autónomo para combate a incêndios, se necessário.

##### 5.4 Informações adicionais

Os jatos de água podem ser utilizados para arrefecer os contentores fechados.

---

## **6. MEDIDAS DE CONTROLE PARA DERRAMAMENTO OU VAZAMENTO**

### **6.1 Precauções individuais, equipamento de proteção e procedimentos de emergência**

Usar equipamento de proteção individual. Evitar a respiração do vapor/névoa/gas. Assegurar ventilação adequada. Cortar todas as fontes de ignição. Evacuar o pessoal para áreas de segurança. Atenção com a acumulação de vapores que pode formar concentrações explosivas. Os vapores podem-se acumular nas áreas baixas.

### **6.2 Precauções a nível ambiental**

Prevenir dispersão ou derramamento, se seguro. Não permitir a entrada do produto no sistema de esgotos.

### **6.3 Métodos e materiais de confinamento e limpeza**

Controlar e recuperar o líquido derramado com aspirador protegido electricamente ou varrer a seco e por o líquido dentro de contentores para a eliminação de acordo com as regulações locais (ver secção 13).

### **6.4 Remissão para outras secções**

Para eliminação de resíduos ver secção 13.

---

## **7. MANUSEIO E ARMAZENAMENTO**

### **7.1 Precauções para um manuseamento seguro**

Evitar o contacto com a pele e os olhos. Evitar a inalação do vapor ou da névoa. Manter afastado de qualquer chama ou fonte de ignição - Não fumar. Tome medidas para impedir a formação de electricidade estática.

### **7.2 Condições de armazenagem segura, incluindo eventuais incompatibilidades**

Armazenar em local fresco. Guardar o recipiente herméticamente fechado em lugar seco e bem ventilado. Os contentores abertos devem ser cuidadosamente fechados de novo e têm que ficar direitos para evitar a dispersão.

### **7.3 Utilização(ões) final(is) específica(s)**

Dados não disponíveis

---

## **8. CONTROLE DE EXPOSIÇÃO E PROTEÇÃO INDIVIDUAL**

### **8.1 Parâmetros de controlo**

#### **Límites de exposição ocupacional**

Não contém substâncias com valores limites de exposição profissional.

### **8.2 Controlo da exposição**

#### **Controlos técnicos adequados**

Manusear de acordo com as boas práticas industriais de higiene e segurança. Lavar as mãos antes dos intervalos e no final do dia de trabalho.

#### **Proteção individual**

##### **Protecção ocular/ facial**

Óculos de segurança bem ajustados. Proteção da face (mínimo de 8 polegadas (20 cm)). Use equipamento de proteção ocular testado e aprovado de acordo com as normas governamentais adequadas, tais como NIOSH (US) ou EN 166 (EU).

##### **Protecção da pele**

Manusear com luvas. As luvas devem ser inspecionadas antes da utilização. Use uma técnica adequada para a remoção das luvas (sem tocar a superfície exterior da luva) para evitar o contacto da pele com o produto. Descarte as luvas contaminadas após o uso, em conformidade com as leis e boas práticas de laboratório . Lavar e secar as mãos.

As luvas de protecção seleccionadas devem satisfazer as especificações da Directiva da UE 89/689/CEE e a norma EN 374 derivada dela.

Contacto com salpicos

Material: Borracha de nitrilo

espessura mínima da capa: 0.4

mm

Pausa através do tempo: 10 min

Material ensaiado:Camatril® (KCL 730 / Aldrich Z677442, Tamanho M)

fonte de dados: KCL GmbH, D-36124 Eichenzell, Telefone +49 (0)6659 87300, e-mail sales@kcl.de, Método de ensaio: EN374

Se for utilizado em solução, ou misturado com outras substâncias, e sob condições que diferem da EN 374, contactar o fornecedor de luvas da CE. Esta recomendação é apenas desejável e deve ser avaliada por um responsável de segurança e higiene industrial familiarizado com a situação específica de utilização pretendida pelos nossos clientes. Não deve ser interpretado como uma oferta de aprovação para qualquer cenário de uso específico

### **Protecção do corpo**

Fato completo de protecção para produtos químicos, Tecido protector anti-estático retardador de chama., O tipo de equipamento de protecção deve ser escolhido de acordo com a concentração e a quantidade da substância perigosa no local de trabalho.

