

Implementation of machine learning for the optimization of molecular systems in solar cells

Andrés D. Suarez-Guarnizo

October 3, 2020

1 Abstract

Las células solares orgánicas nos muestran un camino interesante hacia el uso de energías renovables ecológicas y amigables. Eso nos ayudará a mitigar el efecto o huella de carbono. Se están cuestionando formas eficientes de convertir la energía solar en electricidad, como el uso de materiales, buscando las mejores propiedades que permitan una óptima conversión energética. Este trabajo explora el uso de técnicas de aprendizaje automático (ML) para ayudar a optimizar propiedades moleculares como el orbital molecular de alta ocupación (HOMO) y las energías de orbital molecular desocupado más bajo (LUMO), así como el cálculo y calibración de la eficiencia de conversión de potencia (PCE).) con el ánimo de buscar grandes candidatas a moléculas orgánicas para su uso como sistemas donante-receptor en células solares. En particular, probamos una calibración del proceso gaussiano como un modelo ML en un conjunto de moléculas reportadas en la literatura [1] y discutimos algunos aspectos tanto de las propiedades químicas como de la ventaja de usar ML.
Keywords: Organic Solar Cell, Small Molecules, Machine Learning, Computational Chemistry, Quantum Systems.

2 Avances

ORCA es un programa flexible para química computacional que hace especial énfasis en propiedades espectroscópicas de moléculas de capa abierta. Trata una gran variedad de métodos de química cuántica desde métodos semiempíricos, la teoría del funcional de la densidad (Density Functional Theory, DFT), hasta métodos ab initio simples y de multireferencia, así como efectos relativísticos y medioambientales.



Figure 1: Logo del programa Orca

Para la ejecución de la solución presentada en el artículo se utilizaron las bases def2-SVP y los métodos BP86 y B3LYP, al consultar la documentación se encuentran todos disponibles, sin embargo una de las bases no se encuentra tal como la muestra el artículo, por lo que mientras se soluciona, se opta por utilizar en ambas la def2-SVP, la otra base era double-z def2-SVP

```
water1.inp
1  # my first orca computation of water
2  ! B3LYP def2-SVP Opt
3  *xyz 0 1
4  O 0.0 0.0 0.0
5  H 0.0 0.8 0.6
6  H 0.0 -0.8 0.6
7  *
```

Figure 2: Logo del programa Orca

Como se muestra en la anterior imagen el uso de orca para este sistema es simple en escritura, el paso posterior luego de comprobado que funciona la instalación, fue comunicar con el archivo en colab, sin embargo se encuentra en fase de despliegue del programa de orca para este proposito.