

Curso de Verano en Nanociencia y Nanotecnología

III Simposio Internacional Julio Palacios

A Coruña, 21 y 22 de Julio de 2022

RESUMEN

Mejora del rendimiento en células solares mediante simulación computacional

Remco W.A. Havenith

La energía fotovoltaica orgánica (EFO) es una fuente de energía sostenible potencial y atractiva; sin embargo, sus eficiencias aún no son lo suficientemente altas para ser económicamente competitivas. Pueden emplearse varias estrategias para mejorar los materiales para EFO: 1) el uso de materiales con constante dieléctrica grande, 2) materiales de conversión descendente (fisión singlete), ó 3) materiales de conversión ascendente. Las simulaciones por computador se pueden usar para explorar las propiedades de los materiales y proporcionar información sobre la forma en que estos materiales responden a las perturbaciones y, por lo tanto, pueden proporcionar guías de diseño para mejores materiales EFO.

En esta presentación, se ofrece una descripción general de nuestro trabajo sobre el cálculo de constantes dieléctricas para derivados de fullereno sustituidos. Demostramos que podemos predecir las constantes dieléctricas de los materiales y que podemos descomponer la constante dieléctrica en contribuciones de grupos funcionales. Además, presentamos una forma de estimar las tasas de fisión singlete en cristales orgánicos y discutimos nuestros resultados obtenidos para posibles candidatos a fisión singlete.