### **Protecção respiratória**

Nos casos em que a avaliação de risco mostrar que os respiradores purificadores do ar são apropriados, use um respirador de cobertura facial total com cartuchos de combinação multiobjectivos (E.U.A.) ou do tipo ABEK (EN 14387) como apoio a controlos de engenharia. Se o respirador for o único meio de protecção, usa um respirador de ar de cobertura facial total. Use respiradores e componentes testados e aprovados por normas governamentais apropriadas, tais como as NIOSH (E.U.A.) ou CEN (UE).

## **9. PROPRIEDADES FÍSICAS E QUÍMICAS**

### **9.1 Informações sobre propriedades físicas e químicas de base**

- a) Aspetto Forma: líquido  
Cor: incolor
- b) Odor Dados não disponíveis
- c) Limite de Odor Dados não disponíveis
  - d) pH Dados não disponíveis
  - e) Ponto de fusão/ponto de congelação: < -20 °C a 1,013 hPa - Directrizes do de congelamento Teste OECD 102
  - f) Ponto de ebulição inicial 78 - 80 °C e intervalo de ebulição
  - g) Ponto de fulgor -10.0 °C - câmara fechada
  - h) Taxa de evaporação Dados não disponíveis
  - i) Inflamabilidade (sólido, Dados não disponíveis gás)
  - j) Limites de Limite superior de explosão: 5.7 %(V) inflamabilidade superior Limite inferior de explosão: 1.2 %(V)  
/ inferior ou explosividade
  - k) Pressão de vapor Dados não disponíveis
  - l) Densidade de vapor Dados não disponíveis
  - m) Densidade relativa Dados não disponíveis
  - n) Hidrossolubilidade 140 g/l - solúvel

- o) Coeficiente de partição log Pow: 1.260 n-octanol/água
- p) Temperatura de auto- 260 °C a 995 - 1,009 hPa ignição
- q) Temperatura de Dados não disponíveis decomposição
- r) Viscosidade 0.576 mm<sup>2</sup>/s a 20 °C -

## **10. ESTABILIDADE E REATIVIDADE**

### **10.1 Reatividade**

Dados não disponíveis

### **10.2 Estabilidade química**

Dados não disponíveis

Contem o(s) estabilizadore(s) seguintes:

BHT (0.025 %)

### **10.3 Possibilidade de reações perigosas** Dados não disponíveis

### **10.4 Condições a evitar** Calor, chamas e faíscas.

### **10.5 Materiais incompatíveis**

Agentes oxidantes fortes, Bases fortes, Ácidos fortes

### **10.6 Produtos de decomposição perigosos**

Produtos perigosos de decomposição formados durante os incêndios. - Óxidos de carbono

Outros produtos de decomposição perigosos - Dados não disponíveis

## **11. INFORMAÇÕES TOXICOLÓGICAS**

### **11.1 Informações sobre os efeitos toxicológicos**

#### **Toxicidade aguda**

DL50 Oral - Ratazana - fêmea - > 300 mg/kg

CL50 Inalação - Ratazana - 4 h - 6000 ppm

DL50 Dérmico - Ratazana - macho e fêmea - > 2,000 mg/kg

#### **Corrosão/irritação cutânea**

Pele - ensaios in vitro - Irritante para a pele. - Directrizes do Teste OECD 431

#### **Lesões oculares graves/irritação ocular**

Olhos - Estudos in vitro - Risco de lesões oculares graves. - Directrizes do Teste OECD 437

#### **Sensibilização respiratória ou cutânea** ensaios in vivo - Rato - Directrizes do Teste OECD

429 - Não provoca sensibilização em animais de laboratório.

