

## **Fotovoltaicas orgánicas: de la predicción a la síntesis**

Carlos Amador Bedolla  
Facultad de Química, UNAM, México

El Proyecto de Energía Limpia de Harvard (HCEP) es un estudio computacional distribuido de 2.3 millones de moléculas concebidas como candidatos promisorios para crear polímeros donadores que sean usados en celdas solares de heterojuntas (fotovoltaicas orgánicas u OPVs). Calculamos las propiedades electrónicas del estado basal de estas moléculas —a través de la realización de 150 millones de cálculos teóricos de funcionales de la densidad— y empleamos el modelo de Scharber aplicado a un aceptor de PCBM para jerarquizar las moléculas en términos de su Eficiencia de Conversión de Potencia (PCE), con lo que encontramos 0.04% de moléculas que exceden 11% de eficiencia. Analizamos los bloques unitarios empleados en la síntesis virtual de las moléculas postuladas como de alta eficiencia.

En la actualidad se desarrolla e implementa un programa experimental de síntesis de algunas de estas moléculas y su empleo en la construcción de OPVs para probar la eficacia de la predicción teórica. El empleo de métodos de jerarquización que consideren, por ejemplo, otros tipos de moléculasceptoras y/o efectos topológicos en la eficiencia de conversión constituye otra línea de investigación en el presente. Discutimos también la adaptación de estos resultados en los objetivos sintéticos del programa experimental.

### **Semblanza**

Carlos Amador Bedolla es profesor titular de Química Teórica en la Facultad de Química, UNAM. Estudió licenciatura, maestría y doctorado en Fisicoquímica en esa misma institución. Ha realizado estancias posdoctorales y sabáticas en Case Western Reserve University, Berkeley, Santiago de Cuba y Harvard, en química, física y ciencia de materiales. Fue Secretario Académico de la Facultad de Química. Ha publicado decenas de artículos de investigación, decenas de artículos de difusión, un programa de televisión, y dos libros. Dirige el equipo multidisciplinario de predicción, síntesis y elaboración de celdas orgánicas fotovoltaicas financiado por CONACyT/SENER.