

Thème de mémoire :

Inverse molecular design of Organic Photovoltaics

Auteur: Patrick Sorrel Mvoto Kongo

Encadreur: Pr S.G Nana Engo

Mentor: Cabrel Tegua

Septembre 2023

Contents

1	Introduction	2
2	Composantes du projet de recherche	3
2.1	Definition des mots-cles	3
2.2	Objet de la recherche	5
2.3	Question de recherche	5
2.4	Problème de recherche	5
2.5	Problématique	5
2.6	Objectif général	5
2.7	Objectifs spécifiques	6
2.8	Hypothèses de recherche	6
2.9	Résultats	6
3	Méthode et logiciels	7
4	Revue de littérature	8
5	Chronogramme	8
6	Re-formulations de notre sujet	8
7	Conclusion	9

1 Introduction

Le domaine de la conception moléculaire inverse du photovoltaïque organique est un sujet de recherche en plein essor. Les chercheurs utilisent des outils tels que la modélisation théorique, l'apprentissage automatique de l'intelligence artificielle pour concevoir de nouvelles molécules d'OSC (cellules solaires organiques) qui présentent des performances améliorées. Dans cette présentation, nous aborderons différents aspects de cette recherche et répondrons aux questions soulevées lors de nos discussions précédentes.

2 Composantes du projet de recherche

2.1 Definition des mots-cles

les mots cles notre travail sont : Photovoltaïque Organique (OPV), Efficacité de Conversion de Puissance (PCE), criblage virtuel à haut débit, conception moléculaire inverse

- photo-voltaïque Organique (OPV): sont une classe de dispositifs photo-voltaïque dont au moins la couche active est constituée de molécules organiques pour convertir la lumière solaire en électricité.

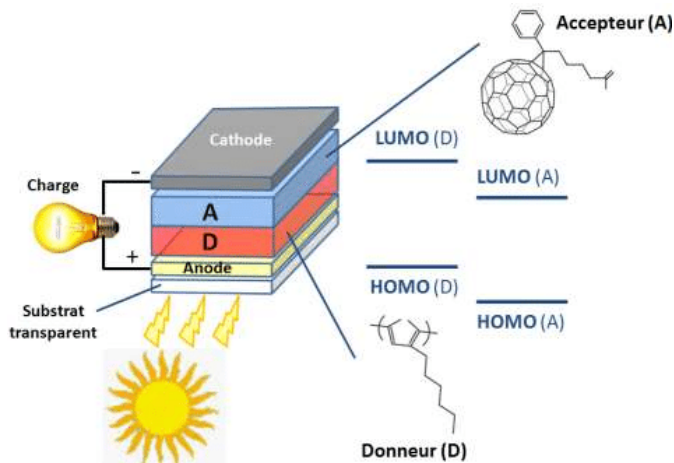


Figure 1: Structure d'une cellule photovoltaïque organique type conventionnelle et des niveaux d'énergie associés à la couche photoactive D/A

- Power Conversion Efficiency (PCE): C'est une mesure de l'efficacité avec laquelle une cellule photo-voltaïque convertit la lumière en électricité. Elle est définie comme le rapport entre la puissance électrique produite par la cellule et la puissance lumineuse incidente.

- high-throughput virtual screening (VHTS): C'est une technique informatique utilisée pour évaluer rapidement et à grande échelle un grand nombre de molécules pour leurs propriétés biologiques ou physico-chimiques. Il est utilisé dans une variété d'applications, notamment la découverte de médicaments, la conception de matériaux et la recherche fondamentale.

