

RESUMO - CIÊNCIAS EXATAS E DA TERRA - FÍSICA

**ESTRUTURAÇÃO DOS COMPOSTOS DE CÉLULAS FOTOVOLTAICAS  
ORGÂNICAS USANDO DINÂMICA MOLECULAR**

*Luiz Felipe Das Dores Rocha (feliipe.rocha00@gmail.com)*

*Lucas Modesto (lucmod@ufrj.br)*

O crescimento da demanda energética mundial e a necessidade de reduzir emissões de gases de efeito estufa impulsionam a busca por tecnologias limpas, renováveis e economicamente viáveis. Das alternativas, células fotovoltaicas orgânicas (OPVs), vêm se consolidando como uma das mais promissoras. Diferentemente das tradicionais células de silício, OPVs apresentam vantagens como baixo custo de produção, fabricação por técnicas de impressão em larga escala, aplicabilidade em superfícies variadas, incluindo substratos leves, parcialmente transparente e flexíveis. Essa combinação abre caminho para dispositivos portáteis, painéis integrados a roupas, janelas fotovoltaicas e outras aplicações inovadoras. No entanto, a eficiência e a estabilidade ainda são desafios para a ampla adoção dessa tecnologia, tornando necessária a compreensão das propriedades estruturais e eletrônicas dos materiais envolvidos.

As OPVs baseiam-se tipicamente em uma arquitetura bulk heterojunction formada pela mistura de materiais doadores e aceitadores de elétrons. Neste trabalho, investigamos misturas de moléculas derivadas de PTB (polímero doador) e PCBM (derivado de fulereno, aceitador), uma das combinações mais

estudadas na literatura devido à boa estabilidade e desempenho fotovoltaico. A organização molecular e interações entre moléculas doadoras e aceitadoras afetam diretamente a eficiência de separação e transporte de cargas, sendo, portanto, fatores determinantes para o desempenho final da OPVs.

Para entender os efeitos estruturais e ambientais, empregou-se uma abordagem híbrida combinando Dinâmica Molecular (DM) e cálculos de estrutura eletrônica. A DM, realizada com o pacote GROMACS, permite simular o movimento das moléculas ao longo do tempo, incorporando efeitos térmicos, flutuações conformacionais e interações intermoleculares em escala atômica. Essa etapa é importante para gerar geometrias realistas que representem o comportamento do material em condições experimentais, evitando a limitação de modelos puramente estáticos. Diferentes cenários foram analisados, incluindo fase gasosa e solvente de acetonitrila, para avaliar a influência do ambiente sobre a estabilidade e as propriedades eletrônicas do sistema.

A partir das geometrias extraídas das simulações de DM, realizamos cálculos de mecânica quântica semi-empírica utilizando o método xTB (extended Tight-Binding). O xTB oferece um equilíbrio entre precisão e custo computacional, permitindo o tratamento de sistemas moleculares grandes, como os agregados PTB:PCBM. Entre as propriedades avaliadas, destacam-se o gap HOMO-LUMO, a afinidade eletrônica ( $\Delta EA$ ) e o potencial de ionização ( $\Delta IP$ ), grandezas fundamentais para prever a eficiência fotovoltaica.

O gap HOMO-LUMO determina a energia mínima necessária para excitar um elétron da banda de valência para a banda de condução, ou seja, está diretamente relacionada à absorção de luz e à geração de pares elétron-buraco. Um gap menor facilita a absorção de fótons de menor energia, ampliando a faixa do espectro solar aproveitada, mas gaps excessivamente pequenos podem comprometer a estabilidade química. Assim, o controle do gap é um equilíbrio crítico entre eficiência de absorção e estabilidade operacional.

Os resultados obtidos mostram que a presença de solvente usando modelo polarizável (PCM) tendem a reduzir o gap HOMO-LUMO em comparação à fase gasosa, mostrando o efeito estabilizador do ambiente sobre os orbitais fronteira. Essa redução indica maior facilidade de excitação eletrônica, o que pode potencializar a eficiência da absorção de luz. As análises estatísticas confirmam ainda que diferentes arranjos dos polímeros, como empilhados ou aleatórios, impactam significativamente os valores do gap, revelando a sensibilidade da resposta eletrônica à organização espacial.

Os resultados reforçam que a combinação da Dinâmica Molecular para obtenção de geometrias realistas e cálculos de estrutura eletrônica via xTB constitui uma estratégia poderosa para compreender e prever o desempenho de sistemas doadores/aceitadores em células fotovoltaicas orgânicas. Essa abordagem não apenas fornece valores quantitativos de propriedades críticas, mas também orienta o desenvolvimento de novos materiais com maior eficiência e estabilidade, contribuindo para o avanço de tecnologias de energia solar mais acessíveis e sustentáveis.

Palavras-chave: célula fotovoltaica orgânica ; dinâmica molecular ; gap; homolumo.