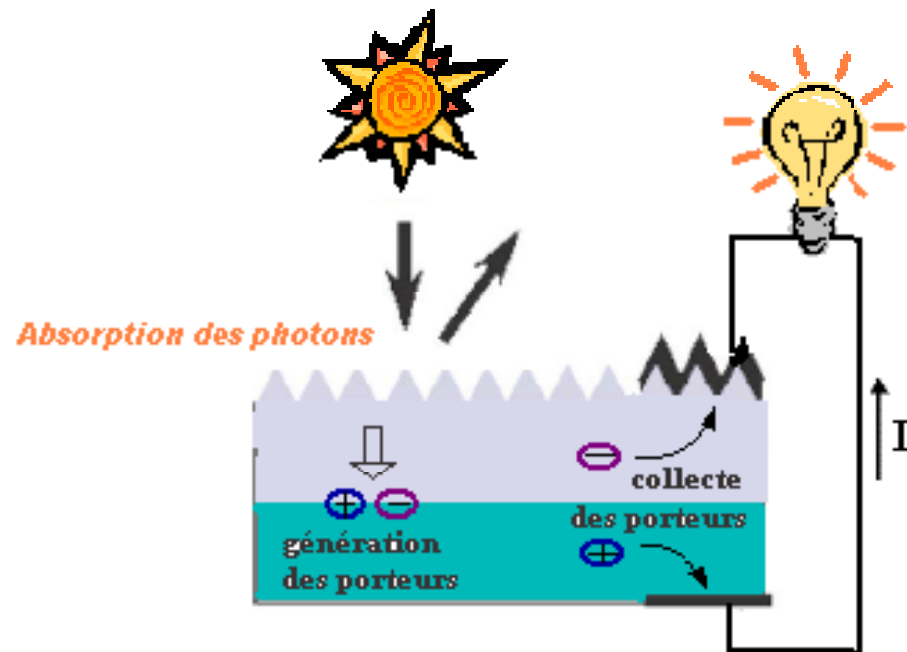


*Synthèse de Nouveaux Matériaux Polymères pour des  
Applications Cellules Solaires Photovoltaïques*

**Lara PERRIN, Sylvain BRUNEL,  
Régis MERCIER, Stéphane GUILLEREZ**

# Les cellules solaires organiques



Cellule solaire organique (CEA-LCS)

## Leurs avantages :

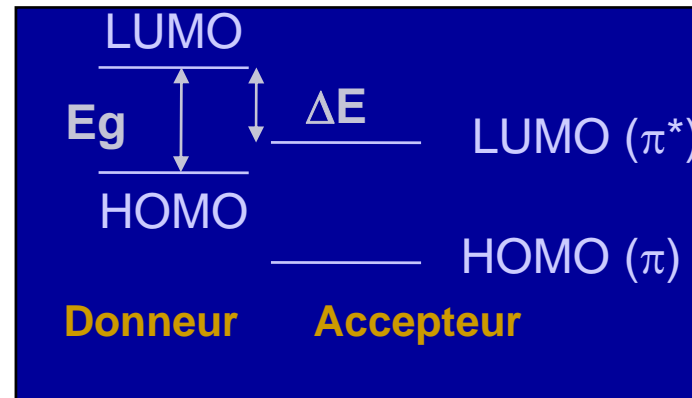
- Faible coût
- Fabrication simple
- Possibilité supports souples

## Ce qu'il faut améliorer:

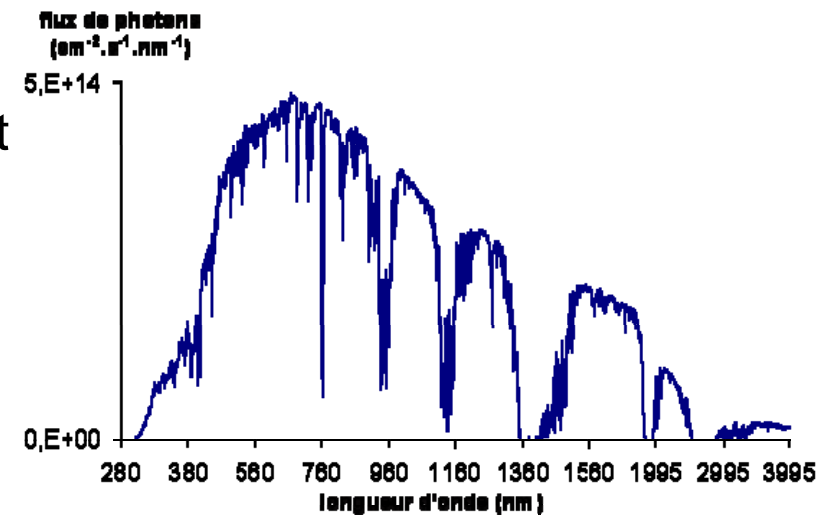
- Le rendement ( < 5% )
- La durée de vie (perte d'efficacité de - 25% au bout d'un an d'utilisation)