#### **Mutagenicidade em células germinativas**

Genotoxicidade in vitro - teste de mutação de Reversão - S. typhimurium - com ou sem activação metabólica - negativo

#### **Carcinogenicidade**

IARC: Nenhum componente deste produto presente a níveis maiores ou iguais a 0.1% é identificado como carcinogénio provável, possível ou confirmado pelo IARC.

#### **Toxicidade à reprodução e lactação**

Dados não disponíveis

#### **Toxicidade sistêmica para órgãos-alvo específicos - exposição única**

Dados não disponíveis

**Toxicidade sistêmica para órgãos-alvo específicos - exposição repetida** Dados não disponíveis

**Perigo de aspiração**

Dados não disponíveis

**Possíveis danos para a saúde**

<b>Inalação</b>	Pode ser perigoso se for inalação. Causa uma irritação no aparelho respiratório.
-----------------	--

<b>Ingestão</b>	Nocivo por ingestão.
-----------------	----------------------

<b>Pele</b>	Pode ser perigoso se for absorção pela pele. Causa uma irritação da pele.
-------------	---

<b>Olhos</b>	Causa queimaduras nos olhos.
--------------	------------------------------

**Sinais e sintomas de exposição**

Até onde sabemos, as propriedades químicas, físicas e toxicológicas não foram minuciosamente investigadas.

**Informação adicional**

RTECS: LU2800000

## 12. INFORMAÇÕES ECOLÓGICAS

### 12.1 Ecotoxicidade

Toxicidade em peixes      Ensaio semiestático CL50 - *Oncorhynchus mykiss* (truta arco-íris) - > 100 mg/l - 96 h  
Método: Directrizes do Teste OECD 203

Toxicidade em dáfnias e Ensaio semiestático CE50 - *Daphnia magna* - > 139 mg/l - 48 h  
outros invertebrados      Método: OECD TG 202  
aquáticos

Toxicidade em algas      Ensaio estático CL50 - *Desmodesmus subspicatus*  
(*Scenedesmus subspicatus*) - > 104 mg/l - 72 h Método:  
OECD TG 201

### 12.2 Persistência e degradabilidade

Biodegradabilidade      aeróbio - Duração da exposição 28 d  
Método: Directrizes do Teste OECD 301D

### 12.3 Potencial biocumulativo

Dados não disponíveis

### 12.4 Mobilidade no solo

Dados não disponíveis

### 12.5 Resultados da avaliação PBT e mPmB

Dados não disponíveis

### 12.6 Outros efeitos adversos

Dados não disponíveis

---

## 13. CONSIDERAÇÕES SOBRE TRATAMENTO E DISPOSIÇÃO

### 13.1 Métodos de tratamento de resíduos

#### Produto

Queimar em um incinerador químico equipado com pós-combustor e purificador de gases, mas tomar precauções adicionais ao colocar esse material em ignição, visto que é altamente inflamável. Propor a entrega de soluções excedentes e não recicláveis a uma empresa idónea de tratamento de resíduos.

#### Embalagens contaminadas

Eliminar como produto Não utilizado.

---

## 14. INFORMAÇÕES SOBRE TRANSPORTE

### 14.1 Número ONU

ADR/RID: 2536	DOT (US): 2536	IMDG: 2536	IATA: 2536	ANTT: 2536
---------------	----------------	------------	------------	------------

### 14.2 Designação oficial de transporte da ONU

ADR/RID: METILTETRAHIDROFURANO	DOT (US): Methyltetrahydrofuran	IMDG: METHYLtetrahydrofuran
IMDG:		
IATA:	Methyltetrahydrofuran	
ANTT:	METILTETRA-HIDROFURANO	

### 14.3 Classes de perigo para efeitos de transporte

ADR/RID: 3	DOT (US): 3	IMDG: 3	IATA: 3	ANTT: 3
------------	-------------	---------	---------	---------

### 14.4 Grupo de embalagem

ADR/RID: II	DOT (US): II	IMDG: II	IATA: II	ANTT: II
-------------	--------------	----------	----------	----------

### 14.5 Perigos para o ambiente

ADR/RID: não	DOT (US): não	IMDG Poluente marinho: não	IATA: não
--------------	---------------	----------------------------	-----------

