



O ESTUDO DA FUNCIONALIZAÇÃO DO PCBM PARA SEU USO NAS CELULAS SOLARES DA PEROVSKITA.

Maria Beatriz Moreira da Silva Costa¹ e Rebeca Ágatha Borges Macedo¹, Luis Alberto Terrazos Javier ²

RESUMO

O fulereno C₆₀ possui uma estrutura de um icosaedro truncado não regular com 32 faces, sendo 20 hexágonos e 12 pentágonos, e 30 ligações entre os carbonos. Neste trabalho, vimos a funcionalização do fullereno C₆₀ nas placas solares a base de perovskita. Neste trabalho, vimos a funcionalização do fullereno C₆₀ nas placas solares a base de perovskita e calculamos a estrutura eletrônica do fullereno C₆₀, do fenil e do PCBM, ambos utilizando o software CASTEP, o qual está inserido dentro da plataforma do materials estúdio. Esse trabalho teve o objetivo de calcular a energia de ligação do PCBM (44,9 eV) bem como as energia do homo-lumo do fullereno C₆₀ (1,765 eV), da molécula fenil (0,432 eV) e do PCBM (0,190 eV). Além disso, observamos que o PCBM pode ser facilmente excitado, graças a energia do Homo – Lumo.

Palavras chave: Fullereno, PCBM, Perovskita

¹Alunas do Instituto “O Pequeno Doutor”, Cuité, PB, e-mail: biamoreira1direct@gmail.com
macedorebeca648@gmail.com

²Doutor, Professor, UAFM, UFPG, Cuité, PB, e-mail: lterrazo@ufcg.edu.br

THE STUDY OF PCBM FUNCTIONALIZATION FOR ITS USE IN PEROVSKITE SOLAR CELLS.

ABSTRACT

C60 fullerene has the structure of a non-regular truncated icosahedron with 32 faces, 20 hexagons and 12 pentagons, and 30 bonds between carbons. In this work, we saw the functionalization of C60 fullerene in perovskite-based solar panels. In this work, we saw the functionalization of fullerene C60 on perovskite-based solar panels and calculated the electronic structure of fullerene C60, phenyl and PCBM, both using the CASTEP software, which is inserted within the materials studio platform. This work aimed to calculate the binding energy of PCBM (44.9 eV) as well as the homo-lumone energy of C60 fullerene (1, 765 eV), the phenyl molecule (0.432 eV) and PCBM (0.190 eV). Furthermore, we observed that the PCBM can be easily excited, thanks to the Homo – Lumo energy.

Keywords: Fullerene, PCBM, Perovskite

