

КИЇВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ

ІМЕНІ ТАРАСА ШЕВЧЕНКА

НАВЧАЛЬНО-НАУКОВИЙ ІНСТИТУТ ВИСОКИХ ТЕХНОЛОГІЙ

Завідувач кафедри нанофізики конденсованих середовищ

проф. Валерій Антонович Скришевський

Протокол № _____ засідання кафедри

Від «_____» _____ 2023 р.

**Розробка програмного рішення для пошуку оптимальних
органічних напівпровідників за енергією граничних
молекулярних орбіталей для органічної фотовольтаїки**

Випускна кваліфікаційна робота бакалавра

студента спеціальності

105 Прикладна фізика та наноматеріали

ОП «Нанофізика та наносенсорика»

Вознюка Андрія Михайловича

Науковий керівник

доцент кафедри

супрамолекулярної хімії

к.хім.н. Булавко Геннадій Володимирович

Оцінка захисту роботи

Київ – 2023 р.

АНОТАЦІЯ

Вознюк А.М. *Розробка програмного рішення для пошуку оптимальних органічних напівпровідників за енергією граничних молекулярних орбіталей для органічної фотовольтаїки.* – Випускна кваліфікаційна робота бакалавра за спеціальністю 105 Прикладна фізика та наноматеріали ОП «Нанофізика та наносенсорика». 48 ст., 12 рис., 44 джерела.

У ході роботи проведено стислий теоретичний огляд полімерів, а саме основи їх хімії та принципи роботи. Проведено огляд органічних сонячних елементів та їх переваг/недоліків, роль донорів та акцепторів у їх складі. Також детально розглянуто рівні HOMO LUMO, зокрема їх роль у ОСЕ. Розроблено програму для пошуку оптимальних донорів за значеннями рівнів HOMO LUMO акцепторного полімера PCBM.

Ключові слова: **полімери, PCBM, органічні сонячні елементи, ВЗМО, НВМО, донор, акцептор, заборонена зона (ЗЗ), реляційні бази даних, SQL, парсер, метод AM1, python, Tkinter, GUI.**

ABSTRACT

Vozniuk A.M. Development of a software solution to search for optimal organic semiconductors based on the energy of the frontier molecular orbitals for organic photovoltaics. - Bachelor's thesis on the specialty 105 Applied Physics and Nanomaterials EP "Nanophysics and Nanosensory". 48 pp., 12 figs., 44 sources.

In the course of the work, a brief theoretical overview of polymers was carried out, namely the basis of their chemistry and principles of operation. An overview of organic solar elements and their advantages/disadvantages, the role of donors and acceptors in their composition was conducted. HOMO LUMO levels are also discussed in detail, in particular their role in OSE. A program has been developed to search for optimal donors based on the values of the HOMO LUMO levels of the PCBM acceptor polymer.

Key words: **polymers, PCBM, organic solar elements, HOMO, LUMO, donor, acceptor, forbidden zone, relational databases, SQL, parser, AM1 method, python, Tkinter, GUI.**

Зміст

ВСТУП.....	6
1. ТЕОРЕТИЧНА ЧАСТИНА.....	7
1.1. Огляд та основи хімії полімерів: Пояснення основних принципів, структура полімерів, типи полімерів, їх властивості та використання у різних галузях.....	9
1.2. Огляд та принципи роботи полімерів: їх структура, типи та механізми роботи.....	10
1.3 Поняття і пояснення рівнів НОМО і LUMO: що це таке, як вони визначають властивості полімеру, їх роль у органічних сонячних елементах.....	13
1.4. Огляд органічних сонячних елементів та їх переваг/недоліків: що вони таке, як працюють, їх переваги та обмеження у порівнянні із традиційними сонячними елементами.....	15
1.5. Роль донорів і акцепторів у органічних сонячних елементах: що таке донори та акцептори, їх роль у сонячних елементах, як вибір донора/акцептора впливає на ефективність сонячного елемента.....	19
2. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧІ.....	21
3. ПРАКТИЧНА ЧАСТИНА.....	24
3.1. Принципи роботи та реалізації бази даних: пояснення структури бази даних, що використовується в програмі, і її ролі в пошуку відповідних донорів.....	24
3.2. Парсер даних з веб-сайту для створення бази даних про молекулярні властивості хімічних речовин.....	25
3.3. Програма для заповнення бази даних.....	31
3.4. Створення головної програми для пошуку полімерних донорів за допомогою Δ НОМО та Δ LUMO. Детальне пояснення алгоритму пошуку в програмі: як працює алгоритм, його ефективність і обмеження. Роль допускає в	

пошук відповідних донорів: що таке допуск, як він визначається і як впливає на результати пошуку.....	36
3.5. Можливі напрямки для подальшого розвитку і вдосконалення програми: обґрунтування потенційних поліпшень і розширення функціональності програми, включаючи врахування додаткових параметрів, поліпшення алгоритму пошуку і т.д.....	43
ВИСНОВКИ	45
СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ.....	46

ВСТУП

Історія сучасної фотовольтаїки починається у 1953 році зі спостереження за виникненням електричного струму в зразках, забруднених домішками кремнію, які були опромінені сонячним світлом. Ефект спостерігався у дослідницькому центрі “Bell Labs”, де була розроблена перша сонячна панель. Важливість цього напряму досліджень пов’язана зі зменшенням запасів Землі традиційних джерел енергії (вуглеводнів), що ставить перед людством питання пошуку альтернативних джерел енергії. Серед них сьогодні провідна роль відводиться сонячній енергетиці, великі перспективи якої визначають вільна енергія, що надходить від Сонця, а також її обсяг. Підраховано, що енергетичні потреби всього людства сьогодні становлять близько 20 ТВт, тоді як Земля отримує сонячну енергію потужністю близько 10^5 ТВт[1].

Сучасні перетворювачі сонячної енергії - це сонячні панелі, побудовані з використанням неорганічних напівпровідникових матеріалів - кристалічного та аморфного Si, мають ефективність перетворення світла $\sim 25\%$ і термін служби 25-30 рр. , але також вони мають свої недоліки, що обумовлює їх відносно низьку поширеність. Це, перш за все, висока вартість промислового виробництва сонячних панелей з використанням аморфного та кристалічного кремнію, через що вартість одержаної таким чином енергії для споживача в кілька разів перевищує енергію, отриману з традиційних джерел (теплових, ядерних). Тобто, економічна доцільність використання сонячної енергії матиме місце лише у випадках віддаленості від традиційних джерел енергії[2].

Великі надії покладаються на **органічні фотовольтаїчні матеріали** та сонячні панелі на їх основі. Основними їх перевагами є простота виготовлення

і, відповідно, низька вартість промислового виробництва та низька вартість енергії для споживача. Ще одна безсумнівна перевага – можливість виготовляти гнучкі панелі з органічними сонячними панелями, що для кремнієвих батарей неможливо, оскільки вони тверді та крихкі, а тому мають велику вагу. Органічні напівпровідники утворюють гнучкі та пластикові плівки, що дозволяє використовувати їх у портативних компактних перетворювачах сонячної енергії, а також інтегрувати в одяг, покрівельні матеріали, покриття різноманітних виробів[3].

Органічні фотовольтаїчні матеріали відомі близько 30 років і лише зараз починають надходити у комерційне використання, значно поступаючись ефективності та терміну служби Si. Незважаючи на досягнення високих квантових виходів для плівок, ККД конструкцій не перевищує 11%, а час експлуатації – 5-7 років, що зумовлено швидкою деградацією, внаслідок окислення та реакцій між компонентами структур. З метою вирішення цих завдань, проводяться активні дослідження різноманітних матеріалів і схем побудови сонячних елементів на основі органічних напівпровідників[4].

Основною проблемою при дослідженні *органічних фотовольтаїчних структур* є неможливість теоретичного розрахунку параметрів майбутніх елементів. Тому єдиними способами покращення їх характеристик є експериментальні дослідження з якомога більшою кількістю різноманітних речовин, геометричних параметрів зразків та інших факторів. В результаті можна отримати або певні результати за відповідними параметрами, які визначають напрямок подальшого руху в цій зоні, або, за наявності, встановити закономірності, що дозволяють зробити певні теоретичні прогнози результатів.

Органічні напівпровідники зазвичай розчиняються в органічних розчинниках, що дозволяє використовувати їх як «рідкі чорнила» і наносити на гнучкі полімерні підкладки. Ця технологія популярна в західних країнах.

Органічна фотовольтаїка – перспективна галузь. Великі компанії, такі як Siemens, Sharp, Konarka Technologies, вже розробляють програму впровадження органічних сонячних панелей[5].

1. ТЕОРЕТИЧНА ЧАСТИНА

Починаючи з 90-их рр. , з метою підвищення ефективності сонячних батарей шаруватого типу, проводяться дослідження різноманітних органічних матеріалів. Помітного прогресу вдалося досягти використовуючи фотовольтаїчні структури на основі систем полімер-фулерен. Такі структури достатньо дешеві у виготовленні та мають гарні фізико-механічні властивості (гнучкість та легкість). Фулерен є сильним акцептором, а його сферична будова перешкоджає рекомбінації фотогенерованих зарядів, що і забезпечує високу ефективність батарей. Одні з найефективніших фотовольтаїчних приладів отримані з використанням сумішей похідних фулерена та спряжених полімерів. Наразі найпоширенішими матеріалами, що використовуються в якості донорів, є поліфеніленвінілен (PPV) (рис. 1.0.1.а) та полі-3-н-гексилтіофен (РЗНТ) (рис. 1.0.1.б), а в якості акцептора використовується метиловий естер [6,6]-феніл- C_{61} -масляної кислоти (PCBM) (рис. 1.0.1.в)[6,8,10].

