



SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL POR DFT E SÍNTESE DE TRISAZOLTRIARIL ELÉTRON-ACEITADOR PARA APLICAÇÃO EM DISPOSITIVOS FOTOVOLTAICOS

¹David F. C. da Silva (IC)*, ¹Larissa A. Martins (IC), ²Marco A. T. da Silva (PQ), ³Renato M. R. Viana (PQ)

davidfernando@alunos.utfpr.edu.br*; larissaadrielle@alunos.utfpr.edu.br, marcosilva@utfpr.edu.br, renatoviana@utfpr.edu.br

¹Graduando em Engenharia de Materiais, UTFPR - LD; ²Departamento de Física, UTFPR - LD, ³Departamento de Química, UTFPR - LD.

Palavras-chave: síntese trisazoltriaril elétron-aceitador, density Functional theory, DFT, dispositivos fotovoltaicos

HIGHLIGHTS

Computational Simulation by DFT and Synthesis of an Electron-Accepting Trisazoltriaril for Application in Photovoltaic Devices

Electron-accepting trisazoltriaril synthesized and characterized.

DFT predicts optical and electronic properties.

Results confirm suitability for photovoltaic devices.

RESUMO

A molécula Trisazoltriaril elétron-aceitador foi sintetizada, a fim de avaliar seu potencial para aplicação em dispositivos fotovoltaicos, especificamente na camada ativa. Paralelamente a síntese foi realizado cálculos computacionais por meio do método Density Functional Theory (DFT) visando obter a previsão dos resultados das propriedades eletrônicas, estruturais e ópticas da molécula. No presente trabalho, foram realizadas técnicas de caracterizações como espectroscopia de absorção na região do visível e ultravioleta (UV-Vis), fotoluminescência (PL), voltametria cíclica, aplicação do método de Tauc, espectroscopia de Raman e espectroscopia no infravermelho por transformada de Fourier (FTIR). Através dos espectros de Raman e FTIR quando comparado o experimental e computacional, é possível determinar os grupos funcionais ativos na molécula, sendo exemplo os grupos NO₂, CO, C=C e OH, assim demonstrando a eficácia da síntese. A molécula apresentou absorção entre 350 e 450 nm e estando levemente com desvio quando comparada ao resultado computacional, o máximo de PL está em 476 e 541 nm é satisfatória para aplicações em dispositivos fotovoltaicos. Para a obtenção do valor do band gap, foi aplicada a técnica de voltametria cíclica, resultando em 2,20 eV. Apresentando resultado do valor de band gap de acordo com os valores obtido computacionalmente por DFT, contendo apenas um pequeno desvio. Com base no estudo apresentado é demonstrado a eficácia da síntese do Trisazoltriaril elétron-aceitador, desta forma comprovando a possibilidade de aplicação em dispositivos fotovoltaicos devido às características da molécula.

AGRADECIMENTOS

Labmult-Id UTFPR, CAPES, CNPq, Fundação Araucária, Labspec UEL, UTFPR pela bolsa