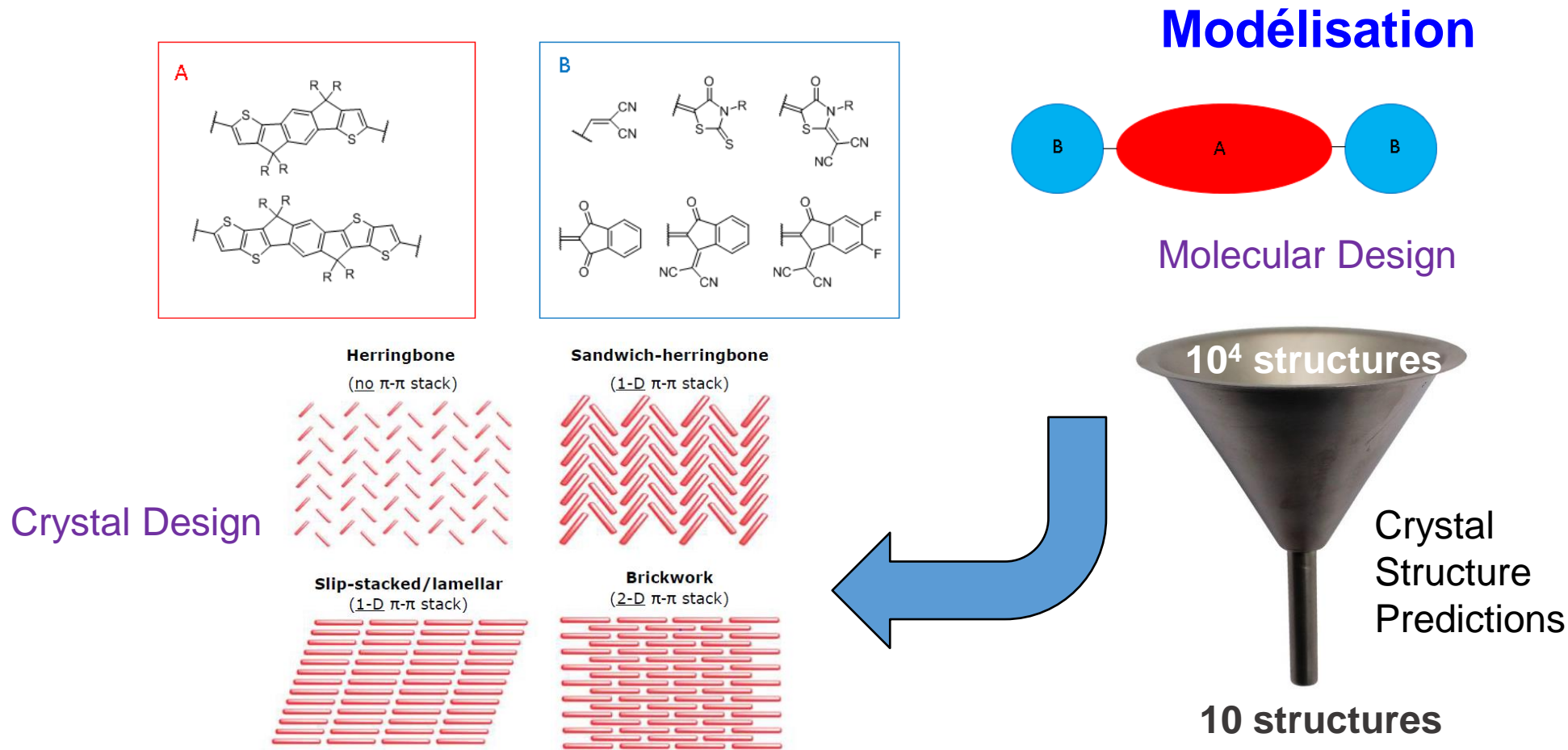


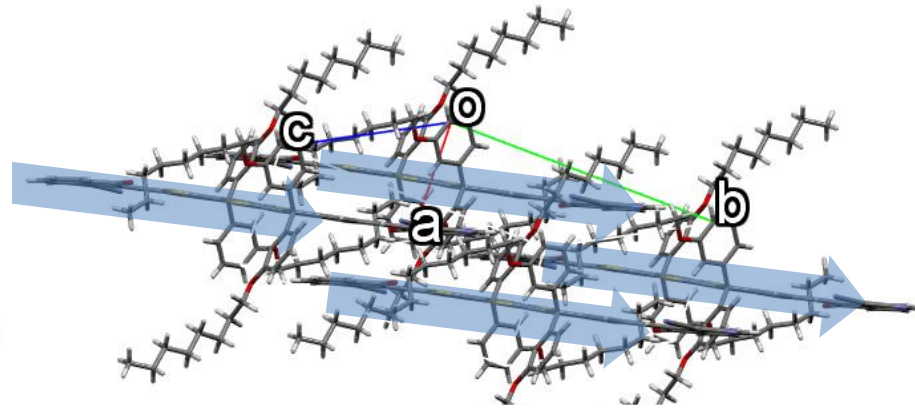
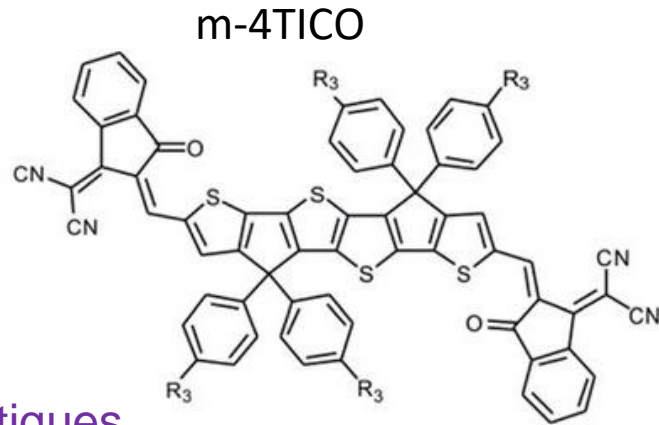
# Prédiction de structures cristallines de molécules conjuguées pour le solaire organique et calcul de propriétés optiques par résolution d'Hamiltoniens modèles



