

Diseño de celdas solares orgánicas usando ciencias de datos y química

La producción sostenible de energía es un tema de urgencia global. Si se aprovechara una fracción de energía solar que llega a la Tierra, por mucho se podrían satisfacer todas nuestras necesidades de energía. Sin embargo, transformar la energía solar en electricidad actualmente no es eficiente ni económico. Además, actualmente las celdas solares más eficientes requieren de metales que son contaminantes y/o muy costosos. Las celdas solares a base de tintas orgánicas son baratas y degradables, y aunque no son muy eficientes, podrían usarse en ropa o en ventanas. Un problema complejo es encontrar las tintas que son más eficientes para producir electricidad. En esta plática daré una introducción a las celdas solares orgánicas, y cómo pueden ser diseñadas con la sinergia de la ciencia de datos y la química. En resumen, mostraré como utilizando inteligencia artificial se obtuvieron datos de cientos de miles de artículos científicos y se combinaron con experimentos y simulaciones de estructura electrónica para diseñar una celda orgánica que en el laboratorio mostró una eficiencia similar a las celdas más eficientes que contienen metales.

Biografía

Dr. Álvaro Vázquez Mayagoitia actualmente es investigador titular en el Laboratorio Nacional de Argonne en Illinois, E.U.A. Además, es investigador adjunto en la Universidad de Chicago. El Dr. Vázquez Mayagoitia es egresado de licenciatura y doctorado de la Universidad Autónoma Metropolitana Unidad Iztapalapa con especialidad en fisicoquímica teórica. Es experto en química computacional e inteligencia artificial.