



## Geometría de estados excitados en confórmeros OPV

Gerardo Alvarez Alvarez, Carlos Amador Bedolla  
Departamento de Física y Química Teórica, Facultad de Química U.N.A.M.; México  
e-mail: geralvalvarez@gmail.com, carlos.amador@unam.mx

Los compuestos orgánicos fotovoltaicos (OPVs, *organic photovoltaics*) y las posibilidades que prometen (energía más limpia, barata y la menor dependencia de combustibles fósiles)<sup>1</sup> han provocado que se destinen esfuerzos a encontrar formas de generar estos compuestos. El grupo de Aspuru-Guzik<sup>2</sup> jerarquizó, por medio del modelo de Scharber<sup>3</sup>, un conjunto de más de 2.5 millones de moléculas con base en su eficiencia.

Es de especial interés encontrar información acerca de la geometría de los estados excitados de los OPVs ya que para asegurar un buen transporte de carga, se cree que es preferible una geometría planar. Este criterio puede ayudar a filtrar aún más los resultados.

Con este fin, se realizaron optimizaciones de geometría bajo el método TD-DFT empleando el funcional  $\omega$ B97X-D con la base 6-31G\*. El funcional fue seleccionado debido a las correcciones de fuerzas de dispersión y de rango separado para el intercambio que permiten una mejor predicción de las geometrías a distancias más allá de el rango de un enlace<sup>4</sup>. Se optimizaron dos series de cálculos. La primera serie se conforma con las once moléculas previamente estudiadas<sup>5</sup> ahora con el esquema TD-DFT. La segunda serie está compuesta por confórmeros binarios de las mismas moléculas para simular la transferencia de un electrón promovido intermolecularmente.

### Referencias:

1. Shaheen S.E.; Brabec C.J.; Sariciftci N.S. *Appl Phys Lett*. 2001(**78**) 841
2. Hachmann, J. *et. al. Energy & Environmental Science*, 2013(**7**) 698
3. Scharber M.C.; Sariciftci N.S. *Prog. Polym. Sci.* 2013 38(**12**) 1929
4. Chai, J.-D.; Head-Gordon, M. *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 2008(**10**) 6615
5. Alvarez-Alvarez, G. and Amador-Bedolla, C. Cartel presentado en la XIV RMFQT 2015