### 14.6 Precauções especiais para o utilizador

Dados não disponíveis

### 14.7 Numero De Risco 33

---

## 15. REGULAMENTAÇÕES

### 15.1 Regulamentação/legislação específica para a substância ou mistura em matéria de saúde, segurança e ambiente

Esta Ficha de Informações de Produtos Químicos foi preparada de acordo com a NBR 14725-4/2014 da ABNT (Associação Brasileira de Normas Técnicas)

---

## 16. OUTRAS INFORMAÇÕES

#### Informações adicionais

Direitos exclusivos, 2016, da Sigma-Aldrich Co. LLC. Permissão concedida para fazer número ilimitado de cópias em papel, somente para uso interno.

Acredita-se que as informações acima estejam correctas, embora não pretendam ser totalmente abrangentes, devendo ser usadas apenas como um guia. A informação contida neste documento esta baseada no presente estado do nosso conhecimento e é aplicável ás precauções de segurança apropriadas para o produto. Não representa nenhuma garantia das propriedades do produto. A Corporação Sigma-Aldrich e as suas companhias afiliadas, não responderão por nenhum dano resultante do manuseio ou do contato com o produto acima. Consultar [www.sigma-aldrich.com](http://www.sigma-aldrich.com) e/ou o verso da factura ou nota que acompanha o produto para tomar conhecimento dos termos adicionais e condições de venda.

---

**SIGMA-ALDRICH**[sigma-aldrich.com](http://sigma-aldrich.com)**FICHA DE INFORMAÇÕES DE SEGURANÇA DE PRODUTOS  
QUÍMICOS**

Versão 5.1

Data de revisão 29.06.2017

Data de impressão 14.10.2019

**1. IDENTIFICAÇÃO DO PRODUTO E DA EMPRESA****1.1 Identificadores do produto**

Nome do produto : Cyclopentyl methyl ether

Referência do Produto : 675970

Marca : Sigma-Aldrich

**1.2 Outros meios de identificação CPME****1.3 Utilizações identificadas relevantes da substância ou mistura e utilizações desaconselhadas** Só para utilização R&D. Não para utilização farmacêutica, doméstica ou outras utilizações.**1.4 Identificação do fornecedor da ficha de dados de segurança**Companhia : Sigma-Aldrich Brasil Ltda.  
Rua Torre Eiffel, 100, galpão 2 Parque Rincão  
06705-481 COTIA - SP  
BRAZIL

Telefone : +55 11 2170 8484

Número de Fax : +55 11 4191 2586

Email endereço : sigmabr@sial.com

**1.5 Número de telefone de emergência**

0800-707-7022 / 0800 17 2020

**2. IDENTIFICAÇÃO DE PERIGOS****2.1 Classificação GHS**

Líquidos inflamáveis (Categoria 2)

Toxicidade aguda, Oral (Categoria 4)

Toxicidade aguda, Dérmico (Categoria 5)

Irritação cutânea (Categoria 2)

Irritação ocular (Categoria 2A)

Toxicidade aguda para o ambiente aquático (Categoria 3)

Toxicidade crônica para o ambiente aquático (Categoria 3)

## Elementos da Etiqueta GHS, incluindo declarações de prevenção Pictograma

Frases de Precaução



Palavra de advertência Perigo

Frases de Perigo

H225	Líquido e vapor facilmente inflamáveis.
H302	Nocivo por ingestão.
H313	Pode ser perigoso com o contacto com a pele.
H315	Provoca irritação cutânea.
H319	Provoca irritação ocular grave.
H412	Nocivo para os organismos aquáticos com efeitos duradouros.

Prevenção

P210 Manter afastado do calor/faísca/chama aberta/ superfícies quentes. Não fumar.

P233 Manter o recipiente bem fechado.

