

Identificación del proyecto

Nombre del proyecto

Transferencia intermolecular de energía y electrones mediante interacción de configuraciones no ortogonales

Expediente numero

PID2020-113187GB-I00



Descripción del proyecto

En la búsqueda continua por reducir el calentamiento global, las células fotovoltaicas basadas en sílice se han convertido en una alternativa atractiva a los combustibles fósiles. Sin embargo, la fotovoltaica orgánica tiene ventajas potenciales sobre las basadas en sílice, como costos de producción menores, portabilidad, flexibilidad y ligereza. Aunque la eficiencia va en crecimiento, las células solares basadas en materiales orgánicos aún necesitan desarrollo para competir seriamente con las de sílice. Mientras las células fotovoltaicas ayudan a reducir el uso de combustibles fósiles, complejos fotocatalíticos pueden reducir CO₂ a CO u otro hidrocarburo, llegando finalmente a tasas de emisión de CO₂ negativas. Pero, de nuevo, los valores de conversión y la estabilidad no son los deseables para la aplicación a gran escala de la fotocatalisis para la reducción de CO₂, implicando necesidad de mejora.

A parte del gran esfuerzo experimental en curso, la teoría puede a su vez ser de ayuda en la mejora de la eficiencia de las células fotovoltaicas orgánicas y la fotocatalisis. La transferencia inter- e intramolecular de energía y de electrones juegan un papel clave en estos materiales. Estos conceptos, difíciles de cuantificar a nivel experimental, pueden ser estudiados al detalle con métodos cuánticos teóricos.

Muchos estudios teóricos se basan en simples modelos cuánticos fenomenológicos o aproximaciones TD-DFT. Nuestro método de interacción de configuraciones no-ortogonales (NOCI-fragments) implementado en GronOR como código abierto ofrece una forma detallada y consistente de evaluar la transferencia de energía y electrones sin perder la belleza de la interpretación intuitiva de los resultados inherente a los modelos fenomenológicos.

La aproximación NOCI-fragments empieza con la generación de un conjunto de funciones de onda polielectrónicas de un monómero incluyendo la relajación total de los orbitales, la correlación estática y dinámica, y los efectos del entorno. Con estas funciones del monómero se forman los estados diabáticos adaptados al spin de todo el sistema, seguido por un NOCI entre estas funciones de base polielectrónicas para calcular las energías y funciones de onda de los estados electrónicos relevantes, junto al acoplamiento entre estados diabáticos. Así, la expansión final de la función de onda se mantiene corta pero precisa, facilitando la interpretación física del sistema.

El proyecto consta de dos partes igualmente importantes. Una se centra en el desarrollo del código GronOR y la otra aplica NOCIfragments a una serie de problemas relevantes en fotovoltaica orgánica y fotocatalisis. GronOR usa de manera muy eficiente las GPUs y está paralelizado masivamente para su uso a gran escala. La implementación de técnicas para un tratamiento eficiente de las integrales a dos electrones (descomposición de Cholesky o esquemas RI) y una mejora adicional del código (generalización de la descarga en GPU y paralelización en CPU mediante openMP) pueden hacer del código un nuevo e importante actor entre la comunidad de la Química Cuántica. Las aplicaciones incluirán: (i) el estudio de la eficiencia en la generación de multi-excitones y el decaimiento Coulómbico intermolecular en moléculas relevantes en fotovoltaica, (ii) el cálculo de acoplamientos no-adiabáticos para simulaciones ulteriores de mecanismos de reacción fotocatalíticos y (iii) transferencia electrónica en (y mecanismos de reacción de) reacciones fotocatalíticas.

Financiación

Entidad financiadora

Proyecto PID2020-113187GB-I00 financiado por MCIN/ AEI /10.13039/501100011033

Importe

108.900,00 €