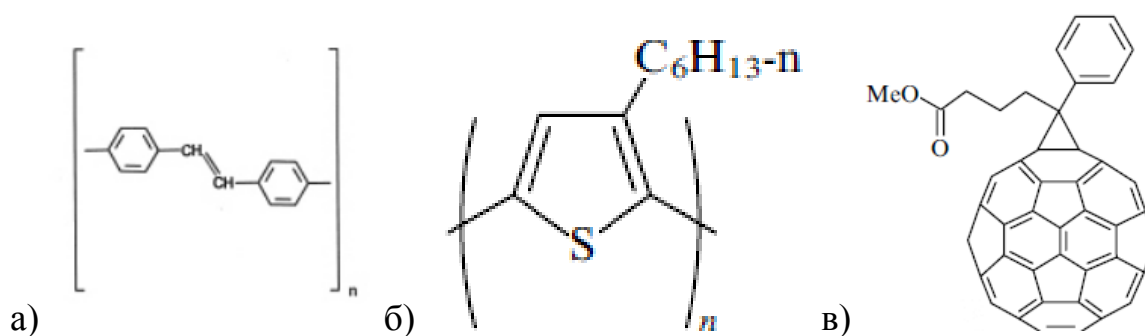


Рис. 1.0.1. а) PPV; б) P3HT; в) PCBM.

1.1. Огляд та основи хімії полімерів: Пояснення основних принципів, структура полімерів, типи полімерів, їх властивості та використання у різних галузях

Полімери - це великі молекули, що складаються з підключених одиниць, що повторюються, які називаються мономерами. Цей процес, відомий як полімеризація, створює довгі ланцюги молекул, які можуть мати різну довжину, структуру та хімічні властивості. Серед основних типів полімерів можна виділити позитивні (наприклад, поліетилен), негативні (наприклад, полівінілхлорид) та нейтральні (наприклад, полістирол). Кожен тип полімеру має свої характерні властивості та використовується у різних сферах. Полімери широко використовуються в сучасному світі завдяки своїм унікальним властивостям. Вони можуть бути високою міцністю, гнучкими, термостабільними, електропровідними, а також мати властивості, що змінюються в залежності від зовнішнього середовища. В галузі органічної електроніки полімери є ключовими матеріалами для виробництва різних пристроїв, у тому числі органічних світлодіодів (OLED), органічних транзисторів та органічних сонячних батарей. Вони пропонують переваги, такі як гнучкість, низька вартість, можливість виготовлення великих панелей та потенційно висока ефективність[32,44].

1.2. Огляд та принципи роботи полімерів: їх структура, типи та механізми роботи

Характерні властивості полімерів визначаються їхньою молекулярною структурою. При цьому важливі такі характеристики, як довжина ланцюга полімеру, його гілка, хімічний склад мономерів та їх послідовність ланцюга, а також просторова конфігурація ланцюга. У низькомолекулярних речовин властивості багато в чому визначаються взаємодією між окремими молекулами, тоді як у полімерів велику роль грає структура самої полімерної ланцюга. До основних структурних типів полімерів відносяться лінійні, гіллясті, зв'язані (сітчасті) та зірчасті полімери[10,12]. Структура полімеру дуже впливає на його властивості. Наприклад, лінійні полімери, такі як поліетилен, є термопластами, що означає, що вони можуть плавитися і формуватися під дією тепла. З іншого боку, пов'язані полімери, такі як полістирол, термореактивні, що означає, що вони не плавляться при нагріванні. Крім того, хімічна структура мономерів також має важливе значення. Наприклад, наявність електронних донорних і акцепторних груп у мономерах може забезпечити полімери з кондуктивними властивостями, що важливо для деяких застосувань, таких як органічна електроніка[33,38].

Полімери бувають різних типів. Наприклад:

- Лінійні полімери

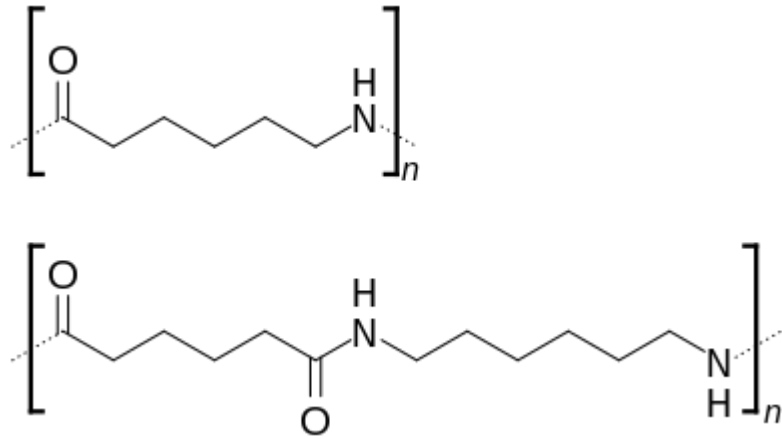


Рис. 1.2.1. Нейлон – приклад лінійного полімера.

Це полімери, де кожен мономер у ланцюзі з'єднаний з двома іншими, з формуванням простої, нерозгалуженої структури. Прикладом лінійного полімеру може бути поліетилен.

- Гілкуваті полімери

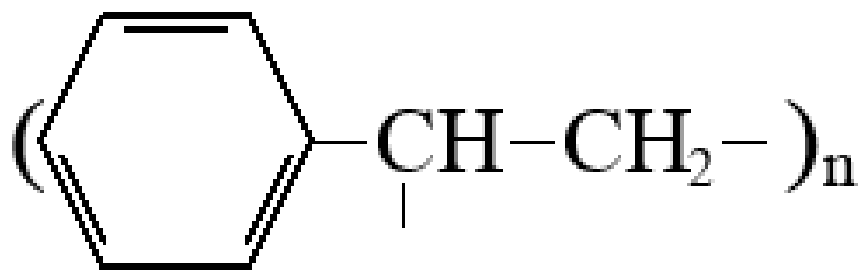


Рис. 1.2.2. Полістирол - приклад гілкуватого полімера.

У цих полімерах основний ланцюг має бічні гілки, що містять додаткові мономерні. Гілки полімери можуть включати такі матеріали, як поліпропілен.

- Тривимірні полімери

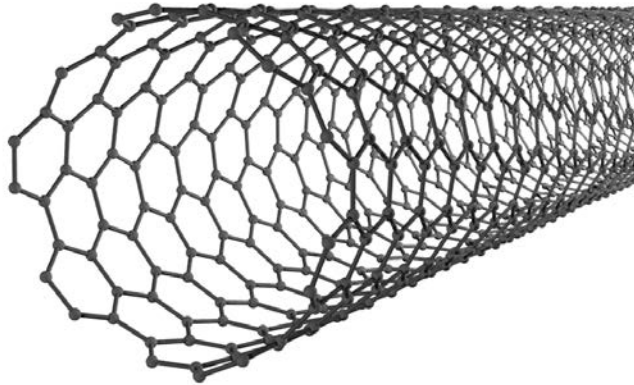


Рис.1.2.3. Вуглецева нанотрубка – приклад тривимірного полімера.

Ці полімери мають тривимірну мережу зв'язків між ланцюгами полімерів, що формують тривимірну структуру. Прикладами пов'язаних полімерів можуть бути епоксидні смоли.

- Зірчасті полімери

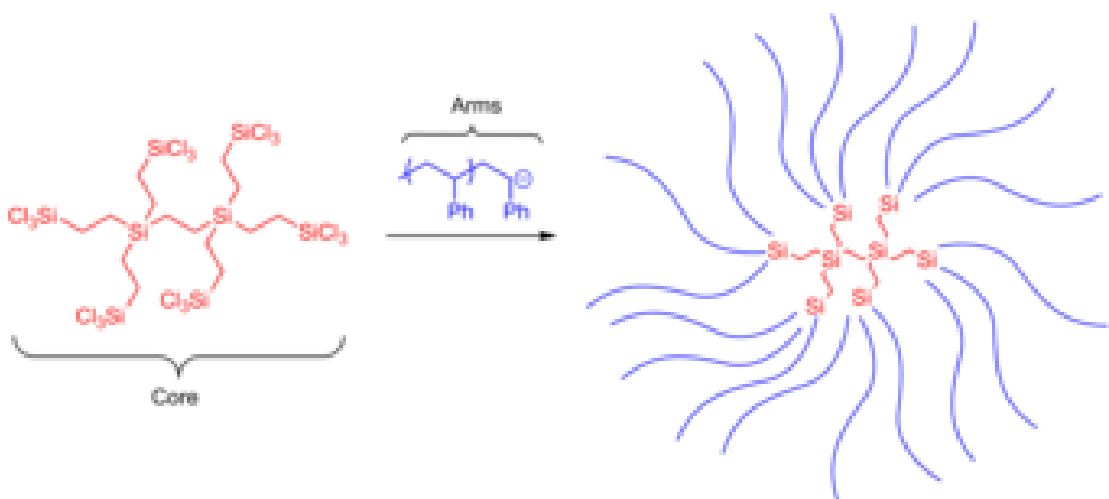


Рис.1.2.4. Приклад конвергентного синтезу з використанням ядра, отриманого з хлорсилану та аніонної гілки. Зірчастий полімер.

У цих полімерах багато ланцюгів полімерів походять від одного центрального ядра, формуючи структуру, подібну до зірки[11,37].

1.3. Поняття і пояснення рівнів НОМО і LUMO: що це таке, як вони визначають властивості полімеру, їх роль у органічних сонячних елементах.

НОМО та LUMO — це аббревіатури, які використовуються в хімії та означають «найвищу зайняту молекулярну орбіталь» і «найнижчу незайняту молекулярну орбіталь» відповідно. НОМО - це енергетичний рівень, на якому електрони можуть збуджуватися або переноситися. LUMO — це найближчий енергетичний рівень, на якому можуть перебувати електрони після збудження. «Проміжок» між ВЗМО (НОМО) та НСВМ (LUMO) — це різниця в енергії між ними. Цей «зазор» часто називають «енергетичною щілиною» або «забороненою зоною», і він дуже важливий для визначення хімічних і фізичних властивостей молекул. Наприклад, молекули з великими енергетичними проміжками, як правило, є ізоляторами, тоді як молекули з малими енергетичними проміжками можуть бути напівпровідниками або провідниками.

Полімерні донори відіграють важливу роль органічних сонячних елементах. Вони відповідають за поглинання світла та перенесення екситованих електронів до акцептора. Вибір полімерного донора в органічному сонячному елементі – критичний крок, який може вплинути на загальну продуктивність пристрою. Деякі важливі характеристики полімерного донора, які слід врахувати при його виборі, включають його поглинаючу здатність світла, його НОМО та LUMO рівні, його стабільність та обробку[36,39].

