

Organiczne ogniwa fotowoltaiczne (ang. organic photovoltaics (OPV)) są tańszą i bardziej przyjazną dla środowiska alternatywą dla będących w powszechnym użyciu nieorganicznych ogniw fotowoltaicznych. Mniejsza sprawność konwersji energii (ang. power conversion efficiency (PCE)) w przypadku organicznych ogniw fotowoltaicznych jest rekompensowana przez prostą technologię ich tworzenia oraz niską wagę, co pozwala na pokrycie dużych powierzchni oraz budowanie elastycznych urządzeń do konwersji światła. Limitacje ogniw typu OPV, takie jak niska wartość współczynnika PCE oraz niekontrolowane utlenianie i redukcja będące głównym źródłem spadku wydajności, są tematem licznych badań naukowych na przestrzeni ostatnich lat. W rezultacie, co miesiąc powstają nowe, lepsze materiały i urządzenia służące do przetwarzania energii słonecznej na prąd. Tak szybki postęp jest możliwy dzięki lepszemu zrozumieniu procesów chemicznych i fizycznych odpowiedzialnych za wytwarzanie prądu z energii słonecznej. Z racji tego, że doświadczenia laboratoryjne z potencjalnie dużą liczbą różnych związków organicznych są bardzo czasochłonne, proces optymalizacji i preselekcji nowych organicznych związków fotowoltaicznych i ich składników budulcowych powinien być przyspieszony przy wykorzystaniu symulacji komputerowych w ramach chemii kwantowej. Obustronna współpraca pomiędzy teoretykami, którzy wskazują grupę potencjalnych kandydatów do syntezy i dalszych badań doświadczalnych przyczyni się do jeszcze większego rozwoju dziedziny organicznych ogniw fotowoltaicznych.

Rutynowe obliczenia kwantowo-chemiczne do modelowania struktur elektronowych związków typu OPV wykorzystują metody oparte na teorii funkcjonałów gęstości (ang. Density Functional Theory (DFT)) włączając w to ich zależny od czasu wariant, czego powodem jest niski koszt obliczeń wynikający z korzystnego skalowania tych metod. Niestety, dla pewnych grup związków, DFT nie działa poprawnie, dając wyniki które są dalekie od fizycznej i chemicznej rzeczywistości. Lepszy opis struktur elektronowych i właściwości związków typu OPV można uzyskać przy wykorzystaniu bardziej dokładnych i wiarygodnych metod funkcji falowej. Problem w tym, że rozmiary molekuł będących składnikami budulcowymi urządzeń typu OPV ogranicza ich zastosowanie jedynie do małych modelowych układów ze względu na niekorzystne skalowanie w/w obliczeń. Aby wypełnić brakującą lukę i wiarygodnie modelować struktury elektronowe dużych realistycznych związków OPV, użyte zostaną nowoczesne, dokładne, a zarazem obliczeniowo wydajne metody chemii kwantowej oparte na nowoczesnej parametryzacji funkcji falowej. Przyczyni się to do lepszego zrozumienia wielu związków OPV, których badanie nie byłoby możliwe przy użyciu standardowych metod chemii kwantowej.