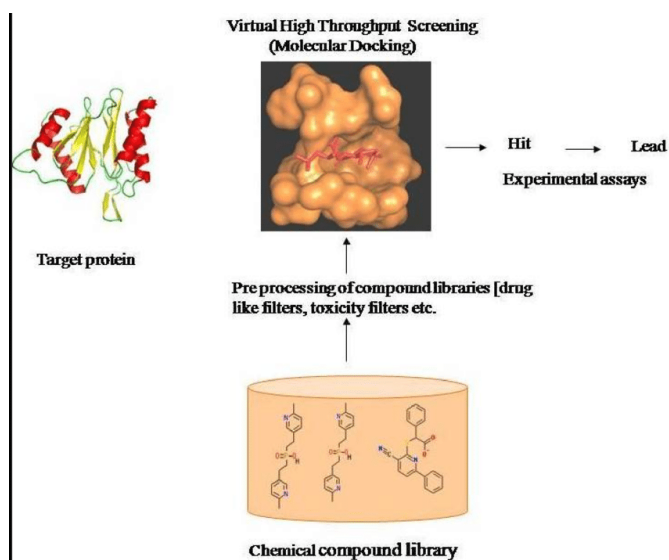


Figure 2: Flux de travail de criblage virtuel à haut débit

- Inverse molecular design: approche utilisée en chimie et en science des matériaux qui permet de concevoir des molécules avec des propriétés spécifiques.

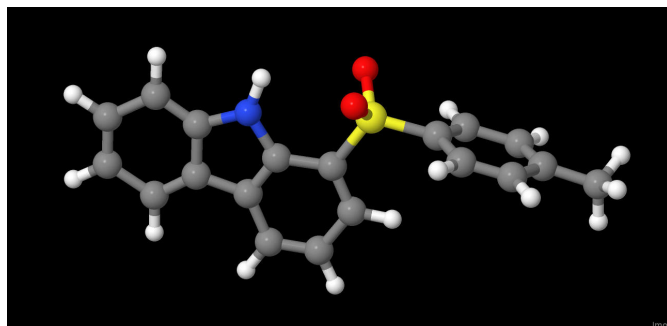


Figure 3: N-(4-bromophényl)-3,6-bis(4-(diphénylamino)phényl)-9-éthyl-9H-carbazole-2-sulfonamide

2.2 Objet de la recherche

L'objet de notre recherche est la conception de molécules inverses pour les cellules solaires organiques. Nous cherchons à explorer les différentes stratégies moléculaires permettant d'améliorer l'efficacité de conversion de la lumière solaire en électricité dans les OSC.

2.3 Question de recherche

Notre question de recherche principale est la suivante : Comment concevoir des molécules inverses pour les cellules solaires organiques afin d'améliorer leur efficacité de conversion de la lumière en électricité ?

2.4 Problème de recherche

Le problème de recherche auquel nous sommes confrontés est la nécessité d'améliorer les rendements des cellules solaires organiques pour les rendre plus compétitives par rapport aux technologies de conversion d'énergie solaire existantes.

2.5 Problématique

La problématique à laquelle nous nous intéressons est la conception de molécules inverses qui présentent des propriétés améliorées en termes d'absorption de la lumière, de séparation des charges et de transport des charges, afin d'optimiser l'efficacité de conversion des OSC.

2.6 Objectif général

L'objectif général de notre recherche est de concevoir des molécules inverses pour les cellules solaires organiques qui présentent des performances améliorées en termes d'efficacité de conversion de la lumière en électricité.

2.7 Objectifs spécifiques

Nos objectifs spécifiques sont les suivants :

- Analyser les mécanismes de conversion de la lumière en électricité dans les cellules solaires organiques.
- Identifier les paramètres moléculaires influençant l'efficacité de conversion des OSC.
- Utiliser des techniques de modélisation théorique pour concevoir des molécules inverses avec des propriétés améliorées.
- Évaluer les performances des nouvelles molécules inverses en termes d'efficacité de conversion de la lumière en électricité.

2.8 Hypothèses de recherche

Nos hypothèses de recherche sont les suivantes :

- La conception de molécules inverses avec un positionnement optimal du groupe accepteur d'électrons améliorera l'efficacité de conversion des cellules solaires organiques.
- L'utilisation de techniques d'apprentissage automatique et d'intelligence artificielle facilitera l'identification de molécules inverses prometteuses.

