

ESTUDO DAS PROPRIEDADES ELETRÔNICAS E VIBRACIONAIS DO HALETO INORGÂNICO CS2AU2CL6 UTILIZANDO A TEORIA DO FUNCIONAL DA DENSIDADE (DFT)

Otavio Peixoto Furtado, Mayra Alexandra Padron Gomez, Alejandro Pedro Ayala

São classificados como perovskitas simples os compostos com fórmula química ABX₃, nos quais em sua estrutura, o cátion B se encontra cercado por seis ânions X formando um octaedro e o cátion A se encontra entre esses octaedros. Nas últimas décadas, as perovskitas orgânicas-inorgânicas à base de chumbo (B=Pb) tem ganhado cada vez mais destaque na ciência de materiais, especialmente devido à sua aplicabilidade na produção de células solares com altas eficiências (acima de 28%). Contudo, a instabilidade desses materiais e a toxicidade do chumbo são fatores que limitam sua aplicação. Atualmente, muitos estudos buscam por alternativas que solucionem esses problemas, dentre essas soluções cabe citar que a substituição de cátions orgânicos por cátions de césio tendem a aumentar a estabilidade dessas perovskitas, enquanto que o problema da toxicidade pode ser resolvido através da alternativa das perovskitas duplas, de fórmula ABB'X₆, onde o chumbo pode ser substituído por dois cátions B e B', o que aumenta a quantidade de alternativas com propriedades similares às perovskitas de chumbo. No entanto, essa busca por alternativas mostrou que a grande variabilidade composicional das perovskitas e perovskitas duplas tornam esses materiais interessantes para aplicações na eletrônica e em dispositivos ópticos. Nesse contexto, o presente trabalho busca estudar as propriedades da perovskita dupla e livre de chumbo: Cs₂Au₂Cl₆, onde aplicamos técnicas de DFT para estudar as propriedades eletrônicas e vibracionais dessa amostra. Neste estudo, também obtivemos o espectro Raman de uma amostra desse composto e portanto teremos um maior foco nas propriedades vibracionais da mesma.

Palavras-chave: Perovskitas. DFT. Espectroscopia Raman. Propriedades vibracionais.