До найбільш поширених полімерних донорів, що використовуються в сучасних ОСЕ, відносяться полі(3-гексилтіофен) (P3HT), полі[(5,6-дифеніл-1,2,4-триазин-7,7-диіл)alt-(3,3''-дигексил-2,2':5',2":5",2'''-кватертіофен)] (PDTQT), полі[(4,8-біс(5-(2-етилгексил)))тіофен-2-іл)бензо[1,2-b:4,5-b'] дітіофен-2,6-дііл)alt-(3-етилгексилтіофен-2,5-диіл)] (PBDDTT) та інші. При

виборі правильного полімерного донора важливо знати його характеристики та зрозуміти, як вони впливають на роботу сонячного органічного елемента[37].

Одним із ключових аспектів при виборі донора є його співвідношення рівнів енергії НОМО (найвища зайнята молекулярна орбіталь) і LUMO (найнижча вакантна молекулярна орбіталь). Рівні НОМО та LUMO відповідають за енергетичний зазор (заборонену зону) матеріалу, який, у свою чергу, визначає спектральну чутливість донора до світла.

Наприклад, полімери з великим значенням забороненої зони зазвичай поглинають на коротших довжинах хвиль (більше «блакитних» областей спектру), тоді як полімери з невеликою ЗЗ поглинають на більших довжинах хвиль (більше «червоних» областей спектру).

Важливо, щоб донор і акцептор мали сумісні рівні НОМО і LUMO, щоб сприяти ефективному перенесенню збуджених електронів між матеріалами. Несумісність між рівнями НОМО та LUMO донора та акцептора може призвести до втрат енергії через неефективну передачу збуджених електронів, що знижує ефективність перетворення світла в електричну енергію[12,39].

Другим важливим аспектом є стабільність полімерного донора. Стабільність донора може вплинути на термін служби органічної сонячної батареї, оскільки нестабільні донори можуть з часом погіршуватися або втрачати свою ефективність.

Фактори, які можуть впливати на стабільність полімеру, включають його хімічну структуру, здатність до окислення, а також умови зберігання та експлуатації. Наприклад, деякі полімери можуть бути більш стабільними при високих температурах або високій вологості, тоді як інші можуть бути більш чутливими до цих умов. Тому при виборі донора для OSE важливо враховувати як його енергетичні характеристики (рівні НОМО і LUMO), так і його стабільність і розчинність[11,13].

1.4. Огляд органічних сонячних елементів та їх переваг/недоліків: що вони таке, як працюють, їх переваги та обмеження у порівнянні із традиційними сонячними елементами

Органічні сонячні елементи (ОСЕ), також відомі як пластикові сонячні батареї, є захоплюючим і перспективним полем для досліджень. ОСЕ можуть бути виготовлені з різних матеріалів, включаючи полімери, малі органічні молекули та наночастинки. ОСЕ зазвичай складаються з донора електронів (часто полімеру) та акцептора електронів (зазвичай пов'язаного з ним фулерену або неметалічної органічної сполуки). У сонячному елементі, коли світло ударяє по донору електронів, він поглинає енергію та екситує електрон від нижнього енергетичного рівня (НОМО) до верхнього енергетичного рівня (LUMO). Екситований електрон потім переходить в акцептор електронів, де він може перейти назад до нижчого енергетичного рівня, випромінюючи енергію, яку можна використовувати для створення електричного струму. Полімери часто використовуються як донори електронів в ОСЕ через їхню здатність ефективно поглинати світло і переносити електрони. Однак їх характеристики НОМО і LUMO можуть значно змінюватись в залежності від структури полімеру, довжини його ланцюга, наявності бічних груп і т.д. Матчинг НОМО та LUMO рівнів між донором та акцептором важливий для ефективної роботи ОСЕ. Занадто велика різниця між рівнями донора та акцептора НОМО може зменшити ефективність збору носіїв заряду, тоді як дуже мала різниця може зменшити ефективність поділу носіїв заряду. Таким чином, вибір правильного полімерного донора для конкретного акцептора вимагає розуміння характеристик НОМО і LUMO рівнів обох матеріалів, а також способів їх налаштування для досягнення оптимальної роботи. Розуміння того, як молекулярна структура полімеру впливає на його НОМО та LUMO рівні, може допомогти у виборі чи дизайні нових матеріалів для ОСЕ з покращеними характеристиками[16,44].

НОМО (найвища зайнята молекулярна орбіталь) і LUMO (найнижча незаповнена молекулярна орбіталь) є двома критично важливими поняттями в хімії та матеріалознавстві, особливо коли ми говоримо про провідність матеріалів та електронних пристроїв.

НОМО в основному відповідає валентній зоні, в якій електрони займають стабільні енергетичні стани, тоді як LUMO відповідає зоні провідності, де електрони можуть збуджуватися до вищих енергетичних станів.

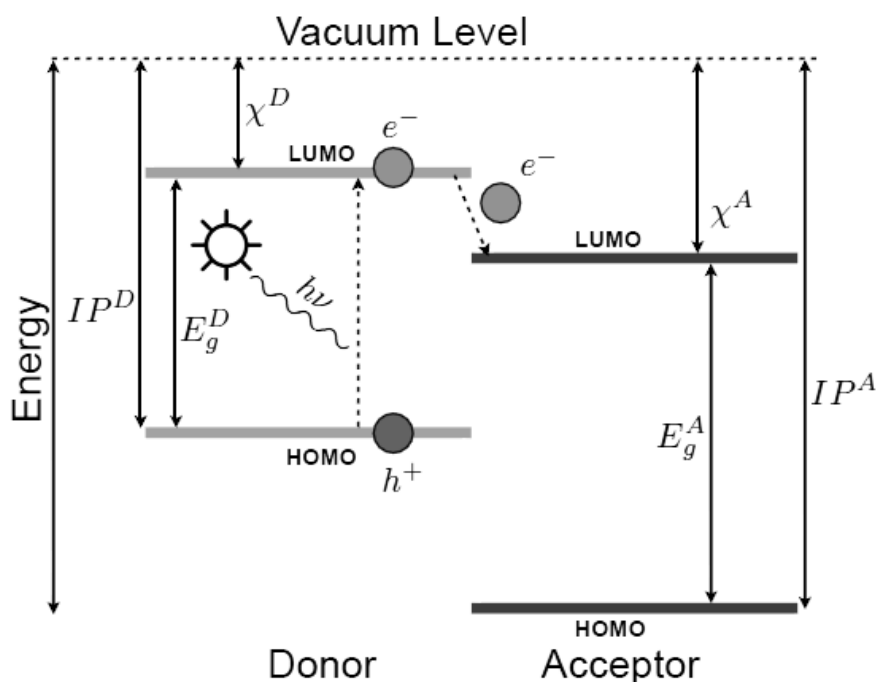


Рис. 1.4.1. Схематичне зображення процесів поглинання світла, дифузії та дисоціації екситона та розділення зарядів.

Зазор між ВЗМО та НВМО (також відомий як енергетична щілина або заборонена зона) є важливим параметром, який визначає оптичні та електронні властивості матеріалу. Заборонена зона визначає енергію, необхідну для передачі електрона від ВЗМО до НВМО. Якщо енергетичний зазор дуже великий, то матеріал є ізолятором, а якщо зазор малий або відсутній, то матеріал є провідником[15].

У контексті полімерних матеріалів для органічної електроніки, зокрема органічних фотоелектричних пристроїв, розуміння взаємодії між НОМО та LUMO полімерного донора та акцептора є критичним. Перш за все, для ефективного поділу зарядів енергетичні рівні ВЗМО донора та НСМО акцептора повинні бути близькими один до одного. По-друге, і це важливо, це те, що різниця в енергіях НОМО і LUMO впливає на ефективність пристрою.

Розробка ефективних органічних сонячних елементів вимагає гарного розуміння того, як рівні енергії НОМО та LUMO впливають на такі процеси, як поглинання світла, збудження та розділення заряду та перенесення заряду.

Вплив НОМО і LUMO на процеси в органічних сонячних елементах можна візуалізувати наступним чином:

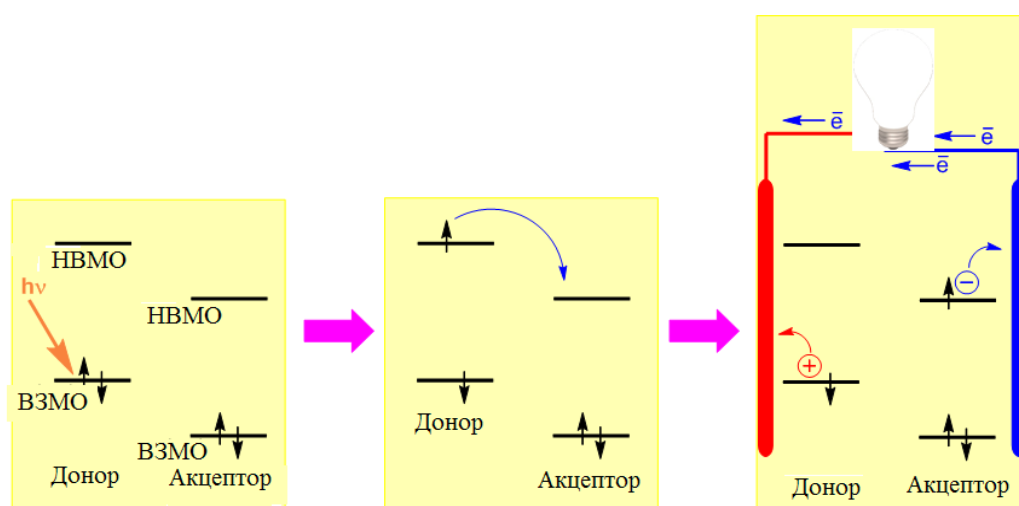


Рис. 1.4.2. Фотовольтаїчний ефект у твердій органіці.

