



## **ESTUDO DA INTERAÇÃO DO FULERENO COM O POLÍMERO MEH-PPV**

Maria Luiza Souto Costa <sup>1</sup>, Luis Alberto Terrazos Javier <sup>2</sup>

### **RESUMO**

Os fulerenos são alótropos de carbono, empregado na nanotecnologia, sendo uma de suas aplicações no desenvolvimento de fontes de energia renováveis de baixo custo e a estimular novas abordagens para a produção de dispositivos fotovoltaicos eficientes e de baixo custo, como materiais orgânicos como polímeros conjugado. A eficiência da energia de conversão de uma célula fotovoltaica usando polímeros conjugados é muito baixa, entanto que ligando esse polímero a um fulereno a eficiência aumenta. Neste trabalho funcionalizamos o fulereno C60 com o polímero MEH-PPV de forma covalente e calculamos sua energia de ligação utilizando a teoria da mecânica quântica inserido no programa DMol3, onde o polímero MEH-PPV + fulereno é -614,7 eV, como também o fulereno que é - 449,9 eV, e do polímero MEH-PPV é -170,6 eV. A energia de ligação do fulereno +MEH-PPV apresentam com sinal negativo, o que diz que são sistemas estáveis. A distância C-C =1.803 Å na ligação do MEH-PPV com o fulereno e essa distância no fulereno C-C=1.46Å mostra que a força que liga esses carbonos é maior no fulereno, isso indica que a força que mantém juntos esses carbonos é maior no fulereno e menor no fulereno + MEH-PPV.

**Palavras-chave:** Fulereno, MEH-PPV, Células fotovoltaicas.

---

<sup>1</sup>Aluna da ECI Orlando Venâncio dos Santos, Cuité, PB, e-mail: [marialuiza2005@gmail.com](mailto:marialuiza2005@gmail.com)

<sup>2</sup>Doutor, Professor, UAFM, UFCG, Cuité, PB, e-mail: [lterrazo@ufcg.edu.br](mailto:lterrazo@ufcg.edu.br)



## STUDY OF THE INTERACTION OF FULLERENE WITH THE POLYMER MEH-PPV

### ABSTRACT

Fullerenes are allotropes of carbon, employed in nanotechnology, one of their applications being the development of low-cost renewable energy sources and stimulating new approaches for the production of efficient and low-cost photovoltaic devices, such as organic materials such as conjugated polymers. The energy conversion efficiency of a photovoltaic cell using conjugated polymers is very low, however by linking this polymer to a fullerene the efficiency increases. In this work we functionalize the C<sub>60</sub> fullerene with the MEH-PPV polymer covalently and calculate its binding energy using the quantum mechanics theory inserted in the DMol3 program, where the MEH-PPV + fullerene polymer is -614.7 eV , as well as the fullerene which is -449.9 eV , and MEH-PPV polymer is -170.6 eV . The binding energy of fullerene +MEH-PPV has a negative sign, which means that they are stable systems. It can be seen that the C-C distance at which the fullerene bond + MEH-PPV the distance is greater, this indicates that the force holding these carbons together is greater in the fullerene and lesser in the fullerene + MEH-PPV.

**Keywords:** Fullerene, MEH-PPV , Photovoltaic cells.