

---

**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 perovskites 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 Unidade:  
Instituição: Universidade de São Paulo

***Orientador:***

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

***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<sub>3</sub> UTILIZANDO A TEORIA DO FUNCIONAL DA DENSIDADE

Mariana Cândido 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<sub>3</sub>. Para isso, estudo-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 ( $Q_{\text{eff}}^{\text{B}}$ ), 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.