

Título: Simulación de dinámica fotoinducida en sistemas moleculares conjugados extendidos.

Tipo: PICT 2014

Fecha de inicio: 29/01/2016

Finalización: 28/07/2019

Director: Fernández Alberti, Sebastián.

Integrantes: Alfonso Hernández, Laura; Kleiman, Valeria; Oldani, Andrés Nicolás; Ondarse Álvarez, Dianelys; Rodríguez Hernández, Beatriz; Roitberg, Adrián y Tretiak, Sergei.

Resumen

Las simulaciones de procesos fotoinducidos en sistemas moleculares conjugados extendidos es fundamental para una variedad de aplicaciones tecnológicas que van desde antenas recolectoras de luz y células fotovoltaicas hasta futuros dispositivos optoelectrónicos. Las simulaciones nos permiten la comprensión y predicción del comportamiento fisicoquímico de estos materiales permitiendo guiar los esfuerzos experimentales. La fotoexcitación y subsiguiente relajación y redistribución intramolecular de la energía electrónica y vibracional en estos sistemas suele involucrar múltiples estados acoplados que participan de una variedad de procesos tales como conversión interna, transferencia de energía, separación de cargas y localización espacial de excitones. Por este motivo, la correcta simulación de estos procesos implica la consideración de efectos cuánticos tales como el acoplamiento entre estados electrónicos excitados, coherencias y la existencia de intersecciones cónicas, entre otros. En los últimos años, hemos desarrollado e implementado el código computacional NA-ESMD (por Non-Adiabatic Excited States Molecular Dynamics) que permite la simulación de dinámica molecular no-adiabática en estados excitados para sistemas moleculares conjugados de cientos de átomos (~300) y varias decenas de estados electrónicos excitados (~40-50) a escalas de tiempos de picosegundos. El objetivo general de este proyecto es avanzar en el desarrollo, implementación y aplicación de NA-ESMD introduciendo nuevos métodos que nos permitirán abordar procesos fotoinducidos en una variedad de sistemas moleculares conjugados extendidos con potenciales aplicaciones tecnológicas y que no pueden ser abordados en la etapa actual de desarrollo. Los métodos serán extensamente verificados, optimizados y utilizados en el marco del proyecto. Avanzaremos en el tratamiento cuántico de grados de libertad nucleares, reformulación de la propagación del paquete de ondas electrónico con el objeto de incrementar la eficiencia del código, incorporación de solvente implícito y técnicas híbridas QM-MM (por Quantum Mechanics / Molecular Mechanics) donde la molécula excitada es estudiada utilizando un Hamiltoniano mecano-cuántico (QM) mientras el solvente (o entorno químico/molecular específico) es tratado clásicamente (MM). Las distintas implementaciones nos permitirán estudiar sistemas moleculares de mayor tamaño, predecir efectos de coherencia en la propagación nuclear, separaciones de carga y estudiar la competencia de procesos intramoleculares e intermoleculares, incluida la relajación inducida por el solvente. De este modo, la propuesta consiste en avanzar en el desarrollo de simulaciones NA-ESMD que nos permitan abordar un número de sistemas moleculares importantes actualmente en el foco de la investigación experimental.

Unidad Académica: Departamento de Ciencia y Tecnología.