



ESTUDO DA FUNCIONALIZAÇÃO DO GRAFENO COM O PCTF-CHO PARA CÉLULAS SOLARES ORGÂNICAS

Gabriel Silva Santos¹, Luiz Henrique da Costa Oliveira ¹, Luis Alberto Terrazos Javier ²

+,

RESUMO

O Grafeno é um importante alótropo que desperta o interesse dos cientistas há anos devido as suas relevantes propriedades e suas características indispensáveis (seu formato plano, resistência, alta condutividade elétrica, etc), principalmente no campo tecnológico, como no desenvolvimento de placas solares. A molécula PCTF-CHO, esta constituida de três moléculas chamadas de carboxamida, thiadiazole e benzaldehyde, depois ligamos o PCFT-CHO na superfície do grafeno. Neste trabalho calculamos a energia de ligação do grafeno funcionalizado com o PCFT-CHO utilizando o programa Dmol3 que esta inserido na plataforma do materials studio. Obtivemos energia de ligação do PCTF – CHO (-983,02 eV), mostramos que todas as moléculas em estudo são estáveis porque tem uma energia de ligação negativa. O comprimento de ligação dos carbonos do PCTF-CHO e grafeno é de 1,740 Å e a energia de ligação do PCTF-CHO é de -2826.60 eV.

Palavras-chave: Grafeno, PCTF-CHO, Carboxamida, Thiadiazole, benzaldehyde

¹ Alunos de Informática, ECIT Jornalista José Itamar da Rocha Cândido Cuite, PB, e-mail: luizhenri.nf@gmail.com, gabrielsantos123nf@gmail.com

² Doutor, Professor, UAFM, UFCG, Cuite, PB, e-mail: ltterazo@ufcg.edu.br

Functionalization Study of Graphene with PCTF-CHO for Organic Solar Cells.

ABSTRACT

Graphene is an important allotrope that has sparked the interest of scientists for years due to its remarkable properties and indispensable characteristics, such as its flat structure, strength, high electrical conductivity, etc., especially in the field of technology, such as in the development of solar panels. The molecule PCTF-CHO is composed of three molecules called carboxamide, thiadiazole, and benzaldehyde, and we then bonded PCTF-CHO to the graphene surface. In this study, we calculated the binding energy of functionalized graphene with PCTF-CHO using the Dmol3 program, which is integrated into the Materials Studio platform.

We obtained a binding energy of -983.02 eV for PCTF-CHO, indicating that all the molecules under study are stable due to their negative binding energy. The carbon-carbon bond length between PCTF-CHO and graphene is 1.740 Å, and the binding energy of PCTF-CHO is -2826.60 eV.

Keywords: Graphene, PCTF-CHO, Carboxamide, Thiadiazole, benzaldehyde