Використання програмного забезпечення для моделювання та аналізу взаємодії між НОМО та LUMO рівнями може допомогти в оптимізації дизайну органічних сонячних батарей[17,37].

Органічні сонячні елементи (OSE) засновані на явищі перенесення заряду між донором (D) і акцептором (A). Цей процес включає кілька етапів:

1. *Поглинання світла.* Коли фотон світла поглинається донором, електрон може рухатися з найнижчої незаповненої молекулярної орбіталі (НОМО) до найвищої незаповненої молекулярної орбіталі (LUMO). Це призводить до створення екситона, який є зв'язком між електроном і діркою.
2. *Дифузія екситонів.* Створений екситон має дуже короткий пробіг, тому він повинен досить швидко дифундувати до межі донор-акцептор.
3. *Поділ заряду.* На межі донор-акцептор екситон може бути розділений ефектом поля, створюючи вільні носії заряду (електрони та дірки).
4. *Збір заряду.* Потім електрони та дірки збираються відповідними електродами, створюючи зовнішній струм.

Процеси в OSE взаємопов'язані, і від балансу між цими процесами залежить ефективність перетворення світла в електричний струм. Деталі перенесення заряду, зокрема, можна краще зрозуміти, вивчивши рівні НОМО та LUMO та енергетичний розрив між ними.

Дослідження рівнів НОМО та LUMO допомагає зрозуміти, як електрони можуть переноситися між молекулярними орбіталями, що сприяє кращому розумінню процесів поглинання світла та поділу зарядів в OSE[13,18].

1.5. Роль донорів і акцепторів у органічних сонячних елементах: що таке донори та акцептори, їх роль у сонячних елементах, як вибір донора/акцептора впливає на ефективність сонячного елемента

В органічних сонячних елементах (OSE) акцептори відіграють вирішальну роль, приймаючи електрони, збуджені в донорі під впливом світла. Цей процес дозволяє створювати різницю потенціалів і генерувати струм в OSE.

Подібно до донорів, вибір акцептора в OSE є важливим кроком, який суттєво впливає на загальну продуктивність пристрою. Нижче наведено деякі важливі параметри, які слід враховувати при виборі акцептора:

Рівні HOMO та LUMO. Вибір акцептора з відповідними рівнями HOMO та LUMO має вирішальне значення для забезпечення ефективної передачі електронів від донора. Різниця між LUMO донора та LUMO акцептора, а також між HOMO донора та LUMO акцептора визначається за допомогою відповідних значень ΔE_{HOMO} та ΔE_{LUMO} . Оптимальні значення цих параметрів залежать від конкретної використовуваної комбінації донора і акцептора.

Стабільність. акцептори повинні бути стабільними для тривалої роботи OSE. Це означає, що вони не повинні руйнуватися під впливом світла, тепла або інших факторів, які можуть виникнути під час експлуатації.

Сумісність з донором - щоб забезпечити оптимальний перенос електронів, акцептор повинен бути хімічно та структурно сумісний з донором. Це означає, що вони повинні мати подібні хімічні властивості, що дозволяє їм утворювати стабільну бімолекулярну структуру.

Розчинність. Як і донори, акцептори також повинні бути розчинними в певних розчинниках, щоб дозволити їх використовувати в техніках зернистого друку або нанесення покриття для створення тонкоплівкових структур.

Серед найпоширеніших акцепторів у ОСЕ є фулерени, такі як [6,6]-феніл С61 масляна кислота (PCBM), а також нефулеренові акцептори, такі як інденфлюорендитіофен (IDTT), дитіофен золотої шкіри (A-DT) та інші.

Молекулярна структура: акцептори, що використовуються в ОСЕ, зазвичай мають стабільну молекулярну структуру, яка полегшує перенесення електронів. Як і донори, акцептори мають спряжену (або альтернативно подвійну та одинарну) структуру, яка забезпечує здатність проводити заряд.

Фотофізичні властивості -- властивості акцептора, такі як його фотолюмінесценція та поглинання, також важливі, оскільки вони впливають на його здатність поглинати світло та створювати екситони, які можна розщеплювати для генерування струму.

Ефективність передачі заряду -- акцептори в органічних сонячних елементах повинні мати високу ефективність передачі заряду від донора, щоб максимізувати ефективність пристрою. Важливим є співвідношення між донором і акцептором в активному шарі, яке може впливати на формування бімолекулярної мережі, необхідної для ефективного перенесення заряду.

Саме з цих причин вибір акцептора для конкретної ОСЕ є не менш важливим, ніж вибір донора. Кожен акцептор має свої унікальні властивості, які визначають його здатність працювати в конкретних умовах і з конкретними донорами. Відповідний вибір акцептора може істотно підвищити продуктивність ОСЕ і забезпечити його стабільну роботу протягом тривалого часу[14,17,34].

2. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧІ

Необхідно розробити програму, яка виконує відбір донорів за заданими параметрами Δ НОМО та Δ LUMO, оскільки це може значно спростити дослідницьку роботу в галузі органічної хімії та матеріалознавства. Така програма буде дуже корисною, оскільки дозволить вченим швидко та ефективно знаходити донорів, які відповідають певним критеріям для значень НОМО та LUMO, встановлених користувачем. Це прискорить процес відбору відповідних донорів, заощадивши час і ресурси, які можна витратити на трудомісткі ручні розрахунки або перегляд великих обсягів даних.

Крім того, програма дозволить візуалізувати отримані результати у вигляді графіка, що значно полегшить аналіз даних. Візуальне представлення даних не тільки допомагає краще зрозуміти результати, але й дозволяє виявити будь-які відхилення або невідповідності в даних. Також завдяки графічному інтерфейсу програма буде зручною у використанні, що дозволить використовувати її не лише науковцям, а й студентам, які вивчають органічну хімію чи матеріалознавство. Тому розробка такої програми стане важливим кроком на шляху оптимізації дослідницької роботи, економії часу та ресурсів, а також підвищення якості наукових досліджень у галузі органічної хімії та матеріалознавства.

Тобто, треба розробити програму, яка включатиме наступні можливості та функції:

1. Використання заданих в програмі константних значень рівнів НОМО (ВЗМО) і LUMO (НВМО) акцептора РСВМ.
2. Підключення бази даних з експериментальними значеннями НОМО і LUMO для найбільш поширених полімерних донорів.

3. Встановлення значення різниці енергій між LUMO донора і акцептора (ΔE LUMO) та різниці енергій між HOMO донора і LUMO акцептора (ΔE HOMO) за допомогою відповідних полів введення.

4. Наявність кнопки "Старт" для початку пошуку підходящих донорів в базі даних на основі заданих значень HOMO, LUMO та відповідних різниць енергій.

5. Реалізація алгоритму пошуку донорів в базі даних, які найкраще підходять за значеннями параметрів HOMO і LUMO, заданими користувачем на початку пошуку.

6. Відображення результатів пошуку у вигляді таблиці чи списку знайдених донорів та їхніх параметрів HOMO і LUMO. Програма повинна мати зручний та інтуїтивно зрозумілий інтерфейс користувача, який дозволить легко вводити необхідні дані та отримувати результати пошуку.

7. Візуалізація результатів пошуку за допомогою графічного зображення (схеми). Після отримання результатів пошуку програма автоматично створює діаграму, на якій відображаються знайдені донори та відповідні їм значення HOMO та LUMO. Діаграма дозволяє користувачеві бачити чітко графічне представлення даних, що може допомогти в аналізі та інтерпретації результатів.

8. Наявність інтуїтивно зрозумілого інтерфейсу для візуалізації діаграми. Після завершення пошуку діаграма автоматично відображається в програмі. Користувач може використовувати цю діаграму для більш детального аналізу отриманих результатів.

9. Можливість оновлення діаграми з кожним новим пошуком. Щоразу, коли ви натискаєте кнопку «Почати», діаграма автоматично оновлюється, щоб показати нові результати. Це гарантує, що інформація, представлена в діаграмі, актуальна.

10. Підтримка відображення кількох даних на одній діаграмі. Графік у програмі може одночасно відображати значення НОМО та LUMO для кожного знайденого донора. Це дозволяє користувачеві зрозуміти та порівняти властивості різних донорів.

11. При необхідності треба розробити необхідні утиліти — програму для ручного заповнення бази даних та парсер з допомогою якого ми будемо збирати необхідну інформацію з Інтернету для заповнення бази даних програми.

12. Заповнити базу даних інформацією яка була отримана за допомогою парсера.

3. ПРАКТИЧНА ЧАСТИНА

3.1. Принципи роботи та реалізації бази даних: пояснення структури бази даних, що використовується в програмі, і її ролі в пошуку відповідних донорів.

База даних - це структурована система зберігання та організації даних, яка дозволяє ефективно зберігати, обробляти та аналізувати інформацію. Це важливий інструмент для будь-якої галузі, що має справу з великими обсягами інформації, включаючи хімію полімерів і сонячну енергетику. Бази даних мають певну структуру, яка залежить від моделі організації даних. Однією з найпоширеніших моделей є реляційна модель, у якій дані організовані у вигляді таблиць. Кожна таблиця складається з рядків і стовпців, де кожен рядок представляє окремий об'єкт або запис, а стовпці містять атрибути або властивості цих об'єктів. Кожна таблиця в базі даних має унікальний ключ (первинний ключ), який об'єднує її з іншими таблицями в базі даних за допомогою зв'язків. Це дозволяє створювати зв'язки між різними типами даних і ефективно виконувати складні запити до бази даних. Важливою особливістю баз даних є їх мова запитів. SQL (Structured Query Language) — стандартна мова для роботи з реляційними базами даних. З його допомогою можна створювати, змінювати, заповнювати та запитувати дані в базі даних. Він включає ряд операцій, таких як SELECT (вибір даних), INSERT (вставка даних), UPDATE (оновлення даних), DELETE (видалення даних) та інші. У контексті нашої дисципліни, хімії полімерів і сонячної енергії, бази даних можна використовувати для зберігання та аналізу хімічних структур, енергетичних характеристик, даних донорів і акцепторів і багато іншого. Він дозволяє швидко шукати та вибирати дані, які відповідають певним критеріям, а також виконувати аналіз і моделювання на основі цих даних. У майбутньому використання бази даних може допомогти в автоматизації процесу пошуку та

вибору оптимальних донорів для органічних сонячних елементів, а також у розробці нових матеріалів і технологій в області органічної фотовольтаїки [8, 25].

