

## Identificación del proyecto

### Nombre del proyecto

Interacción de configuraciones no ortogonales: desarrollo de código y aplicaciones (NOCI-DA)

### Expediente numero

PID2023-148238NB-I00



## Descripción del proyecto

En el continuo intento de reducir el calentamiento global, las celdas fotovoltaicas (CF) basadas en sílice se han convertido en una alternativa atractiva a los combustibles fósiles. Sin embargo, las CF basadas en compuestos orgánicos o perovskitas tienen ventajas potenciales sobre las basadas en sílice, como costos de producción menores, portabilidad, flexibilidad y ligereza. Aunque su eficiencia va en aumento, las celdas solares basadas en materiales orgánicos aún necesitan un cierto desarrollo para competir seriamente con las de sílice. Mientras las CF pueden reducir el uso de combustibles fósiles, el uso de sistemas fotocatalíticos puede reducir el CO<sub>2</sub> atmosférico a CO o a algún hidrocarburo, llegando así a tasas de emisión de CO<sub>2</sub> negativas. Pero los valores de conversión y la estabilidad no son los deseables para la aplicación a gran escala de la fotocatalisis, lo que implica necesidades de mejora.

Aparte del gran esfuerzo experimental en curso, la modelización puede, a su vez, ayudar en la mejora de la eficiencia de las CF orgánicas y los sistemas fotocatalíticos. Las transferencias de energía y de electrones entre moléculas juegan un papel clave en estos materiales. Estos eventos, difíciles de cuantificar experimentalmente, pueden estudiarse al detalle con métodos teóricos. De estos, muchos se basan en simples modelos cuánticos fenomenológicos o en aproximaciones TD-DFT. Nuestro método de interacción de configuraciones no ortogonales (NOCI-fragments) implementado en GronOR en código abierto ofrece una forma detallada y consistente de evaluar la transferencia de energía y electrones sin perder la belleza de la interpretación intuitiva de los resultados inherente a los modelos fenomenológicos.

La aproximación NOCI-fragments parte de la generación de un conjunto de funciones de onda polieletrónicas de un monómero que incluye la relajación de los orbitales y la correlación estática y dinámica. Con estas funciones se forman los estados diabáticos adaptados al spin de todo el sistema, seguido por la NOCI entre estas funciones de base polieletrónicas para calcular las energías y funciones de onda de los estados electrónicos relevantes, junto con el acoplamiento entre estados diabáticos. Así, la expansión final de la función de onda se mantiene corta pero precisa, facilitando la interpretación física del sistema.

El proyecto consta de dos partes igualmente importantes. Una se centra en el desarrollo del código GronOR y la otra aplica NOCI-fragments a una serie de problemas relevantes en fotovoltaica orgánica y fotocatalisis. GronOR usa de manera muy eficiente las GPUs y está paralelizado masivamente para su uso a gran escala. El desarrollo del código se centrará en la implementación de la descomposición de valores singulares por lotes en GPUs, la generalización del módulo existente de acoplamiento espín-órbita, la evolución en tiempo real de las funciones de onda NOCI y la interconexión del código con Orca para aumentar la visibilidad de GronOR en la comunidad de Química Computacional. Las aplicaciones abarcarán (i) el estudio de la generación de excitones múltiples en pilas de moléculas autoensambladas; (ii) la elucidación de la separación entre tripletes tras la fisión de singletes (iii) la determinación de los factores electrónicos que (des)favorecen la recombinación de cargas (iv) la transferencia de energía y electrones entre el fotosensibilizador y el catalizador en reacciones fotocatalíticas de reducción de CO<sub>2</sub>.

## Financiación

### Entidad financiadora

MICIU/AEI/10.13039/501100011033, por FEDER, UE y por el FSE+

### Importe

120.000,00