
Título em Português: INVESTIGAÇÃO DAS PROPRIEDADES ESTRUTURAIS, ENERGÉTICAS E ÓPTICAS DAS PEROVSKITAS ABX3 UTILIZANDO A TEORIA DO FUNCIONAL DA DENSIDADE
Título em Inglês: investigation of the structural, energetic and optical properties of perovskitas abx3 using the functional density theory
Área de Pesquisa: Química Inorgânica
Palavras Chave: Perovskitas - DFT - Células Solares
Ag. Financiadora do Projeto: FUSP - Fundação Universidade de São Paulo
Projeto: Iniciação Científica
Unidade de Apresentação: Instituto de Química de São Carlos
Departamento:
Validado em: 30/09/2020

Autor:

Nome: Mariana Candido Gallego
Instituição: Universidade de São Paulo

Unidade:

Orientador:

Nome: Juarez Lopes Ferreira da Silva
Unidade: Instituto de Química de São Carlos

Instituição: Universidade de São Paulo

Colaborador:

Nome: Srikanth Malladi

Instituição: Instituto de Química de São Carlos

Colaborador:

Nome: Johnatan Mucelini

Instituição: Instituto de Química de São Carlos

Resumo do Trabalho em português:



INVESTIGAÇÃO DAS PROPRIEDADES ESTRUTURAIS, ENERGÉTICAS E ÓPTICAS DAS PEROVSKITAS ABX_3 UTILIZANDO A TEORIA DO FUNCIONAL DA DENSIDADE

Mariana Candido Gallego, Johnatan Mucelini, Srikanth Malladi, Juarez L. F. Da Silva

Instituto de Química de São Carlos, Universidade de São Paulo

mari.gallego@usp.br

Objetivos

Este trabalho tem por objetivo compreender o papel dos átomos A, B e X nas propriedades estruturais, eletrônicas e energéticas das perovskitas cúbicas ABX_3 . Para isso, estudou-se as seguintes propriedades: parâmetro de rede (a_0), distâncias de ligação (d^{A-B} , d^{A-X} , d^{B-X}), band gap (E_g), densidade de estados (DOS), estruturas de banda, cargas efetivas de Bader (Q_{Bader}^i), constantes elásticas (C_{ij}), módulo volumétrico (B_0) e o coeficiente de absorção.

Métodos e Procedimentos

O estudo teórico foi baseado na Teoria do Funcional da Densidade utilizando a aproximação de Perdew-Burke-Ernzerhof para o funcional de troca e correlação. As equações de Kohn-Sham foram resolvidas dentro do método das projeções de onda aumentadas implementadas no código VASP.

Resultados

Com relação aos parâmetros estruturais, percebe-se uma relação direta entre a_0 e os raios atômicos. Além disso, X e B apresentam maior influência em a_0 do que A, devido a B e X estarem localizados, respectivamente, nos vértices e no centro da aresta da rede. As mesmas tendências são observadas para os demais parâmetros estruturais pois os mesmos também estão relacionados ao raio das espécies. Com relação a carga efetiva de Bader, observamos que há um aumento nas cargas dos cátions, consequentemente diminuição na carga do ânion, quando X passa

de I para Cl devido a um aumento da capacidade dos ânions de atrair cargas negativas (eletronegatividade). Em relação ao gap, nota-se que as espécies A têm menor influência no mesmo, visto que a banda de valência e condução são formadas majoritariamente por estados p de X e B, respectivamente. Além disso, nota-se que o gap diminui com o aumento de a_0 . Pela análise de estrutura de bandas, encontra-se que o gap direto está localizado no ponto R (0,5; 0,5; 0,5).

Conclusões

Observou-se que as propriedades estruturais são influenciadas principalmente pelo tamanho dos átomos, especialmente pelas espécies B e X. Essas mesmas também estão relacionadas as propriedades ópticas, já que são as principais constituintes das bandas de valência e de condução das estruturas. Com relação as propriedades energéticas, observa-se uma grande influência do ânion devido a sua eletronegatividade e que a formação da estrutura se dá devido a transferência de cargas de B para X.

Referências Bibliográficas

- [1] Green, M. A.; Ho-Baillie, A.; Snaith, H. J. Nature Photonics **2014**, 8, nphoton–2014.
- [2] Jiang, L.; Guo, J.; Liu, H.; Zhu, M.; Zhou, X.; Wu, P.; Li, C. Journal of Physics and Chemistry of Solids **2006**, 67, 1531–1536.