Безпека бази даних включає захист даних від несанкціонованого доступу або модифікації. Для цього використовуються різні механізми, включаючи автентифікацію та авторизацію користувачів, шифрування даних, а також аудит і контроль доступу.

Використання бази даних у науці та дослідженнях, особливо в галузі хімії та сонячної енергетики, може принести значну користь. Наприклад, він дозволяє зберігати, систематизувати та швидко знаходити інформацію про різні хімічні сполуки, їхні характеристики та властивості, а також дані про експерименти та дослідження.

Однак для ефективного використання бази даних для цих цілей необхідно мати добре розроблену схему бази даних, що відображає специфіку предметної області, а також вміти правильно формулювати запити до бази даних для отримання необхідної інформації[27].

3.2. Парсер даних з веб-сайту для створення бази даних про молекулярні властивості хімічних речовин.

Почнемо з того, що створимо парсер для парсингу даних з сайту cccbdb.nist.gov[19]. Веб-парсер буде реалізований за допомогою бібліотек Python - Selenium та BeautifulSoup, здійснює збір специфічних хімічних даних для різних молекул. Веб-сайт cccbdb.nist.gov[24] належить Комітету з постійних хімічних і біологічних властивостей (CCCBDB) Національного інституту стандартів і технологій США (NIST). CCCBDB — це обширна онлайн база даних, яка збирає та надає доступ до великої кількості теоретичних та

експериментальних хімічних даних. Цей ресурс призначений для допомоги в дослідженнях і освіті в галузі хімії. База даних відображає такі характеристики, як термохімічні дані, молекулярна геометрія, частоти коливань, електронна структура, молекулярні властивості та багато інших властивостей для широкого діапазону молекул. Інтерфейс сайту містить форми для введення хімічних формул або вибору зі списку доступних молекул, а також дозволяє вибрати конкретні типи даних для отримання. Доступ до даних здійснюється через HTML-сторінки, які можна сканувати автоматизованими інструментами, такими як парсери[30, 31].

На cccbdb.nist.gov ви можете знайти дані про різні підходи до вирішення проблем квантової хімії. Напівемпіричні методи, представлені на сайті, включають AM1, PM3, PM6 і G2. Ці методи використовують емпіричні параметри, отримані шляхом порівняння з експериментальними даними або даними, отриманими за допомогою більш точних теоретичних розрахунків. Крім того, на сайті представлені дані, отримані за допомогою композитних методів, таких як G3, G3B3, G3MP2, G4 і CBS-Q. Ці методи використовують комбінацію різних методів і теорій для отримання більш точного опису молекулярних властивостей. Цей сайт є цінним ресурсом для дослідників, які працюють у галузі квантової хімії, оскільки вони можуть використовувати ці дані для перевірки власних розрахунків і моделей.

Напівемпіричний і композитний методи — це два типи підходів, які використовуються в квантовій хімії для вирішення рівнянь Шредінгера та визначення властивостей молекул. Напівемпіричні методи, такі як AM1, PM3 і PM6, використовують емпіричні параметри, що відповідають конкретній системі. Ці параметри отримують шляхом порівняння з експериментальними даними або даними, отриманими в результаті більш точних теоретичних розрахунків. Ці методи швидкі та економічно ефективні, але менш точні, ніж інші методи[24].

Композитні методи, такі як G2, G3, G3B3, G3MP2, G4 і CBS-Q, використовують комбінацію різних методів і теорій для більш точного опису молекулярних властивостей. Ці методи можуть бути складнішими та вимагати більше обчислювальних ресурсів, але вони зазвичай дають більш точні результати. На cccbdb.nist.gov[19] ви можете знайти дані, отримані за допомогою цих методів. Наш синтаксичний аналізатор ми налаштували для аналізу даних, отриманих за допомогою методу AM1, але його також можна змінити для отримання даних з інших методів, якщо потрібно. Це забезпечує гнучкість і адаптивність нашого інструменту для використання в широкому діапазоні наукових досліджень і проектів[16].

Наш вибір – метод AM1. Будемо парсити інформацію знайдену саме цим методом. AM1 (Austin Model 1) – це напівемпіричний метод квантової хімії. Цей метод використовується для обчислення властивостей молекул, включаючи їх енергію, структуру та взаємодії. AM1 метод може бути використаний для вимірювання та передбачення енергії НОМО та LUMO, а також для оцінки хімічної реакційної здатності різних молекул[27].

Код парсера:

```
import csv

from selenium import webdriver

from selenium.webdriver.common.by import By

from selenium.common.exceptions import NoSuchElementException

from selenium.webdriver.support.ui import WebDriverWait

from selenium.webdriver.support import expected_conditions as EC

from bs4 import BeautifulSoup

import time

def process_detail_page(driver):

    page_html = driver.page_source

    soup = BeautifulSoup(page_html, 'html.parser')

    rows = soup.select('table tr')

    for row in rows:

        if row.find('td', text='hartree'):

            values = [td.text for td in row.find_all('td', class_='num')]

            if len(values) == 3:

                alpha_homo = float(values[0])

                alpha_lumo = float(values[1])

                difference = float(values[2])

                return alpha_homo, alpha_lumo, difference

    else:

        print('Не знайдено рядок з "hartree" в таблиці')

        return None, None, None

def process_results_page(driver, molecule):

    page_html = driver.page_source

    soup = BeautifulSoup(page_html, 'html.parser')

    rows = soup.select('table tr')

    for row in rows:

        if row.find('th', text='AM1'):

            link = row.find('a')

            if link:
```

```

link_text = link.text.strip()

driver.find_element(By.LINK_TEXT, link_text).click()

time.sleep(4)

alpha_homo, alpha_lumo, difference = process_detail_page(driver)

with open('molecule_data.csv', 'a', newline='') as file:

    writer = csv.writer(file)

    writer.writerow([molecule, alpha_homo, alpha_lumo])

    break

else:

    print('Не знайдено рядок з "AM1" в таблиці')

driver = webdriver.Chrome()

with open('molecule_data.csv', 'w', newline='') as file:

    writer = csv.writer(file)

    writer.writerow(["Molecule", "HOMO", "LUMO", "Gap"])

molecules = ['N2H2', 'H2O', 'O2DDDD'] #Тут можна дописати список

for molecule in molecules:

    try:

        driver.get('https://cccbdb.nist.gov/gap1.asp')

        input_element = driver.find_element(By.NAME, 'formula')

        input_element.clear()

        input_element.send_keys(molecule)

        submit_button = driver.find_element(By.NAME, 'submit1')

        submit_button.click()

        time.sleep(4)

        page_html = driver.page_source

        soup = BeautifulSoup(page_html, 'html.parser')

        innertube_divs = soup.find_all('div', class_="innertube")

        if len(innertube_divs) >= 2 and innertube_divs[1].text.strip().startswith("Can't find the formula"):

            print(f'Молекула не знайдена {molecule}. Продовжуємо з наступної...')

            continue

        elif soup.select_one('form[action="gotone.asp"]'):

            submit_button = driver.find_element(By.CSS_SELECTOR, 'input[type="submit"]')

```

```
submit_button.click()

time.sleep(5)

process_results_page(driver, molecule)

pass

else:

    process_results_page(driver, molecule)

    pass

except NoSuchElementException:

    print(f"Помилка обробки молекули {molecule}. Продовжуємо з наступної...")

    driver.quit()
```

Парсер має вбудовані механізми відновлення помилок, що робить його надійним і стійким до різних проблем. Синтаксичний аналізатор використовує обробку винятків Python для обробки помилок Selenium, таких як NoSuchElementException. Це дає можливість продовжувати виконання коду, незважаючи на виникнення помилок під час взаємодії з веб-сторінкою. Якщо веб-сторінка не завантажується або повільно відповідає, синтаксичний аналізатор може відновити це, використовуючи паузи між запитами. Синтаксичний аналізатор перевіряє структуру документа HTML перед його обробкою. Це запобігає помилкам, пов'язаним із неочікуваними змінами в структурі веб-сторінки. У разі неочікуваних помилок аналізатор друкує повідомлення про помилку та продовжує обробку наступної молекули в списку. Таким чином, парсер стабільний і відмовостійкий, що підвищує його продуктивність і забезпечує безперебійну роботу.

Дані, отримані цим аналізатором, зберігаються у файлі CSV, який може служити відправною точкою для створення бази даних SQL за допомогою програми заповнення бази даних[31].

3.3. Програма для заповнення бази даних

Загальна мета: Розробити утиліту з GUI для додавання даних до бази даних SQLite. Дані, які потрібно ввести, включають ім'я донора та його значення НОМО та LUMO. В нашому випадку, ми будемо заповнювати даними які напарсили[27].

Функціональні вимоги:

- Поле для введення імені донора.
- Поле для введення значення НОМО донора.
- Поле для введення значення LUMO донора.
- Кнопка «Додати дані», яка запускає процес додавання введених даних до бази даних.
- Повідомлення користувачеві про успішне додавання даних або про помилку, що виникла під час додавання даних.

НЕфункціональні вимоги:

- Зручний графічний інтерфейс.
- Швидкість додавання даних в базу.
- Надійність додавання даних: якщо введення відповідає очікуванням, воно має бути успішно додано до бази даних.

