

# Sumário

<b>1</b>	<b>Introdução</b> .....	11
1.1	Referências .....	19
<b>2</b>	<b>A Química do Carbono</b> .....	23
2.1	Orbitais Atômicos e Moleculares .....	23
2.2	Fundamentos Teóricos .....	24
2.3	Ligações do Átomo de Carbono .....	30
2.4	Referências .....	37
<b>3</b>	<b>O anel benzênico, o anel tiofênico e o fulereno</b> .....	39
3.1	O anel benzênico .....	39
3.2	O anel tiofênico .....	44
3.3	Fulerenos .....	45
3.4	Referências .....	46
<b>4</b>	<b>Vibrações Moleculares</b> .....	49
4.1	Referências .....	58
<b>5</b>	<b>Conceito e formação de polímeros</b> .....	59
5.1	Processos de polimerização .....	60
5.1.1	Adição .....	60
5.1.2	Condensação .....	62
5.2	Tipos e conformações de cadeias poliméricas .....	66
5.3	Referências .....	69

<b>6</b>	<b>Modelagem e estrutura eletrônica de polímeros conjugados</b> .....	71
6.1	Modelagem de polímeros conjugados .....	72
6.2	Estrutura eletrônica de polímeros conjugados .....	74
6.3	Referências .....	81
<b>7</b>	<b>Fotofísica e transporte em polímeros conjugados</b> .....	83
7.1	Processos intracadeia .....	85
7.2	Processos intercadeia .....	87
7.3	Transporte de carga .....	88
7.4	Referências .....	90
<b>8</b>	<b>Deposição de polímeros</b> .....	93
8.1	Spin coating .....	94
8.2	Jato de tinta .....	95
8.3	Referências .....	97
<b>9</b>	<b>Aplicação - Células fotovoltaicas</b> .....	99
9.1	Princípios gerais .....	101
9.2	Estruturas e parâmetros chave .....	103
9.3	Passos na geração de fotocorrente .....	108
9.3.1	Absorção de fótons .....	108
9.3.2	Geração do éxciton .....	109
9.3.3	Migração do éxciton .....	109
9.3.4	Dissociação do éxciton .....	110
9.3.5	Transporte de portadores de carga .....	110
9.3.6	Coleta de portadores de carga .....	111
9.4	Voltagem em circuito aberto - $V_{oc}$ .....	111
9.5	Alternativas tecnológicas .....	111
9.6	Referências .....	114