



## Dinámica molecular de la fase donadora de heterojuntas de fotovoltaicas orgánicas.

Augusto González-Navejas<sup>1</sup>, Karl García<sup>1</sup>, Carlos Amador-Bedolla<sup>1</sup>, Laura Domínguez<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Universidad Nacional Autónoma de México, Facultad de Química; México

e-mail: agosto.gn93@gmail.com

Las celdas fotovoltaicas orgánicas de heterojuntas (OPVs) tienen una fase donadora responsable de la absorción de fotones y la difusión del excitón hasta la interfase. Esta difusión depende importantemente de la estructura geométrica local y global de la fase, como función de la temperatura y de la presencia de moléculas excitadas y cargadas. Dentro de las técnicas de la mecánica molecular es fundamental la asignación de parámetros tales como la geometría basal de la molécula y la asignación de cargas atómicas dentro de la molécula. En particular, la asignación de cargas es controversial, ya que existen diferentes métodos tales como el de Mulliken basado en orbitales moleculares, el de *Quantum Theory of Atoms in Molecules* (QTAIM) que se basa en el estudio de la densidad topológica, el de *Natural Bond Orbitals* (NBO) que está basado en la optimización de lo que los orbitales moleculares pueden determinar, el de *Charges from Electrostatic Potentials using a Grid-Based Method* (CHELPG) basado en el observable del potencial electrostático y el de Hirshfeld que se basa en la diferencia entre la densidad electrónica de los átomos aislados y la que tienen en la molécula.

Para el caso de las moléculas benzopirazina+tiofeno (BPT) y benzo[1,2,5]benzotiadiazol+tiofeno (BTT) —moléculas simples prototípicas de las OPVs—, se obtuvieron las cargas atómicas de las moléculas con los métodos mencionados; se optimizó la geometría de BPT y BTT mediante técnicas de DFT con lo que se determinaron las propiedades estructurales para después obtener los ensamblajes correspondientes para los estudios de dinámica molecular al vacío usando la aproximación de solvente implícito y un modelo atomístico. Se realizó tal estudio en un conjunto de 250 moléculas para evaluar las propiedades generales del sistema y de cada molécula frente a las moléculas vecinas.