

PHD PROPOSAL

Deep learning studies and predictions of electronic and electrochemical properties of organic (macro)molecules

Optimizing the properties of organic materials used in conversion technologies (photovoltaics, thermoelectricity, field-effect transistors) and energy storage (electrodes for supercapacitors or organic batteries) involves examining a very large number of candidate molecules, which entails major investments in experimental time and resources.

Artificial intelligence techniques have also proved their worth in chemistry, for screening molecules or developing new compositions in fields as diverse as metallurgy and pharmaceuticals. These approaches make it possible to drastically reduce the amount of experimental work required, and to direct research towards particularly promising candidate molecules.

The aim of this thesis is to develop a strategy based on artificial intelligence (AI) techniques to build models capable of predicting the structure and composition of new molecules with targeted properties according to the applications envisaged, in the field of pi-conjugated organic molecules for energy conversion and storage.

The aim of this thesis is to :

- build the database required for the AI model learning phase. This phase will be based on bibliographical work and DFT calculations to predict the properties of interest of the molecules.
- develop AI methods (neural networks, random forest, etc.) capable of predicting the physico-chemical properties of relevant organic molecules.

Candidate molecules can be synthesized and characterized using the laboratory's experimental resources.

Profiles sought

Engineering or Master's degree in theoretical or numerical chemistry (DFT method). Knowledge of organic materials and their specific properties would be appreciated.

As the thesis is almost exclusively numerical, a taste for modeling and computer development is essential.

Conditions :

The 3-year Region or Ministry thesis will be carried out mainly in Tours, at the PCM2E laboratory (Physico-Chimie des Mat riaux et des Electrolytes pour l'Energie, Universit  de Tours). Several stays in Paris are planned for collaboration with the ITODYS laboratory (Laboratoire Interfaces Traitements Organisation et DYnamique des Syst mes, Universit  Paris Diderot, CNRS).

Start of thesis : September/October 2024.

Contact :

Marc Bl try : marc.bletry@univ-tours.fr

PROPOSITION DE THÈSE

Étude et prévision par deep learning de propriétés électroniques et électrochimiques de (macro)molécules organiques

L'optimisation des propriétés des matériaux organiques utilisés pour les technologies de conversion (photovoltaïque, thermoélectricité, transistors à effets de champ) et de stockage de l'énergie (électrodes pour supercondensateurs ou pour batteries organiques) implique d'examiner un nombre très élevé de molécules candidates, ce qui entraîne des investissements importants en temps et en moyen expérimentaux.

Par ailleurs, les techniques d'intelligence artificielle ont montré leur pertinence en chimie pour le screening de molécules ou la mise au point de nouvelles compositions dans des champs aussi différents que la métallurgie ou la pharmacie. Ces approches permettent de réduire drastiquement le travail expérimental et d'orienter la recherche vers des molécules candidates particulièrement prometteuses *a priori*.

Le but de cette thèse est de développer une stratégie fondée sur des techniques d'intelligence artificielle (IA) pour mettre au point des modèles capables de prédire la structure et la composition de nouvelles molécules aux propriétés ciblées selon les applications envisagées, dans le domaine des molécules organiques pi-conjuguées pour la conversion et le stockage de l'énergie.

L'objectif du travail de thèse est de :

- constituer une base de données nécessaire pour la phase d'apprentissage des modèles d'IA. Cette étape s'appuiera sur un travail bibliographique et sur des calculs DFT permettant la prédiction des propriétés d'intérêt des molécules
- développer des méthodes d'IA (réseaux de neurones, random forest,...) à même de prédire les propriétés physico-chimiques des molécules organiques pertinentes.

Les molécules candidates pourront être synthétisées et caractérisées grâce aux moyens expérimentaux du laboratoire.

Profils recherchés :

École d'ingénieur ou master 2 en chimie théorique ou numérique (méthode DFT). Une connaissance des matériaux organiques et de leurs propriétés spécifiques serait appréciée. La thèse étant presque exclusivement numérique, un goût pour la modélisation et le développement informatique est essentiel.

Conditions :

La thèse Région ou Ministère d'une durée de 3 ans s'effectuera principalement à Tours, au laboratoire PCM2E (Physico-Chimie des Matériaux et des Electrolytes pour l'Energie, Université de Tours). Plusieurs séjours sont à prévoir à Paris pour la collaboration avec le laboratoire ITODYS (laboratoire Interfaces Traitements Organisation et DYNamique des Systèmes, Université Paris Diderot, CNRS). Début de thèse : septembre/octobre 2024.

Contact :

Marc Blétry : marc.bletry@univ-tours.fr