P273 Evitar a libertação para o ambiente.

P280 Usar luvas de protecção/ protecção ocular/ protecção facial.

Resposta

P303 + P361 + P353 SE ENTRAR EM CONTACTO COM A PELE (ou o cabelo): retirar imediatamente toda a roupa contaminada. Enxaguar a pele com água/tomar um duche.

P312 Caso sinta indisposição, contacte um CENTRO DE INFORMAÇÃO ANTIVENENOS/médico.

P337 + P313 Caso a irritação ocular persista: consulte um médico.

P370 + P378 Em caso de incêndio: para extinguir utilizar areia seca, um produto químico seco ou espuma resistente ao álcool.

Armazenagem

P403 + P235 Armazenar em local bem ventilado. Conservar em ambiente fresco.

Destruição

P501 Eliminar o conteúdo/ recipiente em instalação aprovada de destruição de resíduos.

## 2.2 Outros Perigos - nenhum(a)

### 3. COMPOSIÇÃO E INFORMAÇÕES SOBRE OS INGREDIENTES

#### 3.1 Substâncias

Sinónimos : CPME

Formula : C6H12O

Peso molecular : 100.16 g/mol

No. CAS : 5614-37-9

Componente	Concentração
No. CAS	<= 100 %

---

## **4. MEDIDAS DE PRIMEIROS-SOCORROS**

### **4.1 Descrição das medidas de primeiros socorros**

#### **Recomendação geral**

Consultar um médico. Mostrar esta ficha de segurança ao médico de serviço.

#### **Em caso de inalação**

Se for respirado, levar a pessoa para o ar fresco. Se não respirar, dar respiração artificial. Consultar um médico.

#### **Em caso de contacto com a pele**

Lavar com sabão e muita água. Consultar um médico.

#### **Se entrar em contacto com os olhos**

Lavar cuidadosamente com muita água, durante pelo menos quinze minutos, e consultar o médico.

#### **Em caso de ingestão**

NÃO provoca vômito. Nunca dar nada pela boca a uma pessoa inconsciente. Enxaguar a boca com água. Consultar um médico.

### **4.2 Sintomas e efeitos mais importantes, tanto agudos como retardados**

A inalação prolongada ou repetida pode provocar:, descarga nasal, congestão de:, nariz

### **4.3 Indicações sobre cuidados médicos urgentes e tratamentos especiais necessários**

Dados não disponíveis

---

## **5. MEDIDAS DE COMBATE A INCÊNDIO**

### **5.1 Meios de extinção**

#### **Meios adequados de extinção**

Pó seco Areia seca

#### **Meios inadequados de extinção**

NÃO UTILIZAR jactos de água.

### **5.2 Perigos especiais decorrentes da substância ou mistura**

Dados não disponíveis

### **5.3 Recomendações para o pessoal de combate a incêndios**

Usar equipamento de respiração autónomo para combate a incêndios, se necessário.

### **5.4 Informações adicionais**

Os jatos de água podem ser utilizados para arrefecer os contentores fechados.

---

## **6. MEDIDAS DE CONTROLE PARA DERRAMAMENTO OU VAZAMENTO**

### **6.1 Precauções individuais, equipamento de proteção e procedimentos de emergência**

Usar equipamento de proteção individual. Evitar a respiração do vapor/névoa/gas. Assegurar ventilação adequada. Cortar todas as fontes de ignição. Evacuar o pessoal para áreas de segurança. Atenção com a acumulação de vapores que pode formar concentrações explosivas. Os vapores podem-se acumular nas áreas baixas.

### **6.2 Precauções a nível ambiental**

Prevenir dispersão ou derramamento, se seguro. Não permitir a entrada do produto no sistema de esgotos. A descarga no meio ambiente deve ser evitada.

### **6.3 Métodos e materiais de confinamento e limpeza**

Controlar e recuperar o líquido derramado com um produto absorvente não combustível, (por exemplo areia, terra, terra diatomácea, vermiculite) e pôr o líquido dentro de contentores para eliminação de acordo com os regulamentos locais / nacionais (ver secção 13).

