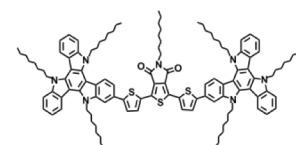
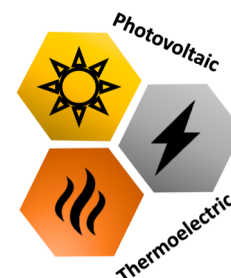


Offre de thèse :

**Modélisation par dynamique moléculaire ab initio du transport excitonique et du transport thermique dans les semiconducteurs organiques pour la collecte d'énergie**

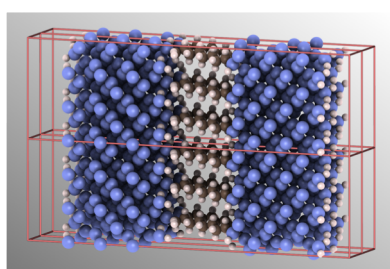
Les semiconducteurs organiques, assemblages de polymères ou de petites molécules, sont utilisés pour fabriquer des cellules photovoltaïques (PV) dans l'équipe MaCEPV du laboratoire ICube à Strasbourg. Le but de cette thèse est d'étudier par modélisation à l'échelle atomique certaines problématiques cruciales pour l'optimisation de ces dispositifs, pour ainsi compléter les compétences expérimentales en synthèse et caractérisation de matériaux et de dispositifs de l'équipe et de ses collaborateurs. En particulier, la thèse se focalisera sur deux points. Le premier est celui du transport des excitons générés par absorption de la lumière, et de leur longueur de diffusion dans le matériau, qui impacte directement le rendement de la cellule PV. Le second est celui du transport de chaleur dans ces semiconducteurs organiques dont les mécanismes sont beaucoup moins compris à ce jour que pour leurs homologues inorganiques. Ces effets sont très importants pour accompagner le développement de dispositifs thermoélectriques organiques.



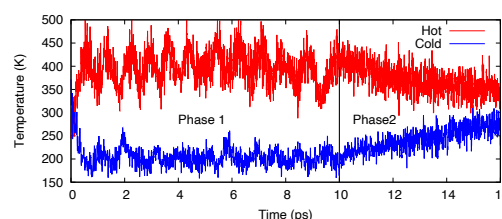
*Molécule pour le PV. J. Mater. Chem. C5,10794 (2017).*

La méthode de modélisation qui sera utilisée est la dynamique moléculaire ab initio selon l'approche Car-Parrinello telle qu'implémentée dans le code CPMD ([www.cpmc.org](http://www.cpmc.org)). Les calculs seront réalisés sur des ordinateurs locaux (mésocentre de Strasbourg) et sur les centres de calcul nationaux.

La thèse se déroulera dans l'équipe MaCEPV d'ICube, et dans un environnement local stimulant à la fois du point de vue des simulations, avec un consortium local d'experts de la méthode CPMD, et expérimental, puisque l'équipe fait partie d'un consortium de chimistes et physiciens travaillant sur les semiconducteurs organiques et leurs applications.



*Couche moléculaire entre blocs de Si. J. Chem. Phys. 153, 074704 (2020).*



*Transitoire de température via une couche moléculaire. J. Chem. Phys. 153, 074704 (2020).*

Compétences nécessaires : Physique du solide et/ou sciences des matériaux à l'échelle atomique et/ou mécanique statistique – Intérêt pour les simulations à l'ordinateur.

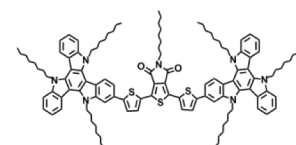
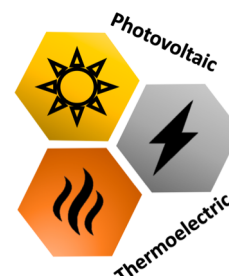
Le financement est garanti via une bourse fléchée de l'université de Strasbourg. La thèse commencera le 1<sup>er</sup> octobre 2021.

Pour plus de renseignements et/ou candidater, contacter Mme Evelyne MARTIN (directrice de thèse) à [evelyne.martin@unistra.fr](mailto:evelyne.martin@unistra.fr)

PhD offer :

## First-principles molecular dynamics modelling of excitonic transport and thermal transport in organic semiconductors for energy harvesting

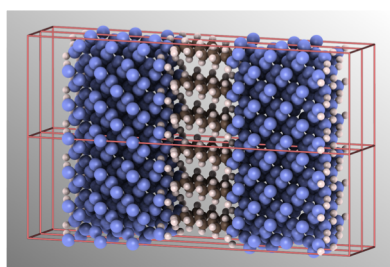
Organic semiconductors, blends of polymers or small molecules, are used in photovoltaic (PV) cells developed in the team MaCEPV of the ICube laboratory in Strasbourg. The aim of the thesis is to study by atomic-scale modeling crucial issues for the optimization of these devices, to complement the experimental skills in synthesis and characterization of materials and devices of the team and its local collaborators. More precisely, the thesis will focus on two points. The first point is the transport of the excitons generated by light absorption, and their diffusion length in the material, that directly impacts the efficiency of the PV cell. The second is that of heat transport in these organic semiconductors whose mechanisms are much less understood to date than for their inorganic counterparts. Unraveling the transport mechanisms in these materials is essential for the development of organic thermoelectric devices.



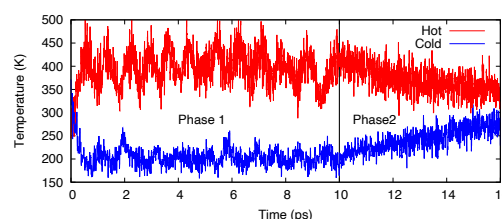
*Molecule for PV. J. Mater. Chem. C5,10794 (2017).*

The modeling method that will be used is first-principles molecular dynamics according to the Car-Parrinello approach as implemented in the CPMD code ([www.cpmc.org](http://www.cpmc.org)). The calculations will be carried out on regional (at the university of Strasbourg) and national HPC centers.

The thesis will take place in the team MaCEPV of the ICube lab, and in a local environment stimulating both from a simulation point of view, with a local consortium of CPMD experts, and from the experimental side, as the team is part of a consortium of chemists and physicists working on organic semiconductors and their applications.



*Molecular layer between silicon blocks. J. Chem. Phys. 153, 074704 (2020).*



*Temperature transient via a molecular layer. J. Chem. Phys. 153, 074704 (2020).*

Required skills: Solid-state physics and/or material sciences at the atomic scale and/or statistical mechanics – Interest for computer simulations.

The funding is guaranteed via a grant « fléchée » from the University of Strasbourg. The thesis will begin on 1<sup>st</sup> October 2021.

For further information and/or to apply contact Mrs Evelyne MARTIN (thesis supervisor) at [evelyne.martin@unistra.fr](mailto:evelyne.martin@unistra.fr)