# Matériaux polymères photoactifs à faible gap pour la conversion photovoltaïque

- $E_g = \text{Gap}$

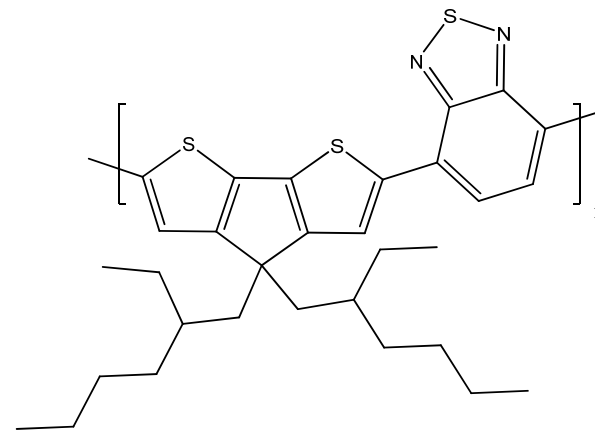
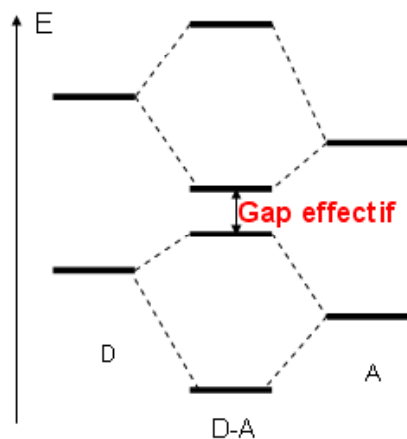


- Diminuer le gap du matériau donneur pour augmenter le rendement (si l'on veut pouvoir obtenir des rendements  $> 5\%$ )
- Diminuer le gap entraîne un plus large recouvrement spectral avec le spectre d'émission du soleil



# Projet

- Travaux de *Konarka Austria*



- Rendement en cellule avec PC71BM comme accepteur : 3,5%
- Bonne mobilité des trous ( $>10^{-2} \text{ cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$ )
- Bonne solubilité grâce aux ramifications

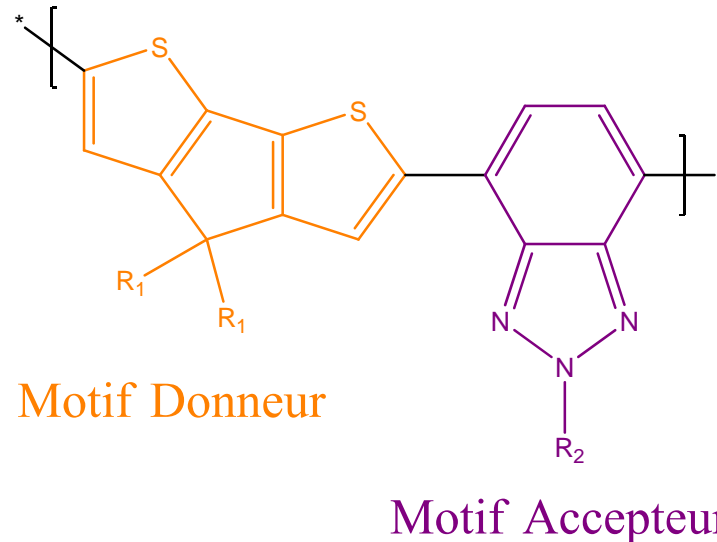
MAIS...Mauvais agencement des chaînes par effet stérique, dû aux longues chaînes alkyles

➔ **Conjugaison limitée, rendement diminué.**

- 
- Mühlbacher D., Scharber M., Morana M., Zhu Z., Waller D., Gaudiana R., Barbec C. *Advanced Materials*, **2006**, vol 18, p 2884-2889
  - Scharber M., Mühlbacher D., Koppe M., Denk P., Waldauf C., Heeger A.J., Barbec C. *Advanced Materials*, **2006**, vol 18, p 789-794.

