

Titre : Accepteurs non dérivés de fullerènes pour le photovoltaïque organique.

Directeur(s) de Thèse : Thomas HEISER et Patrick LEVEQUE

Unité(s) d'Accueil(s) : ICube D-ESSP

Établissement de rattachement : Université de Strasbourg

Collaboration(s) (s'il y a lieu) : ICPEES, IPCMS

Rattachement à un programme (s'il y a lieu) : /

Résumé :

Le rendement de conversion des cellules photovoltaïques organiques a connu ces dernières années une forte augmentation pour dépasser régulièrement celui de cellules à base de silicium amorphe. Ces performances sont souvent liées à l'utilisation de polymères semiconducteurs fluorés (matériau photo-actif donneur d'électrons). A ICube, un tel polymère en mélange avec du PC₇₁BM a permis de dépasser les 10% de rendement de conversion.

Pour aller encore plus loin, on doit s'affranchir des limites du PC₇₁BM, à savoir des niveaux énergétiques difficiles à moduler et une absorption limitée dans le spectre solaire. L'utilisation d'accepteurs d'électrons non dérivés de fullerènes (ou NFA pour Non Fullerene Acceptors) a pour but de faire sauter ces deux verrous afin de dépasser les 15 % de rendement de conversion. De plus, les NFA pouvant être soit des petites molécules, soit des polymères, leur utilisation ouvre tout un nouveau champ d'investigation sur les mélanges polymère/polymère pour le photovoltaïque organique et en particulier sur l'influence de la morphologie de ce type de mélange sur les propriétés optoélectroniques.

Le sujet de thèse proposé est en collaboration étroite avec des collègues chimistes (Dr Nicolas Leclerc à ICPEES) pour la synthèse des NFA et des collègues spécialistes de la structure des matériaux organiques (Dr Benoît Heinrich à l'IPCMS). L'étudiant(e) profitera de l'ensemble des techniques de la plateforme C³Fab pour mener à bien ce projet fortement pluridisciplinaire allant de la caractérisation des matériaux organiques semiconducteurs à l'élaboration et la caractérisation de dispositifs photovoltaïques organiques. Des connaissances de base sur la physique des dispositifs électroniques seront un plus.

Contact : Patrick LEVEQUE
patrick.leveque@unistra.fr
+33(0)388020816

Descriptif du sujet

Le rendement de conversion des cellules photovoltaïques organiques a connu ces dernières années une forte augmentation pour dépasser régulièrement celle de cellules à base de silicium amorphe (environ 10,2 %ⁱ). En particulier, les cellules organiques dont la couche active est constituée d'un mélange de polymère fluoré donneur d'électrons et d'un dérivé soluble de fullerène accepteur d'électrons démontrent depuis 4 ans environ des rendements de conversion supérieurs à 10,8 %ⁱⁱ. Au sein de l'équipe d'accueil, un tel polymère fluoré (*Figure 1*) synthétisé par nos collègues chimistes (N. Leclerc, ICPEES) a permis de dépasser les 10 % de rendement au sein du laboratoire ICube.

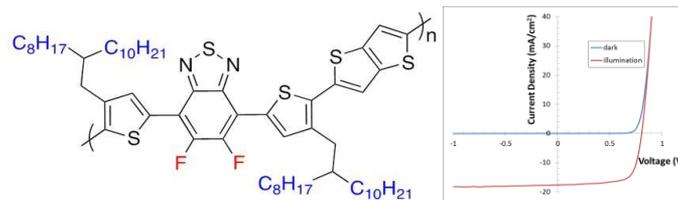


Figure 1 : structure chimique d'un des polymères fluorés déjà étudié à ICube (gauche) et les mesures (J-V) correspondantes (droite).

Pour dépasser ces rendements de conversion, on doit s'affranchir des limites inhérentes à la petite molécule accepteur d'électrons utilisée en mélange avec les polymères fluorés (le plus souvent un dérivé soluble du fullerène (*Figure 2*)), à savoir une absorption très limitée dans le spectre solaire et des niveaux électroniques frontières peu ajustablesⁱⁱⁱ.