Процес роботи:

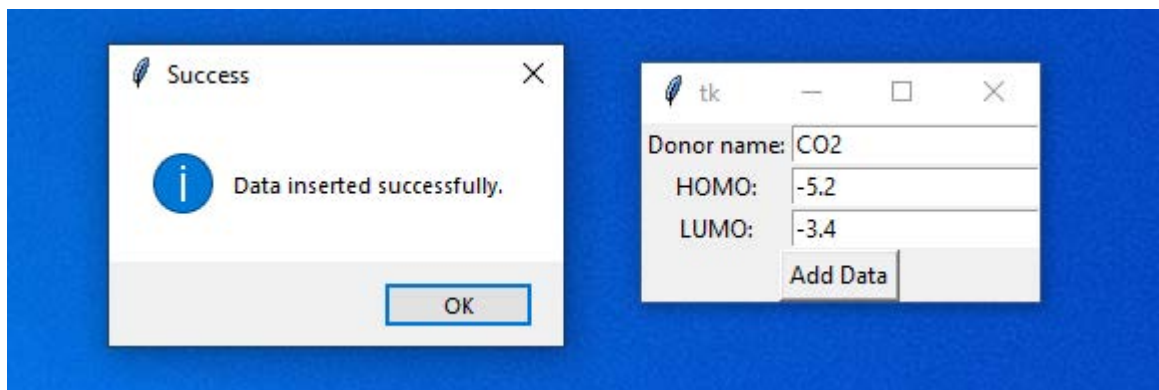


Рис. 3.3.1. Вікно утиліти для ручного заповнення бази даних. Приклад використання.

1. Користувач вводить ім'я донора, його значення HOMO і LUMO у відповідні поля.
2. Після введення всіх даних користувач натискає кнопку «Додати дані».
3. Програма перевіряє введені дані та додає їх до бази даних.
4. Після додавання даних до бази даних користувачеві відображається повідомлення про успіх або помилку.

Очікувані результати:

- Введені дані успішно збережені в базі даних.
- Користувачеві відображаються відповідні повідомлення про успіх або помилку.
- Користувач має можливість легко вводити дані через графічний інтерфейс.

Технології:

- Мова програмування: Python
- Для GUI: Tkinter
- Для взаємодії з базою даних: SQLite

Код програми:

```
import sqlite3
import tkinter as tk
from tkinter import messagebox

def insert_data(db_file, donor_name, homo, lumo):
    try:
        conn = sqlite3.connect(db_file)
        cursor = conn.cursor()
        cursor.execute(f"INSERT INTO donors (name, homo, lumo) VALUES (?, ?, ?)",
            (donor_name, homo, lumo))
        conn.commit()
        messagebox.showinfo("Success", "Data inserted successfully.")
    except Exception as e:
        messagebox.showerror("Error", str(e))
    finally:
        if conn:
            conn.close()

def add_data(entry1, entry2, entry3):
    db_file = 'polymer_donors.db'
    donor_name = entry1.get()
    homo = float(entry2.get())
    lumo = float(entry3.get())
    insert_data(db_file, donor_name, homo, lumo)

root = tk.Tk()
tk.Label(root, text='Donor name:').grid(row=0)
tk.Label(root, text='HOMO:').grid(row=1)
tk.Label(root, text='LUMO:').grid(row=2)
e1 = tk.Entry(root)
e2 = tk.Entry(root)
e3 = tk.Entry(root)
e1.grid(row=0, column=1)
e2.grid(row=1, column=1)
e3.grid(row=2, column=1)
add_data_button = tk.Button(root, text="Add Data", command=lambda: add_data(e1, e2, e3))
add_data_button.grid(row=3, column=0, columnspan=2)
root.mainloop()
```

Ця програма також використовує Tkinter для створення графічного інтерфейсу користувача. Це дозволяє користувачеві додавати дані до бази даних шляхом введення імені донора, НОМО та LUMO через графічний інтерфейс. Основними функціями є `insert_data` і `add_data`[26].

`insert_data()`:

Ця функція додає дані до бази даних SQLite. Він відкриває підключення до бази даних, створює курсор для виконання SQL-запитів, а потім виконує SQL-запит, який додає новий рядок до таблиці «донорів». Після вставки даних функція фіксує транзакцію для фіксації змін і закриває з'єднання з базою даних.

`add_data()`:

Ця функція викликається, коли користувач натискає кнопку «Додати дані». Він отримує дані, введені користувачем, перетворює значення НОМО та LUMO на числа з плаваючою комою, а потім викликає функцію `insert_data`, щоб додати дані до бази даних.

В основному інтерфейсі Tkinter користувач може ввести ім'я донора, НОМО та LUMO. Після натискання кнопки «Додати дані» введені дані додаються до бази даних.

Такий підхід дозволяє користувачеві вводити дані через зручний графічний інтерфейс, контролювати успішність операцій через вікно повідомлень і не турбуватися про пряму взаємодію з базою даних або форматування SQL-запитів.

Також було створено невеликий скрипт для автоматичного заповнення з даними про молекули, які зберігаються у файлі CSV який ми згенерували за допомогою парсера[28].

Програма виконує наступні дії:

1. Завантажує дані з файлу CSV у форматі DataFrame за допомогою бібліотеки pandas.
2. Замінює всі відсутні значення на None для коректного оброблення при завантаженні в базу даних.
3. Перемінює стовпець "Molecule" в "name" для відповідності формату бази даних.
4. Множить стовбці HOMO та LUMO на константу (в даному випадку я взяв константу 27.2114 для конвертації з Hartree в електрон-вольт) та видаляє стовбець Gap.
4. Створює з'єднання з базою даних SQLite та створює таблицю в базі даних і заповнює її даними з DataFrame.

Код скрипта:

```
import pandas as pd
from sqlalchemy import create_engine
dataframe = pd.read_csv('molecule_data.csv')
dataframe = dataframe.where(pd.notnull(dataframe), None)
dataframe.rename(columns={'Molecule': 'name'}, inplace=True)
conversion_factor = 27.2114
dataframe['HOMO'] = dataframe['HOMO']*conversion_factor
dataframe['LUMO'] = dataframe['LUMO']*conversion_factor
dataframe = dataframe.drop(columns=['Gap'])
engine = create_engine('sqlite:///donors.db', echo=True)
dataframe.to_sql('donors', con=engine, if_exists='replace', index_label='id')
```

Внизу продемонстрована візуалізована база даних. Тобто значення Hartree*27.2114. Варто відмітити, що значення знайдені таким способом можуть відрізнятися від експериментальних. Також варто зазначити — в даній базі присутні молекули які не є полімерами. Це було зроблено для простоти наповнення бази даних.

	id	name	HOMO	LUMO
0	0	H2	-14.917562	4.972611
1	1	Be2	-5.812355	1.349958
2	2	C2	-12.265539	-2.758692
3	3	N2	-14.322993	1.003012
4	4	F2	-14.281631	0.562460
5	5	Mg2	-7.200409	0.291978
6	6	P2	-11.438856	-1.558125
7	7	Cl2	-11.590968	-1.129545
8	8	H2O	-12.464454	4.419131
9	9	CO2	-13.214400	0.852805
10	10	N2O	-12.087848	0.421505
11	11	CH4	-13.308824	4.660769
12	12	NH3	-10.417884	4.222665
13	13	H2S	-9.928079	2.019086
14	14	HCl	-12.333295	1.866430
15	15	HF	-14.087070	6.702168
16	16	03	-13.107017	-1.943710

Рис. 3.3.2. Візуалізована частина бази даних.

3.4. Створення головної програми для пошуку полімерних донорів за допомогою Δ HOMO та Δ LUMO. Детальне пояснення алгоритму пошуку в програмі: як працює алгоритм, його ефективність і обмеження. Роль допуску в пошук відповідних донорів: що таке допуск, як він визначається і як впливає на результати пошуку

Алгоритм пошуку в програмі заснований на виконанні SQL-запиту до бази даних SQLite, що містить дані про донорів. База даних попередньо заповнена, наприклад утилітою яка була представлена вище. Роботу алгоритму детально описують такі пункти:

1. *Визначення параметрів пошуку* -- користувач вводить значення ΔE НОМО, ΔE LUMO та допуск у поля введення Tkinter. Значення ΔE вказують на бажану різницю між значеннями НОМО і LUMO акцептора і донора, а допуск вказує на допустиме відхилення від цих значень.
2. *Формування SQL-запиту* -- з урахуванням введених користувачем значень формується SQL-запит. Запит містить умови, які перевіряють, чи значення НОМО та LUMO кожного донора в базі даних відповідають введеному значенню ΔE у межах допустимого відхилення.
3. *Виконання SQL-запиту* -- Запит виконується за допомогою курсору SQLite, який взаємодіє з базою даних.
4. *Обробка результатів* -- результати запиту, які включають усіх донорів, що відповідають критеріям пошуку, збираються та повертаються для подальшого використання в програмі.

Цей алгоритм має ряд переваг. Це досить ефективно, оскільки використовує потужність SQL для фільтрації даних безпосередньо в базі даних, замість того, щоб витягувати всі дані та обробляти їх у програмі. Це також забезпечує велику гнучкість, оскільки параметри пошуку можна легко змінити, ввівши нові значення в поля введення Tkinter[26].

Однак алгоритм має деякі обмеження. Це повністю залежить від правильності введених користувачем даних і актуальності даних у базі даних. Якщо користувач вводить недійсні значення або дані в базі даних неповні чи застарілі, результати пошуку можуть бути неточними.

Ця програма використовує бібліотеку Tkinter для створення графічного інтерфейсу користувача (GUI). Під час запуску він відкриває базу даних, що містить інформацію про донорів, і дозволяє користувачеві вибирати відповідних донорів з урахуванням заданих допусків НОМО та LUMO[32].