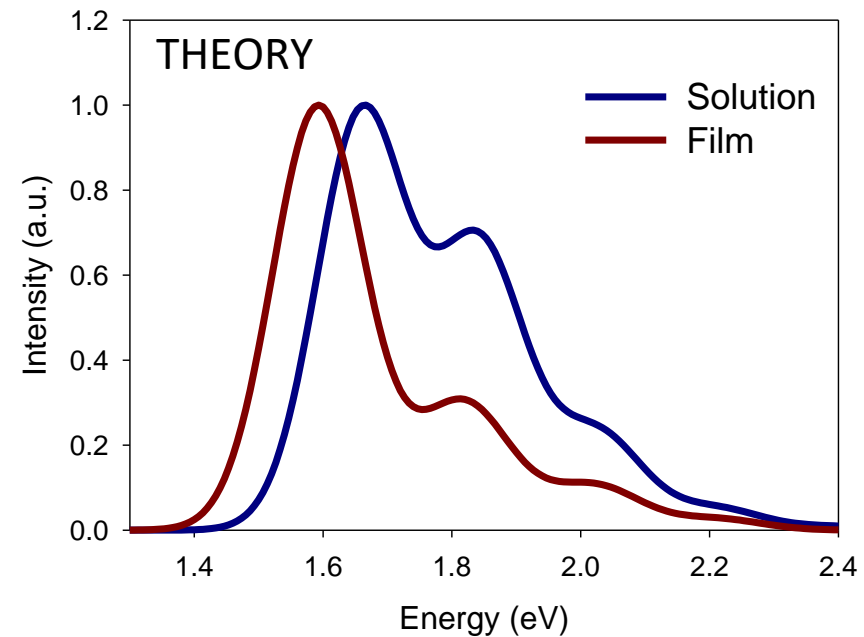
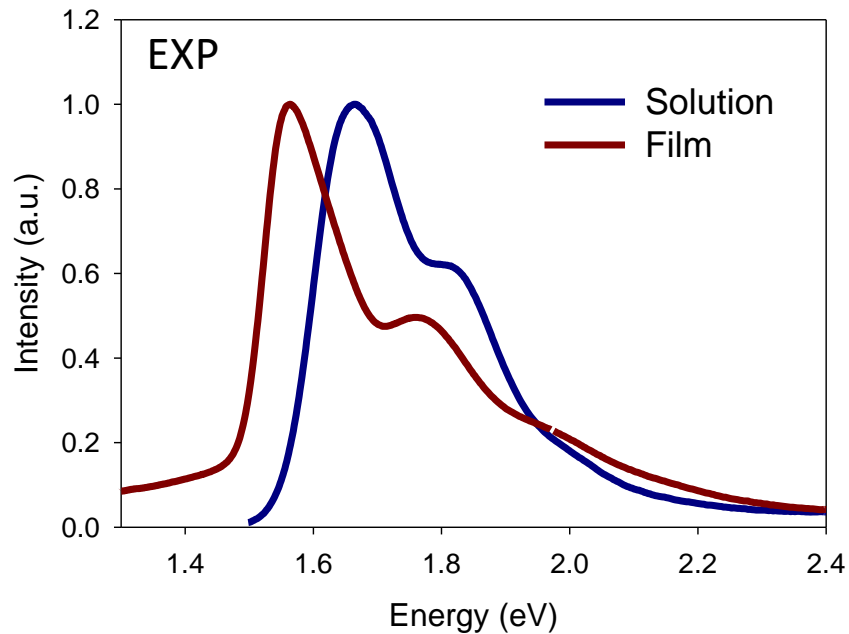
**Sujet:** Identification de structures polymorphiques de molécules accepteurs d'électrons et relation au comportement photovoltaïque

$$H = (\omega_{0-0} + \lambda^2 \omega_0) |n\rangle\langle n| + \lambda \omega_0 \sum_n (b_n^\dagger + b_n) |n\rangle\langle n| + \omega_0 \sum_n b_n^\dagger b_n + \sum_{m,n} J_{mn} |m\rangle\langle n|$$

Hamiltonien modèle



Calcul de spectres optiques



Formation d'agrégats J