

## ESTUDO AB INITIO DO PAPEL DOS ÁTOMOS NAS PROPRIEDADES ELETRÔNICAS E ESTRUTURAIS DAS PEROVSKITAS

**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

A alta demanda energética é um grave problema que atinge a população mundial, logo, a procura por fontes energéticas eficientes e renováveis vem sendo largamente exploradas. As perovskitas, uma classe de material de composição  $ABX_3$  e grupo espacial  $Pm3m$ , estão sendo muito exploradas devido à suas propriedades ópticas para o aumento da eficiência de conversão de luz solar em energia elétrica nas células fotovoltaicas. Contudo, a perovskita mais utilizada no momento,  $CH_3NH_3PbI_3$ , apresenta chumbo em sua composição, material conhecido por sua alta toxicidade. Buscando estruturas com melhores propriedades para sua aplicação, faz-se necessário um melhor entendimento do papel de cada átomo nas propriedades da estrutura. Em vista disso, este trabalho visa estudar 27 estruturas, onde  $A = K, Rb$  e  $Cs$ ,  $B = Ge, Sn, Pb$ , e  $X = Cl, Br$  e  $I$  para tentar compreender como as propriedades são alteradas quando troca-se os átomos.

### Métodos e Procedimentos

O estudo teórico foi feito baseado em cálculos com a Teoria do Funcional da Densidade (DFT), utilizando a aproximação de Perdew-Burke-Ernzehof (PBE) para o funcional de troca e correlação. As equações de Kohn-Sham foram resolvidas com a metodologia dos Projetores de onda aumentada (PAW) dentro do código Vienna *Ab initio* Simulation Package (VASP). Inicialmente, testou-se todos os parâmetros e variáveis utilizadas com a perovskita de  $CaTiO_3$ .

Posteriormente, calculou-se o parâmetro de rede, gap, energia de coesão, carga de Bader, Densidade de Estados e Estrutura de Bandas para as 27 estruturas escolhidas.

### Resultados

É possível notar que o parâmetro de rede ( $a_0$ ) aumenta ao passo que descemos na tabela periódica, com maior influência para o B e X, visto que os átomos A ocupam o centro da estrutura. Em relação ao gap, percebe-se que os átomos A não tem tanta influência no mesmo, visto que a banda de valência e condução são formadas majoritariamente por orbitais  $p$  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

De acordo com as análises realizadas, foi possível encontrar dependências entre as propriedades dos átomos com a variação das propriedades eletrônicas e estruturais das perovskitas. Porém, é necessário a realização de testes adicionais para melhorar a compreensão dessas estruturas.

### Referências Bibliográficas

- Green, M. A.; Ho-Baillie, A.; Snaith, H. J. *Nature Photonics* **2014**, 8, nphoton–2014.  
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.