## **6.4 Remissão para outras secções**

Para eliminação de resíduos ver secção 13.

---

## **7. MANUSEIO E ARMAZENAMENTO**

### **7.1 Precauções para um manuseamento seguro**

Evitar o contacto com a pele e os olhos. Evitar a inalação do vapor ou da névoa.

Manter afastado de qualquer chama ou fonte de ignição - Não fumar. Tome medidas para impedir a formação de electricidade estática.

### **7.2 Condições de armazenagem segura, incluindo eventuais incompatibilidades**

Guardar o recipiente herméticamente fechado em lugar seco e bem ventilado. Os contentores abertos devem ser cuidadosamente fechados de novo e têm que ficar direitos para evitar a dispersão.

Sensível ao ar e à luz. Manipular e estocar sob gás inerte.

### **7.3 Utilização(ões) final(is) específica(s)**

Dados não disponíveis

---

## **8. CONTROLE DE EXPOSIÇÃO E PROTEÇÃO INDIVIDUAL**

### **8.1 Parâmetros de controlo**

#### **Límites de exposição ocupacional**

Não contém substâncias com valores limites de exposição profissional.

### **8.2 Controlo da exposição**

#### **Controlos técnicos adequados**

Manusear de acordo com as boas práticas industriais de higiene e segurança. Lavar as mãos antes dos intervalos e no final do dia de trabalho.

#### **Proteção individual**

##### **Protecção ocular/ facial**

Máscaras de protecção e óculos de segurança. Use equipamento de protecção ocular testado e aprovado de acordo com as normas governamentais adequadas, tais como NIOSH (US) ou EN 166 (EU).

##### **Protecção da pele**

Manusear com luvas. As luvas devem ser inspeccionadas antes da utilização. Use uma técnica adequada para a remoção das luvas (sem tocar a superfície exterior da luva) para evitar o contacto da pele com o produto. Descarte as luvas contaminadas após o uso, em conformidade com as leis e boas práticas de laboratório. Lavar e secar as mãos.

As luvas de protecção seleccionadas devem satisfazer as especificações da Directiva da UE 89/689/CEE e a norma EN 374 derivada dela.

##### **Protecção do corpo**

Fato completo de protecção para produtos químicos, Tecido protector anti-estático retardador de chama., O tipo de equipamento de protecção deve ser escolhido de acordo com a concentração e a quantidade da substância perigosa no local de trabalho.

##### **Protecção respiratória**

Nos casos em que a avaliação de risco mostrar que os respiradores purificadores do ar são apropriados, use um respirador de cobertura facial total com cartuchos de combinação multiobjectivos (E.U.A.) ou do tipo ABEK (EN 14387) como apoio a controlos de engenharia. Se o respirador for o único meio de protecção, usa um respirador de ar de cobertura facial total. Use respiradores e componentes testados e aprovados por normas governamentais apropriadas, tais como as NIOSH (E.U.A.) ou CEN (UE).

---

## **9. PROPRIEDADES FÍSICAS E QUÍMICAS**

## **9.1 Informações sobre propriedades físicas e químicas de base**

- a) Aspetto      Forma: claro, líquido  
Cor: incolor
- b) Odor      Dados não disponíveis
- c) Limite de Odor      Dados não disponíveis
- d) pH      Dados não disponíveis
- e) Ponto de fusão/ponto      Ponto/intervalo de fusão: -140 °C de congelamento
- f) Ponto de ebulação inicial 106 °C a 1,013 hPa e intervalo de ebulação
- g) Ponto de fulgor      -1 °C - câmara fechada
- h) Taxa de evaporação      Dados não disponíveis
- i) Inflamabilidade (sólido,      Dados não disponíveis gás)
- j) Limites de Limite superior de explosão: 9.9 %(V) inflamabilidade superior Limite inferior de explosão: 1.1 %(V)  
/ inferior ou  
explosividade
- k) Pressão de vapor 59.9 hPa a 25 °C
- l) Densidade de vapor      3.46 - (Ar = 1.0)
- m) Densidade relativa 0.86 g/cm<sup>3</sup> a 25 °C
- n) Hidrossolubilidade Dados não disponíveis
- o) Coeficiente de partição      log Pow: 1.59 a 20 °C n-octanol/água
- p) Temperatura de auto-      Dados não disponíveis ignição
- q) Temperatura de      Dados não disponíveis decomposição
- r) Viscosidade      Dados não disponíveis