2.9 Résultats

Nous prévoyons d'obtenir les résultats suivants :

- Une meilleure compréhension des mécanismes de conversion de la lumière en électricité dans les cellules solaires organiques.
- L'identification des paramètres moléculaires clés pour l'efficacité de conversion des OSC.

- La conception de nouvelles molécules inverses avec des performances améliorées.
- L'évaluation des performances des nouvelles molécules inverses par rapport aux matériaux existants.

3 Méthode et logiciels

- En utilisant le modèle de Scharber qui permet d'estimer la PCE d'un OSC à jonction unique ,en optimisant les paramètres tels que les niveaux d'énergie HOMO du donneur et LUMO de l'accepteur, la mobilité des charges et la recombinaison des charges et Le SAScore est un score qui quantifie l'accessibilité synthétique d'une molécule ,en filtrant et en priorisant les structures moléculaires qui sont à la fois prometteuses du point de vue des propriétés photo-voltaïque et réalisables sur le plan synthétique,
- La simulation avec le machine learning permet aux chercheurs de concevoir des OSC plus efficaces, plus accessibles et plus durables, ce qui peut aider à identifier les matériaux les plus prometteurs pour les cellules solaires. L'intelligence artificielle, l'algorithme génétique, les modèles génératifs profonds et les CNN sont utilisés pour concevoir de nouvelles molécules de photovoltaïque organique.

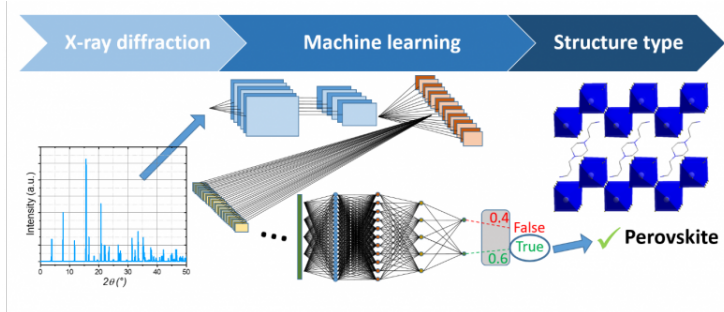


Figure 4: Cellule solaire organique générée par algorithme génétique

4 Revue de littérature

Dans cette section, vous pouvez présenter une brève revue de littérature en mettant en évidence les travaux antérieurs sur la conception moléculaire inverse des OSC. Discutez des avantages et des limites de ces travaux pour mettre en évidence la pertinence de votre propre recherche.

5 Chronogramme

Notre recherche suivra les étapes suivantes

1. Analyse bibliographique sur les mécanismes de conversion de la lumière en électricité dans les cellules solaires organiques.
2. Étude des paramètres moléculaires influençant l'efficacité de conversion des OSC.
3. Utilisation de techniques de modélisation théorique pour concevoir des molécules inverses.
4. Évaluation de la performance des nouvelles molécules inverses grâce à des simulations et des expériences.
5. Analyse des résultats et interprétation des données.
6. Rédaction du rapport de recherche.

6 Re-formulations de notre sujet

Concevoir des molécules dotées de propriétés électroniques spécifiques grâce les travaux de modélisation de Scharber et l'utilisation du SAscore en utilisant le machine learning, l'algorithme génétique, les modèles génératifs profonds et les CNN pour concevoir de nouvelles molécules

7 Conclusion

La conception moléculaire inverse du photovoltaïque organique est un domaine de recherche en plein essor. En utilisant des outils tels que la modélisation théorique, l'apprentissage automatique et l'intelligence artificielle, les chercheurs peuvent concevoir de nouvelles molécules d'OSC qui présentent des propriétés améliorées en termes d'absorption de la lumière, de séparation des charges et de transport des charges. Ces avancées peuvent contribuer à l'amélioration des rendements des cellules solaires organiques et à leur adoption plus large dans l'industrie de l'énergie solaire.