

Projet de Doctorat, Financement Jeune HDR EDSC :

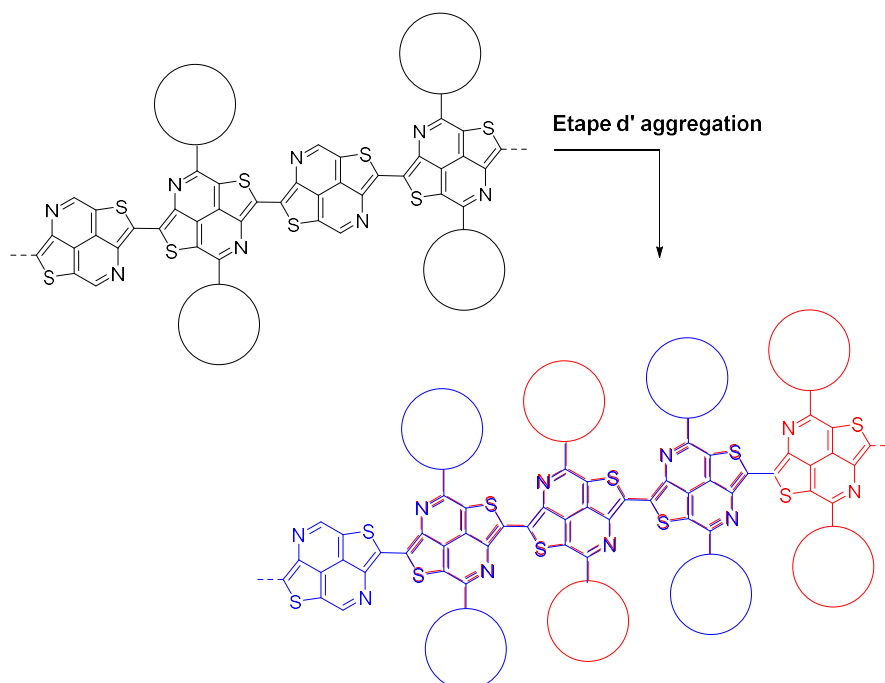
Ingénierie moléculaire de plateformes pi-conjuguées à faible gap pour les applications photovoltaïques de nouvelles générations

Contexte scientifique et enjeux du projet

Depuis les travaux fondateurs d'Alan Heeger, Alan MacDiarmid et Hideki Shirakawa¹, récompensés par le prix Nobel en 2000, la compréhension des relations entre la structure moléculaire et les performances électroniques des matériaux organiques est devenue un pilier de la recherche en science des matériaux. Un paramètre central de ces dispositifs réside dans l'écart énergétique entre les bandes de conduction et de valence, défini à l'échelle moléculaire par la différence de potentiel entre les orbitales frontières HOMO et LUMO. Alors qu'un polymère de référence comme le polyhexylthiophène présente un gap d'environ 2 eV, les applications de pointe telles que les photodétecteurs infrarouges ou les cellules photovoltaïques tandem exigent des matériaux dits à «faible gap»,² idéalement inférieur à 1,5 eV. L'obtention d'un gap proche de 1,0 eV est notamment cruciale pour maximiser le rendement théorique de conversion de l'énergie solaire ou pour concevoir des dispositifs semi-transparents.³⁻⁵

Stratégies de recherche et objectifs

Le défi majeur de ce projet consiste à pallier la difficulté de prédire les propriétés semi-conductrices à l'état solide. Si la modélisation permet d'anticiper les caractéristiques d'une molécule isolée, l'organisation supramoléculaire lors de l'empilement cristallin reste complexe à maîtriser. Le programme de recherche s'articulera autour de l'ingénierie de nouvelles plateformes pi-conjuguées visant à optimiser le recouvrement orbitalaire. Ici, la stratégie reposera sur une distribution alternée de chaînes alkyles, qui pourrait conduire à un enchâssement face à face des molécules.



exemple d'empilement espéré de deux chaînes polymères

Pour ce faire, le projet explorera le remplacement des unités thiophènes par des analogues du pyrène ou du pérylène précédemment obtenus au laboratoire, lesquels intègrent des cycles fusionnés de thiophènes et de pyridines. L'exploitation d'effets push-pull et d'interactions spécifiques soufre-azote^{6,7} constituent un axe fort pour abaisser drastiquement le gap électronique confirmé par les premiers résultats expérimentaux et par modélisation sur ces nouvelles plateformes aromatiques.

Profil du candidat et missions

Le candidat ou la candidate devra posséder une solide formation en chimie organique de synthèse. Sa mission principale consistera à élaborer ces nouvelles structures moléculaires et à assurer leur caractérisation optoélectronique complète. Le travail inclura également des études de cristallisation et la réalisation de dépôts sous forme de films minces. Selon son appétence, le doctorant pourra également s'investir dans la modélisation moléculaire ou dans la phase de fabrication et de test des dispositifs photovoltaïques, offrant ainsi une approche transversale allant de la synthèse à l'application.

Cadre administratif et modalités de candidature

Ce contrat doctoral est rattaché à l'École Doctorale des Sciences Chimiques (ED SC) de l'Université de Bordeaux. En accord avec les exigences d'excellence de l'école, il est fortement recommandé que les candidats justifient d'une moyenne minimale de 12/20 sur l'ensemble des trois premiers semestres de Master ou des deux premières années d'école d'ingénieur. Le dossier de candidature devra comprendre un curriculum vitae détaillé, une lettre de motivation, les relevés de notes des 3 derniers semestres ainsi qu'une fiche de candidature officielle. Les dossiers complets doivent être déposés avant le 20 avril 2026. Les candidats sélectionnés seront conviés à une audition devant une commission d'experts les 21 ou 22 mai 2026.

En amont de cette procédure, envoyez votre candidature à l'adresse yohan.nicolas@u-bordeaux.fr

Référence bibliographique

- (1) Shirakawa, H.; Louis, E. J.; MacDiarmid, A. G.; Chiang, C. K.; Heeger, A. J. Synthesis of Electrically Conducting Organic Polymers: Halogen Derivatives of Polyacetylene, (CH) X. J. Chem. Soc. Chem. Commun. 1977, No. 16, 578.
- (2) Skotheim, T. A. Conjugated Polymers: Theory, Synthesis, Properties, and Characterization, 3rd ed.; CRC Press, 2006
- (3) Ameri, T.; Dennler, G.; Lungenschmied, C.; Brabec, C. J. Organic Tandem Solar Cells: A Review. Energy Environ. Sci. 2009, 2 (4), 347–363.
- (4) Ameri, T.; Li, N.; Brabec, C. J. Highly Efficient Organic Tandem Solar Cells: A Follow up Review. Energy Environ. Sci. 2013, 6 (8), 2390–2413.
- (5) Ullah, F.; Chen, C.-C.; Choy, W. C. H. Recent Developments in Organic Tandem Solar Cells toward High Efficiency. Adv. Energy Sustain. Res. 2021, 2 (4), 2000050.
- (6) Scharber, M. C.; Sariciftci, N. S. Low Band Gap Conjugated Semiconducting Polymers. Adv. Mater. Technol. 2021, 6 (4).
- (7) Roncali, J. Molecular Engineering of the Band Gap of π -Conjugated Systems: Facing Technological Applications. Macromol. Rapid Commun. 2007, 28 (17), 1761–1775.