---

## **10. ESTABILIDADE E REATIVIDADE**

### **10.1 Reatividade**

Dados não disponíveis

### **10.2 Estabilidade química**

Dados não disponíveis

Contem o(s) estabilizadore(s) seguintes:

BHT (50 ppm)

### **10.3 Possibilidade de reações perigosas** Dados não disponíveis

### **10.4 Condições a evitar** Calor, chamas e faíscas.

### **10.5 Materiais incompatíveis**

Oxidantes, ácidos, Ácido nítrico, Peróxido de hidrogênio, Hidrazina

### **10.6 Produtos de decomposição perigosos**

Produtos perigosos de decomposição formados durante os incêndios. - Óxidos de carbono

Outros produtos de decomposição perigosos - Dados não disponíveis

---

## **11. INFORMAÇÕES TOXICOLÓGICAS**

### **11.1 Informações sobre os efeitos toxicológicos**

#### **Toxicidade aguda**

DL50 Oral - Ratazana - 1,000 - 2,000 mg/kg

CL50 Inalação - Ratazana - 4 h - > 21.5 mg/l

DL50 Dérmico - Ratazana - > 2,000 mg/kg

**Corrosão/irritação cutânea**

Dados não disponíveis

**Lesões oculares graves/irritação ocular**

Dados não disponíveis

**Sensibilização respiratória ou cutânea**

Dados não disponíveis

**Mutagenicidade em células germinativas**

Dados não disponíveis

**Carcinogenicidade**

IARC: Nenhum componente deste produto presente a níveis maiores ou iguais a 0.1% é identificado como carcinogénio provável, possível ou confirmado pelo IARC.

**Toxicidade à reprodução e lactação**

Dados não disponíveis

**Toxicidade sistêmica para órgãos-alvo específicos - exposição única**

Dados não disponíveis

**Toxicidade sistêmica para órgãos-alvo específicos - exposição repetida** Dados não disponíveis

**Perigo de aspiração**

Dados não disponíveis

**Possíveis danos para a saúde**

**Inalação** Pode ser perigoso se for inalação. Causa uma irritação no aparelho respiratório.

**Ingestão** Nocivo por ingestão.

**Pele** Pode ser perigoso se for absorto pela pele. Causa uma irritação da pele.

**Olhos** Provoca irritação ocular grave.

**Sinais e sintomas de exposição**

A inalação prolongada ou repetida pode provocar:, descarga nasal, congestão de:, nariz

**Informação adicional**

RTECS: Dados não disponíveis

---

## 12. INFORMAÇÕES ECOLÓGICAS

### 12.1 Ecotoxicidade

Toxicidade em peixes Ensaio semiestático CL0 - *Oncorhynchus mykiss* (truta arco-íris) - > 220 mg/l - 96 h  
Método: Directrizes do Teste OECD 203

NOEC - *Oncorhynchus mykiss* (truta arco-íris) - 220 mg/l - 96 h  
Método: Directrizes do Teste OECD 203

Toxicidade em dáfniias e Ensaio estático CE50 - *Daphnia magna* - 35 mg/l - 48 h  
outros invertebrados Método: OECD TG 202  
aquáticos