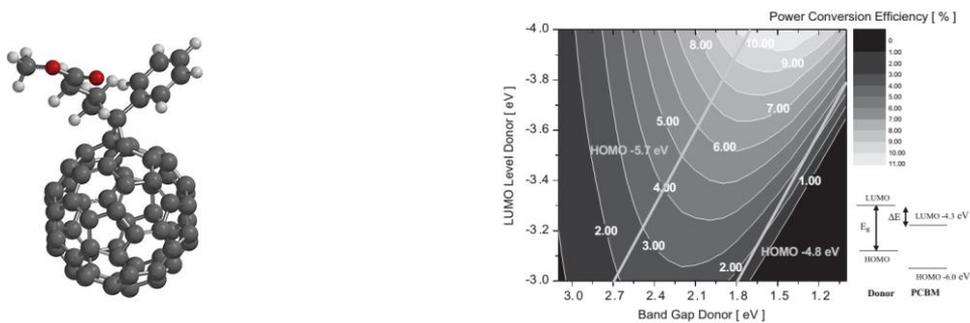


Figure 2 : structure chimique du PC₆₁BM (gauche) et rendements maximums espérésⁱⁱⁱ.

Ceci est désormais possible grâce aux accepteurs d'électrons non dérivés de fullerènes (ou NFA pour Non Fullerene Acceptors). Ces NFA peuvent être des petites molécules^{iv} ou des polymères^v et ils permettent, grâce à une complémentarité d'absorption dans le visible avec le donneur d'électrons, d'atteindre des rendements supérieurs à 13 %. De plus, l'incidence de la morphologie des mélanges polymère/polymère sur les performances photovoltaïques est un sujet peu étudié à l'heure actuelle. Grâce aux compétences de nos collègues spécialisés dans la structure des matériaux organiques (B. Heinrich, IPCMS), l'étude des NFA au sein de l'équipe devrait permettre de réelles avancées dans ce domaine encore peu exploré.

Dans le cadre de cette thèse pluri disciplinaire, l'étudiant(e) sera amené(e) à caractériser les propriétés optoélectroniques des semiconducteurs organiques utilisés (spectres d'absorption et d'émission, mobilité de porteurs de charges, propriétés photovoltaïques etc...). Pour cela, l'étudiant(e) sera amené(e) à élaborer différents dispositifs à base de matériaux organiques tels que des transistors à effet de champ (O-FETs pour Organic Field Effect Transistors), des dispositifs à intensité limitée par la charge d'espace (SCLC pour Space Charge Limited Current devices) et des cellules solaires. L'étudiant profitera pour cela de l'ensemble des techniques d'élaboration et de caractérisation de la plateforme disponible à ICube (5 boîtes à gants sous atmosphère neutre avec tous les équipements nécessaires) ainsi que du savoir-faire de ses

encadrants et de l'équipe technique. Ces données optoélectroniques seront complétées par les données chimiques fournies par les collègues chimiste (masse molaire, position des niveaux électroniques) et par les données structurales fournies par nos collègues strasbourgeois (structure cristallographique, taille des domaines). L'ensemble de ces résultats expérimentaux permettront de mieux comprendre les relations structure chimique/propriétés optoélectroniques/propriétés structurales des NFA en m »lange avec des polymères efficaces.

Des connaissances de base sur la physique des dispositifs électroniques (transistors à effet de champ, cellules solaire) est un plus. Une grande ouverture d'esprit pour mener à bien ce projet en collaboration avec des chercheurs d'horizons différents est nécessaire.

ⁱ T. Matsui *et al.*, *Proc. 28th European Photovoltaic Solar Energy Conference* **2013**; 2213.

ⁱⁱ Y. Liu *et. al.*, *Nat. Commun.* **2014** 5293.

ⁱⁱⁱ M.C. Scharber *et. al.*, *Adv. Mater.* **2006** 18, p. 789

^{iv} W. Zhao *et. al.* *J. Am. Chem. Soc.* **2017** 139, p. 7148

^v X. Xu *et al.*, *Adv. Energy Mater.* **2018** 8, 1700908