

# **Titre : Étude théorique et numérique du fonctionnement des cellules solaires organiques**

Directeur(s) de Thèse : LEROY Yann, Maître de Conférence, HDR

Unité(s) d'Accueil(s) : ICube / D-ESSP / MaCEPV

Établissement de rattachement : Unistra

Collaboration(s) (s'il y a lieu) :

Freiburg Materials Research Center – FMF,  
Centre Suisse d'Électronique et de Microtechnique – CSEM,  
collaboration interne avec le groupe de PV Organique expérimenta

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

Résumé:

Le développement de cellules solaires organiques, basées majoritairement sur des hétérojonctions en volume constituées de matériaux semi-conducteurs donneurs et accepteurs, fait l'objet d'une recherche expérimentale intensive depuis ces dernières décennies. En comparaison, peu de modèles théoriques satisfaisants ont été élaborés pour comprendre et expliquer le mécanisme à l'origine de la génération de charges dans ces cellules. Pourtant, de tels modèles permettraient une optimisation efficace des cellules réalisées expérimentalement. Dans cet objectif, un modèle bidimensionnel de la couche active de ces cellules a été développé dans notre groupe, couplé à une méthode spécifique d'extraction de paramètres. Le modèle, évolutif, est capable de prendre en compte diverses hypothèses du mécanisme complexe de génération des charges et il permet d'obtenir de nombreuses caractéristiques de la cellule (densités de charges, carte du champ électrique, courbes JV, performances, ...). Le travail de thèse portera principalement sur trois aspects: (1) la prise en compte des phénomènes d'interférences optiques au sein de la cellule solaire; (2) la remise en question de l'hypothèse d'une morphologie moyenne de la couche active; et (3) l'amélioration des lois de mobilité de charges dans les domaines donneurs et accepteurs. Ce dernier point, motivé par de récentes observations, nécessitera d'étudier plus en détail les modèles de transistors organiques existants.

## Descriptif du sujet (en complément, au format Word ou pdf)

Les contraintes énergétiques actuelles imposent de trouver des solutions alternatives à la production d'énergie destinée à nos usages courants. L'exploitation du rayonnement solaire est bien évidemment l'une des voies privilégiées, et le développement de l'énergie photovoltaïque suscite de plus en plus d'intérêt. Si les cellules solaires à base de semi-conducteurs inorganiques entament leur troisième génération, l'avènement de l'électronique organique permet d'envisager de nouvelles cellules solaires basées sur des semi-conducteurs organiques (de type donneur ou accepteur). Ces dernières constituent une alternative plus économique comparée à la filière inorganique, mais un effort important est encore nécessaire pour arriver aux mêmes rendements de conversion.

Au cours des dernières décennies, les cellules solaires organiques ont ainsi donné lieu à des recherches intensives, car elles ont le potentiel d'être à la fois flexibles, légères, et peu coûteuses. Parmi les diverses architectures de cellules organiques possibles, l'hétérojonction en volume est l'une des plus courantes: la couche active de la cellule est composée d'un mélange des matériaux donneurs et accepteurs permettant à la fois une génération efficace de charges libres et une bonne extraction de ces dernières. Un grand nombre d'études expérimentales leur est consacré, alors que seuls quelques modèles théoriques satisfaisants ont été élaborés jusqu'à présent pour comprendre et expliquer les mécanismes à l'origine de la génération et de l'extraction des charges dans ces cellules. Pourtant, de tels modèles permettraient à terme une optimisation efficace des cellules réalisées expérimentalement.

C'est dans cet objectif, qu'un modèle bidimensionnel de la couche active de ces cellules vient d'être développé dans notre groupe. Le modèle, évolutif, est capable de prendre en compte diverses hypothèses des mécanismes complexes de génération et d'extraction des charges. La résolution des équations gouvernant les mécanismes permet d'obtenir de nombreuses caractéristiques de la cellule (densités de charges, carte du champ électrique, courbes JV, performances, ...) qu'il est alors possible d'analyser.

La complexité des mécanismes mis en jeu nécessite de prendre en considération plusieurs étapes et donc un grand nombre de paramètres physiques, dont certains sont difficiles à évaluer expérimentalement. Afin de pallier à cette indétermination, une méthode spécifique d'extraction de paramètres a également été élaborée pour pouvoir les déduire indirectement à partir de mesures expérimentales classiques.

Compte tenu des résultats obtenus récemment, aussi bien expérimentalement que par les simulations, le travail de thèse portera principalement sur trois aspects importants.

(1) Le modèle est actuellement limité à la couche active uniquement, il n'est donc pas possible de prendre en compte les effets d'interférences optiques inhérents aux couches nanométriques constituant la cellule complète. En effet, même si un taux de génération uniforme d'excitons au sein de la couche active permet de reproduire assez fidèlement les effets d'un taux de génération non-uniforme, la valeur précise du taux de génération est quant à elle impossible à prédire à partir des seules caractéristiques géométriques de la cellule. Par conséquent, l'un des objectifs de la thèse sera d'introduire une modélisation optique adéquate de la cellule solaire complète afin de pouvoir définir directement le taux de génération d'excitons non-uniforme.

(2) Le mélange des matériaux semi-conducteurs de types donneur et accepteur qui constituent l'hétérojonction en volume donne lieu à une morphologie complexe de la couche active des cellules solaires organiques. Le modèle bidimensionnel élaboré suppose qu'il est possible de reproduire les effets de la morphologie réelle à l'aide d'une géométrie équivalente plus simple à modéliser. Cependant, il semble que cette hypothèse soit trop drastique. Il sera donc demandé au candidat de la reconsidérer, en

menant des simulations théoriques qui conduiront à une nouvelle géométrie plus satisfaisante.

(3) Parmi les nombreux paramètres intervenant dans le modèle, la mobilité des charges (électrons ou trous) dans les domaines donneurs et accepteurs a une grande importance. Or, la détermination des mobilités est effectuée à partir de mesures réalisées sur des transistors organiques dont le régime de fonctionnement n'est pas identique à celui d'une cellule solaire. Dans le cadre de la thèse, il faudra donc revoir les modèles de mobilité afin de les rendre compatibles aussi bien avec les cellules solaires qu'avec les transistors organiques. À cette fin, une étude détaillée des modèles de transistors organiques existants pourra être envisagée.

Afin de valider les résultats de ses simulations, le candidat bénéficiera de collaborations avec des équipes expérimentales au sein du Laboratoire ICube (groupe de Photovoltaïque Organique expérimental de l'équipe MaCEPV), mais aussi en Allemagne (Freiburg Materials Research Center – FMF), ou encore en Suisse (Centre Suisse d'Électronique et de Microtechnique – CSEM).

Connaissances et compétences requises :

Le candidat devra avoir une bonne maîtrise de la Physique de la Matière Condensée et des Semiconducteurs, de la Mécanique Quantique, ainsi que du Calcul Scientifique.

Bibliographie :

- A. Raba, Y. Leroy et A.-S. Cordan, J. Appl. Phys. 115, 054508 (2014)
- C. Deibel and V. Dyakonov, Rep. Prog. Phys. 73, 096401 (2010)
- N. Tessler et al., Adv. Mater. 21, 2741–2761 (2009)
- B. Ray and M. A. Alam, Appl. Phys. Lett. 99, 33303 (2011)
- H. K Kodali and B. Ganapathysubramanian, Modelling Simul. Mater. Sci. Eng. 20, 035015 (2012)