Код программы:

```
import tkinter as tk

from tkinter import messagebox

from tkinter import ttk

import sqlite3

import matplotlib.pyplot as plt

from matplotlib.backends.backend_tkagg import FigureCanvasTkAgg

from matplotlib.figure import Figure

HOMO_A = -6.3 # HOMO акцептора

LUMO_A = -3.7 # LUMO акцептора

def open_database():

    conn = sqlite3.connect('donors.db')

    return conn

def get_number_of_donors():

    conn = open_database()

    cursor = conn.cursor()

    cursor.execute("SELECT COUNT(*) FROM donors")

    count = cursor.fetchone()[0]

    conn.close()

    return count

def update_results_table(tree, donors):

    tree.delete(*tree.get_children())

    for donor in donors:

        tree.insert("", 'end', values=(donor[1], donor[2], donor[3]))

def find_donors(HOMO_A, LUMO_A, dE_HOMO, dE_LUMO, tolerance):

    conn = open_database()

    cursor = conn.cursor()

    cursor.execute("SELECT * FROM donors WHERE

        (? - HOMO) <= ? AND

        (LUMO - ?) <= ?",

        (HOMO_A, dE_HOMO + tolerance, LUMO_A, dE_LUMO + tolerance))

    result = cursor.fetchall()
```

```

conn.close()

return result

def show_plot(donors):

    fig = Figure(figsize=(5, 4), dpi=100)

    fig.subplots_adjust(left=0.15, right=0.95, top=0.95, bottom=0.15)

    names = [donor[1] for donor in donors]

    HOMO = [donor[2] for donor in donors]

    LUMO = [donor[3] for donor in donors]

    ax = fig.add_subplot(111)

    ax.scatter(names, HOMO, label='HOMO')

    ax.scatter(names, LUMO, label='LUMO')

    ax.set_ylabel('Енергія')

    ax.legend()

    return fig

def start_button_click(tree, canvas, ax, label):

    try:

        dE_HOMO = float(e1.get())

        dE_LUMO = float(e2.get())

        tolerance = float(e3.get())

    except ValueError:

        messagebox.showerror('Помилка', 'Введіть коректні числа')

        return

    donors = find_donors(HOMO_A, LUMO_A, dE_HOMO, dE_LUMO, tolerance)

    update_results_table(tree, donors)

    fig = show_plot(donors)

    canvas.figure.clf()

    ax = canvas.figure.add_subplot(111)

    ax.scatter([donor[1] for donor in donors], [donor[2] for donor in donors], label='HOMO')

    ax.scatter([donor[1] for donor in donors], [donor[3] for donor in donors], label='LUMO')

    ax.set_ylabel('Енергія')

    ax.legend()

    canvas.draw()

    label['text'] = 'Кількість донорів в базі даних: ' + str(get_number_of_donors())

```

```

# Графічний інтерфейс користувача

root = tk.Tk()

root.title('Пошук донорів')

tk.Label(root, text='ΔE HOMO:').grid(row=0, column=0)

tk.Label(root, text='ΔE LUMO:').grid(row=1, column=0)

tk.Label(root, text='Допуск:').grid(row=2, column=0)

e1 = tk.Entry(root)

e2 = tk.Entry(root)

e3 = tk.Entry(root)

e1.grid(row=0, column=1)

e2.grid(row=1, column=1)

e3.grid(row=2, column=1)

donors_count_label = tk.Label(root, text='Кількість донорів в базі даних: ' + str(get_number_of_donors()))

donors_count_label.grid(row=4, column=0, columnspan=2)

fig = Figure(figsize=(5, 4), dpi=100)

ax = fig.add_subplot(111)

canvas = FigureCanvasTkAgg(fig, master=root)

canvas.get_tk_widget().grid(row=6, column=0, columnspan=2)

start_button = tk.Button(root, text='Старт', command=lambda: start_button_click(tree, canvas, ax, donors_count_label))

start_button.grid(row=3, column=0, columnspan=2)

tree = ttk.Treeview(root, columns=('name', 'HOMO', 'LUMO'))

tree.heading('#0', text='')

tree.heading('name', text='Назва донора')

tree.heading('HOMO', text='HOMO')

tree.heading('LUMO', text='LUMO')

tree.column('#0', stretch=tk.NO, minwidth=0, width=0)

tree.column('name', stretch=tk.NO, minwidth=0, width=100)

tree.column('HOMO', stretch=tk.NO, minwidth=0, width=100)

tree.column('LUMO', stretch=tk.NO, minwidth=0, width=100)

tree.grid(row=5, column=0, columnspan=2)

root.mainloop()

```

Основна логіка програми міститься у функціях *find_donors*, *show_plot* і *start_button_click*.

find_donors(HOMO_A, LUMO_A, dE_HOMO, dE_LUMO, толерантність):

Ця функція шукає відповідних донорів у базі даних з урахуванням заданого допустимого діапазону. Для цього використовується SQL-запит, який знаходить усі записи, де відповідні значення HOMO та LUMO лежать у заданому діапазоні.

show_plot(донори):

Ця функція відображає графік із значеннями HOMO та LUMO для вибраних донорів.

start_button_click():

Ця функція викликається, коли користувач натискає кнопку Пуск. Він зчитує значення, введені користувачем, викликає функцію *find_donors* для пошуку відповідних донорів, відображає результати на графіку за допомогою функції *show_plot* і оновлює таблицю результатів.

У цій програмі значення HOMO і LUMO для акцептора вже встановлені як константи:

HOMO_A = -6,3: це значення HOMO (найвища зайнята молекулярна орбіталь) для акцептора.

LUMO_A = -3,7: це значення LUMO (найнижча незайнята молекулярна орбіталь) для акцептора.

Ці значення використовуються в програмі для порівняння з даними донорів, які зберігаються в базі даних. Одночасно програма визначає донорів, у яких значення HOMO і LUMO відповідають заданим користувачем діапазонам (Δ HOMO і Δ LUMO), враховуючи задану користувачем толерантність[30].

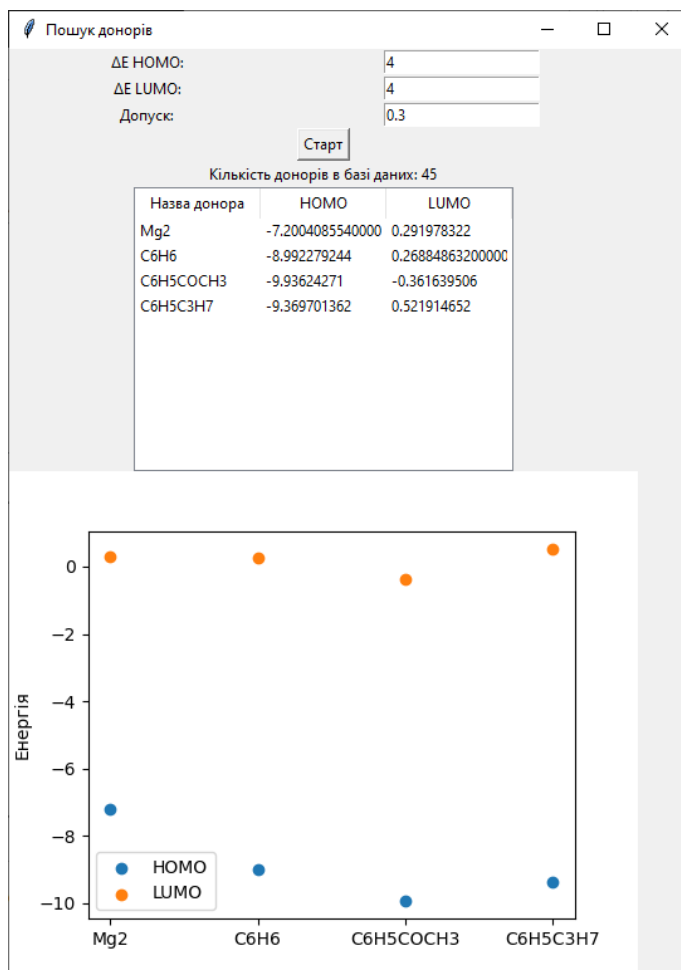


Рис. 3.4.1. Вікно основної програми для пошуку донорів.

В основному інтерфейсі Tkinter користувач може вводити значення ΔE HOMO, ΔE LUMO та допуск. Після натискання кнопки «Старт» програма шукає відповідних донорів і відображає результати в таблиці та на графіку. Застосування цього підходу пов'язане з тим, що він дозволяє користувачеві взаємодіяти з даними дуже зручним способом, використовуючи графічний інтерфейс для введення даних і відображення результатів. Допуск у цій програмі використовується для визначення допустимого відхилення між заданим і фактичним значенням енергії HOMO і LUMO. Він показує, наскільки фактичні значення можуть відрізнятися від заданих без відхилень. Визначення допуску виконує користувач, який вводить його значення у відповідне поле введення. Значення допуску може змінюватися залежно від конкретних вимог до точності. Вплив толерантності на результати пошуку є важливим. Чим

менший допуск, тим ближче значення НОМО та LUMO донора мають бути до вказаних значень, щоб вважатися придатними. Це означає, що з невеликим допуском результати пошуку будуть більш точними, але можуть бути менш повними, оскільки багато донорів можуть бути відхилені через незначні відхилення від заданих значень. З іншого боку, більший допуск дасть більш повний, але менш точний список відповідних донорів. Таким чином, толерантність дозволяє користувачам контролювати баланс між точністю та повнотою результатів пошуку[29].

3.5. Можливі напрямки для подальшого розвитку і вдосконалення програми: обґрунтування потенційних поліпшень і розширення функціональності програми, включаючи врахування додаткових параметрів, поліпшення алгоритму пошуку і т.д.

Програма пошуку донорів, яку ми обговорюємо, вже має значний потенціал для використання в дослідженнях органічних сонячних елементів. Однак, як і будь-який інструмент чи ресурс, його можна вдосконалювати та розширювати. Ось кілька можливих напрямків подальшого розвитку:

- *Розширення бази даних.* Як зазначалося вище, ефективність програми залежить від кількості та точності даних, які вона має в своєму розпорядженні. Подальше розширення бази даних шляхом додавання нових донорів або оновлення наявних даних може значно підвищити її корисність.
- *Розгляд додаткових параметрів.* На даний момент програма враховує тільки два параметри - НОМО і LUMO. Додавання додаткових параметрів, таких як стабільність, розчинність або сумісність з іншими матеріалами, може допомогти у виборі більш відповідних донорів.

- *Удосконалення алгоритму пошуку.* В даний час алгоритм пошуку заснований на простому порівнянні значень НОМО і LUMO із заданими діапазонами. Це можна покращити, використовуючи більш складні алгоритми пошуку або запровадивши систему рейтингу для кращого сортування потенційних донорів.
- *Додавання функції автоматичного оновлення.* Програму можна розширити для автоматичного оновлення бази даних новими даними або даними з інших джерел.
- *Покращення графічного інтерфейсу користувача.* Хоча поточний інтерфейс уже досить зручний і простий у використанні, його можна зробити більш інтуїтивно зрозумілим і привабливим для користувача, додавши більше візуальних елементів і покращивши навігацію.

