

UNIVERSIDADE FEDERAL DE MINAS GERAIS

INSTITUTO DE CIÊNCIAS EXATAS

DEPARTAMENTO DE QUÍMICA

Projeto de Iniciação Científica Voluntária

*Síntese e caracterização estrutural de perovskitas*

*2D halógenas de Estanho*

Orientador: Prof. Dr. Willian Xerxes Coelho Oliveira

Orientado: Luise Gelmine Caldeira - 2021038054

Belo Horizonte, Dezembro de 2022

## Introdução e Justificativa

As perovskitas halógenas têm se mostrado com elevado potencial para produção de energia solar, sozinhas ou aliadas com o silício. Entretanto as mais eficientes são aquelas contendo chumbo em sua composição, que além de tóxico apresenta instabilidade frente a umidade.<sup>1</sup> Na tentativa de diminuir a toxicidade destes materiais, uma alternativa é a troca do chumbo por estanho. A troca é de certa forma eficiente, mas a perovskita final é ainda menos estável.<sup>2</sup> Assim, a busca por alternativas que deixem a superfície delas hidrofóbica, sem comprometer o transporte de cargas é o ideal. Uma forma de se conseguir isto é a produção das chamadas perovskitas 2D, em que se utiliza um espaçador orgânico catiônico de cadeia longa que permite a formação da estrutura de octaedros compartilhados pelo vértice, mas em apenas duas direções, na terceira o espaçador cria uma lacuna hidrofóbica.<sup>3</sup> Estes materiais perovskita 2D são muito mais estáveis frente a umidade e por terem similaridades com o material original não há grande resistência no transporte de cargas. Portanto a busca por compostos deste tipo é essencial na tentativa de tornar a tecnologia aplicável.

### *Objetivos gerais*

Sintetizar perovskitas 2D halógenas de estanho de fórmula geral  $(\text{Cat}^{n+})_x\text{Cs}_y\text{SnBr}_{(2+y+2.x.n)}$ , onde  $\text{Cat}^{n+}$  é um cátion orgânico.

### *Objetivos específicos*

Os objetivos específicos deste trabalho são

1. Sintetizar perovskitas utilizando como cátion os ácidos conjugados de oleamina (OL), dietilenotriamina (DETA) e pentametildietilenotriamina (PMDETA) na forma de monocristais.
2. Variar a quantidade estequiométrica de césio, com y entre 0 e 1.
3. Difratar os monocristais e refinar a estrutura cristalina das perovskitas 2D

---

<sup>1</sup> W. Ke, M. G. Kanatzidis. Prospects for low-toxicity lead-free perovskite solar cells. *Nat. Comm.* **2019**, *10*, 965. <https://doi.org/10.1038/s41467-019-08918-3>

<sup>2</sup> M. Pitaro, E. K. Tekelenburg, S. Shao, M. A. Loi. Tin Halide Perovskites: From Fundamental Properties to Solar Cells. *Adv. Mater.* **2022**, *34*, 2105844. <https://doi.org/10.1002/adma.202105844>

<sup>3</sup> a) G. Li, J. Song, J. Wu, Z. Song, X. Wang, W. Sun, L. Fan, J. Lin, M. Huang, Z. Lan, P. Gao. *ACS Energy Lett.* **2021**, *6*, 3614-3623. DOI: 10.1021/acsenerylett.1c01649. b) Eun-BiKim, M. S. Akhtar, H.-S. Shin, S. Ameen, M. K. Nazeeruddin. A review on two-dimensional (2D) and 2D-3D multidimensional perovskite solar cells: Perovskites structures, stability, and photovoltaic performances. *J. Photochem. Photobiol.* **2021**, *48*, 100405. <https://doi.org/10.1016/j.jphotochemrev.2021.100405>

## Metodologia

As perovskitas propostas serão preparadas adicionando sob aquecimento em HBr um sal de estanho (SnO ou SnCl<sub>2</sub>), a amina e/ou um sal de céσιο (Cs<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> ou CsI) na estequiometria desejada. A quantidade de ácido é aquela que permite solubilizar os reagentes a quente (~90 °C) e não a frio, para que durante o processo de resfriamento lento das soluções haja cristalização do produto.<sup>4</sup> Caso a adição simples do ácido não seja suficiente para solubilização do material a quente será adicionado um solvente orgânico polar para auxiliar, como dimetilformamida ou dimetilsulfóxido ou ainda etilenoglicol.

Será variada tanto a estequiometria do céσιο, para obtenção dos materiais de espessuras distintas de camadas de octaedros compartilhados pelos vértices, quanto de cátion orgânico até se obter estruturas do tipo perovskita.

Os monocristais obtidos serão analisados por difração de raios X de monocristal para determinação da estrutura final, ou seja, será usada de modo analítico. Ela também será utilizada para avaliação da eficiência da variação das relações estequiométricas, bem como do tipo de material 2D obtido. Para tal, serão utilizados os difratômetros de monocristal do Laboratório de Cristalografia da UFMG – LabCri.

## Cronograma

Atividade	Mês											
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
Revisão Bibliográfica	X	X	X	X	X	X	X	X	X	X	X	X
Síntese das perovskitas sem Cs	X	X	X	X	X	X	X	X	X	X	X	
Síntese das perovskitas com Cs			X	X	X	X	X	X	X	X	X	
Difração de Monocristais		X	X	X	X	X	X	X	X	X		
Estudo da relação estequiometria-estrutura cristalina			X	X	X	X	X	X	X	X	X	X
Publicação na SIC-UFMG												X
Preparo de um Vídeo Pitch												X

<sup>4</sup> L. Li, X. Liu, C. He, S. Wang, C. Ji, X. Zhang, Z. Sun, S. Zhao, M. Hong, and J. Luo. *J. Am. Chem. Soc.* **2020** 142, 1159-1163. DOI: 10.1021/jacs.9b11341