

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

Andrés D. Suarez-Guarnizo 1*, Cristian E. Susa 1, Jose Dario Perea 2

October 1, 2020

1 Abstract

nannan

2 Descripción del proceso

Según lo estudiado en el artículo Design Principles and Top Non-Fullerene Acceptor Candidates for Organic Photovoltaics, vemos que se sigue la siguiente secuencia en la ejecución que lleva a las moléculas deseadas:

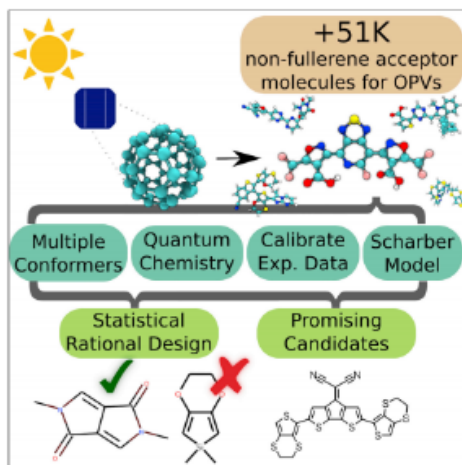


Figure 1: Secuencia del artículo

Es así que a través de unas moléculas definidas con anterioridad, las cuales se encuentran en el Data S1, en el siguiente enlace <https://doi.org/10.1016/j.joule.2017.10.006>. Se procede a realizar con los smiles descritos en la tabla S1, una muestra de conformers, los cuales se busca su minimal local energy a través de métodos de

mecánica molecular tal como el force field, que busca la reducción de la energía total descrita en la fórmula siguiente:

$$E_{tot} = E_{str} + E_{bend} + E_{oop} + E_{tors} + E_{cross} + E_{vdw} + E_{es} \quad (1)$$

Donde tenemos que para la stretching energy E_{str} se encuentra su valor a través de la fórmula (Cabe resaltar que la siguiente fórmula no se usa en los métodos como MMFF94, donde se términos cuadráticos y cúbicos):

$$E_{str} = \frac{1}{2} \sum_{bonds} k_b (r - r_0)^2 \quad (2)$$

Donde:

k_b = bond - stretching force constant

r = actual bond length

r_0 = defines equilibrium length

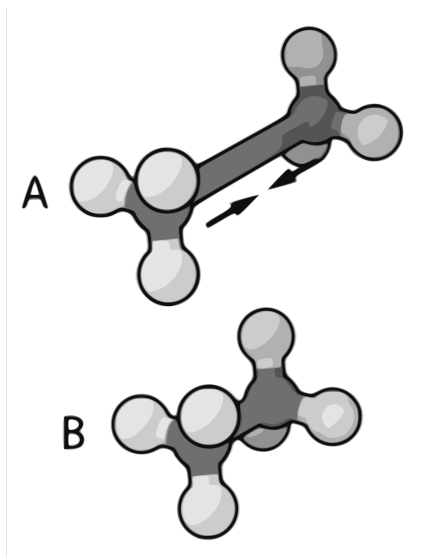


Figure 2: Bond Energy

Como podemos ver en la figura 2, y por la ecuación 2, lo ideal es disminuir la longitud actual de los enlaces a la longitud de equilibrio (la biografía y método para hallarla se encuentra en el siguiente [enlace](#). Ahora para la Angle Bending Energy, E_{bend} se encuentra su valor a través de la fórmula:

$$E_{bend} = \frac{1}{2} \sum_{angles} k_{\theta} (\theta - \theta_0)^2 \quad (3)$$

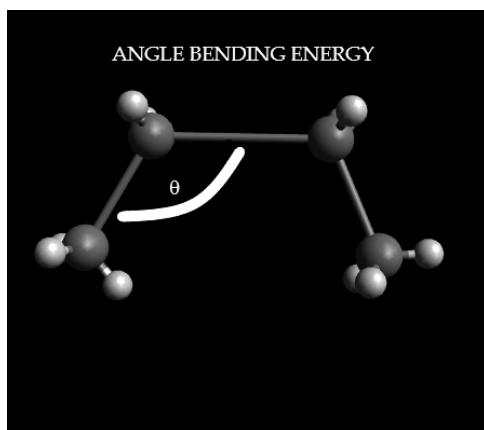


Figure 3: Bond Energy

3 Preguntas

¿La razón por la cual se crean conformers en un inicio, es para dar diferentes configuraciones desde las cuales al aplicar el MMFF se logre una mayor probabilidad de encontrar el mínimo global de la energía?