Усі ці вдосконалення можуть допомогти зробити програму потужнішою, зручнішою та кориснішою для дослідників органічних сонячних елементів.

ВИСНОВКИ

1. *Оптимізація процесу відбору донора.* Завдяки цій програмі ми змогли значно спростити та прискорити процес відбору донора за заданими параметрами ΔE_{HOMO} та ΔE_{LUMO} . Тепер вчені та дослідники можуть автоматизувати цей процес замість виконання трудомістких обчислень вручну.
2. *Економія ресурсів.* Програма дозволила нам заощадити час і ресурси, які можна було б витратити на ручний пошук і аналіз даних. Тепер ви можете зосередитися на більш важливих елементах дослідження, таких як інтерпретація отриманих результатів.
3. *Простота використання.* Для програми розроблено інтуїтивно зрозумілий графічний інтерфейс користувача, що робить її доступною не лише для досвідчених науковців, а й для студентів чи молодих дослідників.
4. *Візуалізація даних.* Ми надали можливість візуалізувати результати за допомогою графіків, що полегшує аналіз та інтерпретацію даних. Це допомагає краще зрозуміти результати та визначити тенденції чи аномалії.
5. *Внесок у науку.* Програма може бути корисною не лише для наших власних досліджень, а й для широкого кола вчених у галузі органічної хімії та матеріалознавства. Це робить наш внесок корисним і цінним для науки та наукової спільноти в цілому.

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. Г.В. Булавко, А.А. Ищенко, Успехи химии: Органические фотовольтаические структуры с объемным гетеропереходом – д
2. Wolfgang Tress, Organic Solar Cells – Theory, Experiment, and Device Simulation, Springer International Publishing, London, 2014.
3. А.И. Киприанов, Введение в электронную теорию органических соединений, Наукова думка, Киев, 1975.
4. Stephen R. Forrest The Limits to Organic Photovoltaic Cell Efficiency, MRS Bulletin, Volume 30, January 2005.
5. Н.А. Давиденко, А.А. Ищенко, Н.Г. Кувшинский, Фотоника молекулярных полупроводниковых композитов на основе органических красителей, Наукова думка, Киев, 2005.
6. Brabec, C.J., Sariciftci, N.S., Hummelen, J.C., "Plastic Solar Cells", Adv. Funct. Mater., 2001, 11, 15–26.
7. Grimsdale, A.C., Chan, K.L., Martin, R.E., Jokisz, P.G., Holmes, A.B., "Synthesis of light-emitting conjugated polymers for applications in electroluminescent devices", Chem. Rev., 2009, 109, 897–1091.
8. Yu, G., Gao, J., Hummelen, J.C., Wudl, F., Heeger, A.J., "Polymer Photovoltaic Cells: Enhanced Efficiencies via a Network of Internal Donor-Acceptor Heterojunctions", Science, 1995, 270, 1789-1791.
9. Hoppe, H., Sariciftci, N.S., "Organic solar cells: An overview", J. Mater. Res., 2004, 19, 1924-1945.
10. Scharber, M.C., Sariciftci, N.S., "Efficiency of bulk-heterojunction organic solar cells", Prog. Polym. Sci., 2013, 38, 1929-1940.
11. Yao, Y., Dong, Q., Liu, J., Yang, Y., Wu, H., Zhang, X., Xiao, L., Jiao, B., Yuan, Y., Hou, J., "Building organic semiconductors with a large bandgap and high charge mobility by side-chain engineering of core-chlorinated D–A copolymers", J. Mater. Chem. A, 2019, 7, 13004-13012.

12. Li, Y., "Molecular Design of Photovoltaic Materials for Polymer Solar Cells: Toward Suitable Electronic Energy Levels and Broad Absorption", *Acc. Chem. Res.*, 2012, 45, 723-733.
13. Mihailetschi, V.D., Xie, H.X., de Boer, B., Koster, L.J.A., Blom, P.W.M., "Charge transport and photocurrent generation in poly(3-hexylthiophene):methanofullerene bulk-heterojunction solar cells", *Synth. Met.*, 2006, 156, 942-946.
14. Elumalai, N.K., Uddin, A., "Open Circuit Voltage of Organic Solar Cells: An in-Depth Review", *Energy Environ. Sci.*, 2016, 9, 391-410.
15. Eftaiha, A., Sun, J., Hill, I., Welch, G., "Polymer-fullerene bulk heterojunction solar cells", *Mater. Today*, 2008, 11, 38-45.
16. Garcia-Belmonte, G., Munar, A., Barea, E., Bisquert, J., Ugarte, I., Pacios, R., "Charge Carrier Mobility and Lifetime of Organic Photovoltaic Devices", *Phys. Rev. Lett.*, 2008, 100, 216601.
17. Alem, S., "Organic Photovoltaics: Mechanisms, Materials, and Devices", 2005.
18. Brédas, J.-L., Norton, J.E., Cornil, J., Coropceanu, V., "Molecular Understanding of Organic Solar Cells: The Challenges", *Acc. Chem. Res.*, 2009, 42, 1691-1699.
19. Mihailetschi, V.D., Wildeman, J., Blom, P.W.M., "Space-Charge Limited Photocurrent", *Phys. Rev. Lett.*, 2005, 94, 126602.
20. Nguyen, T.Q., Wu, J.J., Doan, V., Schwartz, B.J., Tolbert, S.H., "Control of Energy Transfer in Oriented Conjugated Polymer-Mesoporous Silica Composites", *Science*, 2000, 288, 652-656.
21. Hoppe, H., Niggemann, M., Winder, C., Kraut, J., Hiesgen, R., Hinsch, A., Meissner, D., Sariciftci, N.S., "Nanoscale Morphology of Conjugated Polymer/fullerene-based Bulk-heterojunction Solar Cells", *Adv. Funct. Mater.*, 2004, 14, 1005-1011.
22. Sringhaus, H., Tessler, N., Friend, R.H., "Integrated Optoelectronic Devices Based on Conjugated Polymers", *Science*, 1998, 280, 1741-1744.

23. Gray-Weale, A., Head-Gordon, T., "An approach to functionalizing surfaces with organic polymers that protects the interface from damage", *Science*, 2005, 310, 1675-1677.
24. cccbdb.nist.gov Methods: PM3, AM1, PM6, G2, G3, G3B3, G3MP2, G4, CBS-Q.
25. Python Crash Course, 2nd Edition: A Hands-On, Project-Based Introduction to Programming by Eric Matthes
26. Python and Tkinter Programming by John E Grayson
27. Python SQLite Tutorial: Complete Overview - Creating a Database, Table, and Running Queries by Mike Driscolls
28. Learning Python: Learn to code like a professional with Python - an open source, versatile, and powerful programming language by Fabrizio Romano
29. Summers, R. (2016). SQLite3: Python Database Programming. In *Python Programming Fundamentals* (pp. 145-162). Springer, London
30. CCCBDB - Computational Chemistry Comparison and Benchmark Database
31. Selenium HQ - Official Website
32. Dewar, M. J. S.; Zoebisch, E. G.; Healy, E. F.; Stewart, J. J. P. "Development and use of quantum mechanical molecular models. 76. AM1: a new general purpose quantum mechanical molecular model", *Journal of the American Chemical Society*, 1985, 107 (13), 3902–3909
33. R. Schroeder and B. Ullrich, Photovoltaic hybrid device with broad tunable spectral response achieved by organic/inorganic thin-film heteropairing, *Applied Physics Letters*, 2002 Vol. 81, No. 3, pp. 556-558.
34. Valery N. Bliznyuk, Jacek Gasiorowski, Alexander A. Ishchenko, Gennadiy V. Bulavko, Nadezhda A. Derevyanko, Niyazi Serdar Sariciftci, Photoresistance and photo induced current hysteresis in bulk heterojunction systems P3HT–PCBM–polymethine dye, *Organic Electronics*, 2014, No. 15, pp. 1105–1112.

35. Schulze K., Uhrich C., Schüppel R., Leo K., Pfeiffer M., Brier E., Reinold E., Bäuerle P. // Efficient Vacuum-Deposited Organic Solar Cells Based on a New Low-Bandgap Oligothiophene and Fullerene C₆₀. *Adv. Mater.* 2006. V. 18. P. 2872-2875.
36. Martin A. Green, Keith Emery, Yoshihiro Hishikawa, Wilhelm Warta and Ewan D. Dunlop, Solar cell efficiency tables (Version 45), *Prog. Photovolt: Res. Appl.* 2015; 23:1–9.
37. Hui Huang, Jinsong Huang, *Organic and Hybrid Solar Cells*, Springer International Publishing, London, 2014.
38. Frederik C. Krebs, *Stability and Degradation of Organic and Polymer Solar Cells*, Wiley, Chichester, 2012.
39. M.C. Scharber, N.S. Sariciftci, Efficiency of bulk-heterojunction organic solar cells, *Progress in Polymer Science* 38 (2013) 1929–1940.
40. Sam-Shajing Sun, N.S. Sariciftci, *Organic Photovoltaics. Mechanisms, Materials, and Devices*, CRC Press, Boca Raton, 2005.
41. Alan J. Heeger, 25th Anniversary Article: Bulk Heterojunction Solar Cells: Understanding the Mechanism of Operation, *Adv. Mater.* 2014, 26, 10–28.
42. Г.В. Булавко, Н.А. Давиденко, А.А. Ищенко, С.Л. Студзинский, А.Г. Шкавро, Особенности фотовольтаических свойств пленок на основе фотопроводящего полимера и органического красителя в образцах со свободной поверхностью и между электрическими контактами, *Письма в ЖТФ*, 2015, том 41, вып. 4.
43. James William Ryan, Eduardo Anaya-Plaza, Andres de la Escosura, Tomas Torres, Emilio Palomares, Small molecule solar cells based on a series of water-soluble zinc phthalocyanine donors, *Chem. Commun.*, 2012, 48, 6094–6096.
44. Koen Vandewal, Scott Himmelberger, Alberto Salleo, Structural Factors That Affect the Performance of Organic Bulk Heterojunction Solar Cells, *Macromolecules*, xxxx, xxx, xxx–xxx.