

Début : Proposition d'une structure moléculaire (chaîne SMILES)

Génération des coordonnées  
cartésiennes avec RDKit

Recherche de conformateurs avec Crest

Optimisation de la géométrie avec XTB

Calculs DFT, HF, MDA avec PySCF

Calcul des propriétés HOMO,  
LUMO, gap avec XTB

Évaluation de la synthèse (SAScores)

Estimation du PCE  
avec le modèle Scharber

Analyse et comparaison des résultats

Fin : Identification des matériaux prometteurs

