



DISEÑO MOLECULAR DE COLORANTES ORGÁNICOS BASADOS EN ACRIDINA PARA CELDAS SOLARES SENSIBILIZADAS POR COLORANTE

Rodolfo Alejos León¹, Daniel Glossman Mitnik^{2,3}, Jesús Baldenebro López¹

¹ Facultad de Ingeniería Mochis, Universidad Autónoma de Sinaloa. Prol. Ángel Flores y Fuente de Poseidón, S/N, C.P. 81223, Los Mochis, Sinaloa; México

² Departament de Química, Universitat de les Illes Balears, 07122, Palma de Mallorca; Spain

³ NANOCOSMOS Virtual Lab, Centro de Investigación en Materiales Avanzados S.C. Miguel de Cervantes 120, C.P. 31136, Chihuahua, Chihuahua; México
e-mail: rodolfo.alejos@uas.edu.mx

El desarrollo de nuevas tecnologías ha llevado a obtener alternativas en el área de energía que son renovables, limpias y económicas. A su vez, las fuentes de energía no renovables como el petróleo son muy contaminantes y el agotamiento de las reservas ha llevado a la escasez de los combustibles fósiles. Las celdas solares sensibilizadas por colorante o DSSC por sus siglas en inglés (DSSC)¹, muestran la oportunidad de producir dispositivos a bajo costo. Este trabajo presenta novedosos diseños moleculares de potenciales sensibilizadores basados en acridina con la inclusión de unidades de furano, tiofeno, benzotiadazol y benzotiofeno en el puente π , así como ácido cianoacrílico como grupo de anclaje con el óxido semiconductor. El estudio se llevó a cabo con la teoría de funcionales de la densidad (DFT) y DFT dependiente del tiempo (TD-DFT); se determinaron las estructuras de mínima energía, los niveles de energía de los orbitales moleculares involucrados en las transiciones de las principales bandas de absorción. El análisis de la inyección electrónica se llevó a cabo a partir del potencial de oxidación del estado fundamental y la energía asociada con la mayor longitud de onda de absorción. A través de DFT conceptual, se realizó un análisis del efecto de los sustituyentes sobre algunos parámetros tales como la dureza química², el índice de electrofilicidad y el poder electroaceptor³. Los funcionales utilizados fueron PBE0, M06, M06-2X y CAM-B3LYP, combinados con el conjunto base 6-31G(d).

- (1) Jena, A.; Mohanty, S. P.; Kumar, P.; Naduvath, J.; Gondane, V.; Lekha, P.; Das, J.; Narula, H. K.; Mallick, S.; Bhargava, P. *Trans. Indian Ceram. Soc.* **2012**, *71* (February 2015), 1–16.
- (2) Parr, R. G.; Pearson, R. G. *J. Am. Chem. Soc.* **1983**, *105*, 7512–7516.
- (3) Lewars, E. *Computational chemistry: introduction to the theory and applications of molecular and quantum mechanics*; Springer Science & Business Media, 2010.