

Projecte per beques d'estiu 2017

Dades del projecte:

Títol:	Modelització de materials per a cel·les fotovoltaïques
Supervisor:	Dr. Lluís Blancafort
E-mail supervisor:	lluis.blancafort@udg.edu
Grup de recerca:	QTMEM
Destinat a estudiants:	4rt any
Lloc de treball:	Fac. Ciències
Places ofertes:	1 (4rt any)
Data d'inici:	a concretar amb l'estudiant
Data d'acabament:	a concretar amb l'estudiant
Seguiment:	Diari

Coneixements específics que ha de tenir l'estudiant:

Assignatures rellevants: Química quàntica i espectroscòpica, Cinètica química, Electroquímica i química macromolecular

Estudis en curs requerits:

Grau en química

Formació que adquirirà l'estudiant en realitzar aquesta activitat:

Modelització de materials rellevants per a la producció d'energia mitjançant tècniques de dinàmica molecular i química quàntica.

Descripció de l'activitat que ha de fer l'estudiant:

Un dels materials orgànics més prometedors per a la producció d'energia amb cel·les fotovoltaïques és la barreja entre ful·larens i politiofens. En aquests dispositius, la molècula dadora (politiofè) reb un fotó, i com resposta a l'excitació transmet un electró a la molècula acceptora (ful·laré), la qual cosa dóna lloc a la conducció d'electricitat. Les cel·les basades en aquests materials han assolit eficiències de conversió properes al 10 %. L'objectiu del treball és modelar aquest material amb tècniques de dinàmica molecular, i posteriorment extreure informació sobre els paràmetres clau de la funció fotovoltaïca, com són els espectres d'absorció electrònica i els acoblaments que permeten la transferència de càrrega entre el dador i l'acceptor. Això permetrà obtenir els paràmetres que determinen l'eficiència de la cel·la i proposar nous dissenys més eficients.

Referències

"Ultrafast Long-Range Charge Separation in Organic Semiconductor Photovoltaic Diodes" Gélinas, S. *et al. Science* **2014**, *343*, 512.