

RESUMO - MODELAGEM DE MATERIAIS

ESTUDO COMPUTACIONAL DE POLIFULERENOS FUNCIONALIZADOS COM AGENTES QUELANTES PARA A ESTABILIZAÇÃO DE CÉLULAS SOLARES BASEADAS EM PEROVSKITA

Bruno Hori Barboza (bruno.hori@unesp.br)

Augusto Batagin Neto (a.batagin@unesp.br)

Células solares de perovskita (CSP) têm alcançado nos últimos anos uma alta eficiência a um custo de produção significativamente reduzido que, no entanto, apesar do excelente desempenho, a instabilidade desses dispositivos dificulta as aplicações em larga escala. Os principais desafios estão associados à exposição à umidade, oxigênio e luz ultravioleta, juntamente com a instabilidade estrutural destes materiais devido à migração de íons de sua estrutura para as camadas ativas e interfaces. Estudos recentes demonstram que os derivados de poli(fulerenos) (PF) são capazes de estabilizar o desempenho dos CSP e aprimorando tanto a eficiência quanto a estabilidade das células solares orgânicas devido à sua estabilidade química, boa processabilidade e propriedades ópticas e elétricas [1]. Além disso, foi relatado o potencial dos agentes quelantes (AQ) [2] para minimizar a taxa de degradação devido à migração de íons, considerando a potencial complexação e captura de íons metálicos durante a operação desses dispositivos. No entanto, são necessárias

mais pesquisas a fim de compreender os mecanismos relacionados à operação desses materiais em CSP e identificar candidatos adequados. Neste estudo, cálculos em DFT são usados para avaliar as propriedades dos derivados de PF e CA e analisar o potencial de interação entre os constituintes do CSP para identificar compostos ideais para a captura/retenção de íons CSP por meio de índices Fukui, análise de suavidade local, cálculos ópticos, estruturais e eletrônicos. Os resultados mostram o potencial dos grupos à base de carboxila não hidrogenados como relevantes para estabilizadores de íons Pb^{2+} e I^{-1} . Os derivados de PF têm LUMO e propriedades optoeletrônicas muito semelhantes às do PCBM, além disso, os grupos com óxido de etileno podem melhorar a aderência nas interfaces.

Referências: [1] Ma, S. et al. Energy Environ. Sci. 15, 13–55 (2022). Yin et al. [2] Girish, K. H. et al. Mater. Today Sustain. 17, 100090 (2022).

Palavras-chave: polifulereno; dispositivos fotovoltaicos; perovskita; teoria funcional da densidade; índices de fukui condensados aos átomos.