Ensaio estático NOEC - *Daphnia magna* - 20 mg/l - 48 h  
Método: OECD TG 202

Toxicidade em algas	Ensaio estático CE50r - <i>Pseudokirchneriella subcapitata</i> (alga verde) - > 100 mg/l - 72 h Método: OECD TG 201
	Ensaio estático NOEC - <i>Pseudokirchneriella subcapitata</i> (alga verde) - 2.2 mg/l - 72 h Método: OECD TG 201
<b>12.2 Persistência e degradabilidade</b>	Dados não disponíveis
<b>12.3 Potencial biocumulativo</b>	Dados não disponíveis
<b>12.4 Mobilidade no solo</b>	Dados não disponíveis
<b>12.5 Resultados da avaliação PBT e mPmB</b>	Dados não disponíveis
<b>12.6 Outros efeitos adversos</b>	Nocivo para os organismos aquáticos com efeitos duradouros. Dados não disponíveis

## 13. CONSIDERAÇÕES SOBRE TRATAMENTO E DISPOSIÇÃO

### 13.1 Métodos de tratamento de resíduos

#### Produto

Queimar em um incinerador químico equipado com pós-combustor e purificador de gases, mas tomar precauções adicionais ao colocar esse material em ignição, visto que é altamente inflamável. Deve ser eliminado como resíduo perigoso de acordo com a legislação local. O tratamento e a disposição devem ser avaliados especificamente para cada produto. Devem ser consultadas legislações federais, estaduais e municipais. Manter restos de produto em suas embalagens originais e devidamente fechadas. O descarte deve ser realizado conforme o estabelecido para o produto.

#### Embalagens contaminadas

Não reutilize embalagens vazias. Estas podem conter restos do produto e devem ser mantidas fechadas e encaminhadas para descarte apropriado conforme estabelecido para o produto.

---

## 14. INFORMAÇÕES SOBRE TRANSPORTE

### 14.1 Número ONU

ADR/RID: 3271      DOT (US): 3271      IMDG: 3271      IATA: 3271      ANTT: 3271

### 14.2 Designação oficial de transporte da ONU

ADR/RID: ÉTERES, N.S.A. (Cyclopentyl methyl ether) DOT (US): Ethers, n.o.s.  
IMDG: ETERS, N.O.S. (Cyclopentyl methyl ether)  
IATA: Ethers, n.o.s. (Cyclopentyl methyl ether)  
ANTT: ÉTERES, N.E. (Cyclopentyl methyl ether)

### 14.3 Classes de perigo para efeitos de transporte

ADR/RID: 3      DOT (US): 3      IMDG: 3      IATA: 3      ANTT: 3

### 14.4 Grupo de embalagem

ADR/RID: II      DOT (US): II      IMDG: II      IATA: II      ANTT: II

### 14.5 Perigos para o ambiente

ADR/RID: não      DOT (US): não      IMDG Poluent<sub>3</sub> marinho: não      IATA: não

#### **14.6 Precauções especiais para o utilizador**

Dados não disponíveis

#### **14.7 Número De Risco 33**

---

### **15. REGULAMENTAÇÕES**

#### **15.1 Regulamentação/legislação específica para a substância ou mistura em matéria de saúde, segurança e ambiente**

Esta Ficha de Informações de Produtos Químicos foi preparada de acordo com a NBR 14725-4/2014 da ABNT (Associação Brasileira de Normas Técnicas)

---

### **16. OUTRAS INFORMAÇÕES**

#### **Informações adicionais**

Direitos exclusivos, 2016, da Sigma-Aldrich Co. LLC. Permissão concedida para fazer número ilimitado de cópias em papel, somente para uso interno.

Acredita-se que as informações acima estejam correctas, embora não pretendam ser totalmente abrangentes, devendo ser usadas apenas como um guia. A informação contida neste documento esta baseada no presente estado do nosso conhecimento e é aplicável ás precauções de segurança apropriadas para o produto. Não representa nenhuma garantia das propriedades do produto. A Corporação Sigma-Aldrich e as suas companhias afiliadas, não responderão por nenhum dano resultante do manuseio ou do contato com o produto acima. Consultar [www.sigma-aldrich.com](http://www.sigma-aldrich.com) e/ou o verso da factura ou nota que acompanha o produto para tomar conhecimento dos termos adicionais e condições de venda.

---