**Implementación de técnicas de machine learning para ayudar a optimizar sistemas moleculares en celdas solares**

A. Suarez-Guarnizo, C. Susa-Quintero

1,2 Departamento de Física, Universidad de Córdoba, Colombia

\*Email. [asuarezguarnizo@correo.unicordoba.edu.co](mailto:asuarezguarnizo@correo.unicordoba.edu.co)

**Abstract**

Las celdas solares nos muestran un camino interesante hacia el uso de la energía renovable, limpia con el medio ambiente, y que nos ayuda a mitigar el efecto o la huella que dejamos en el planeta, por lo tanto, se buscan formas eficientes para la conversión de energía solar en electricidad, tales como el uso de materiales, buscando las mejores propiedades que permitan la óptima conversión de energía. En este trabajo para dicho propósito utilizamos técnicas de química cuántica y el soporte de programación con modelos de inteligencia artificial y machine learning que nos permiten optimizar los cálculos y acercarnos a la realidad al calibrar resultados con modelos de regresión gaussianos que se desarrollan en código Python, para finalmente a través del modelo Scharber encontrar el PCE (eficiencia de conversión de potencia) y calibrar con inteligencia artificial para encontrar las mejores moléculas candidatas para sintetizar. Los resultados muestran que la inteligencia artificial ayuda a disminuir el RSME (error cuadrático medio) entre los valores reales y calculados, reduciendo así el número de moléculas candidatas a sintetizar, siendo este último un factor importante debido a la complejidad y el gasto de recursos que implicarían sintetizar un conjunto completo de moléculas que de acuerdo con el presente método serían inútiles de usar.

***Keywords:*** Machine Learning, Inteligencia artificial, Química, cuántica, DFT.