# Projet

- Polymère Low Band Gap envisagé :



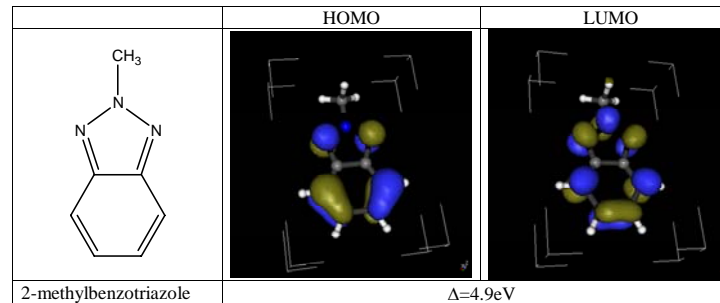
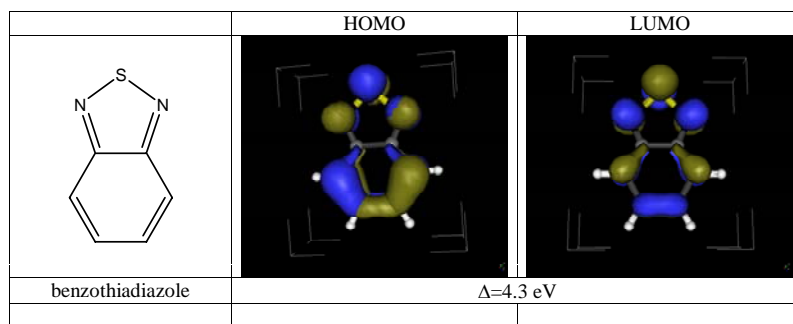
- Alternance de motifs **Donneur/Accepteur**
- Chaînes  $R_1$  plus courtes pour éviter l'encombrement stérique
- Possibilité de greffer une chaîne alkyle  $R_2$  sur l'atome d'**azote** pour la solubilité

➔ **Bon compromis entre solubilité et mobilité des charges !**

# Projet

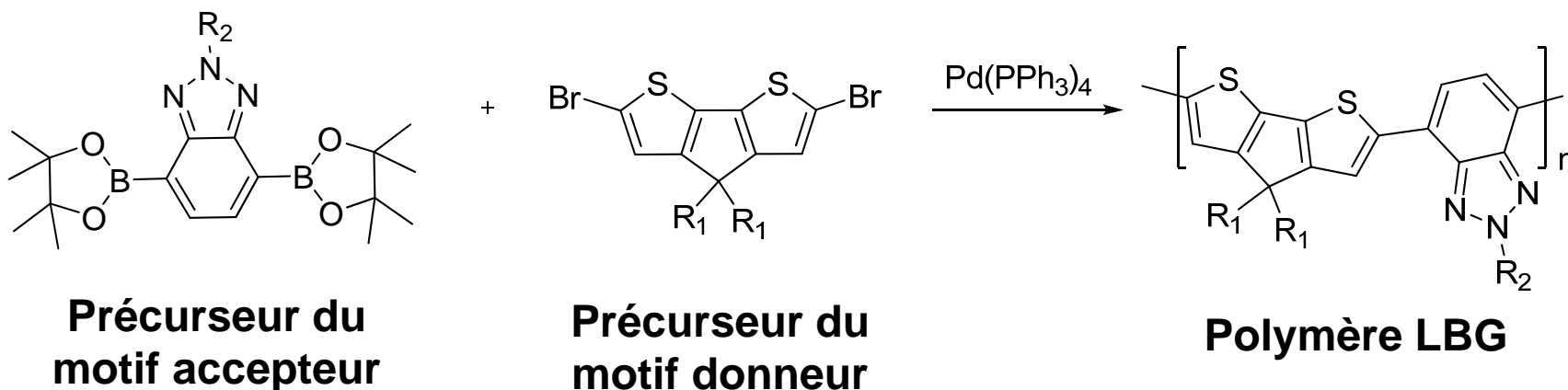
- Modélisation par Gaussian 98 (Révision A.3)
- Niveau LUMO : -1,2 eV pour le benzotriazole  
-2,3 eV pour le benzothiadiazole

➡ Réduction attendue du gap



# Projet

- Stratégie de synthèse : Couplage de Suzuki

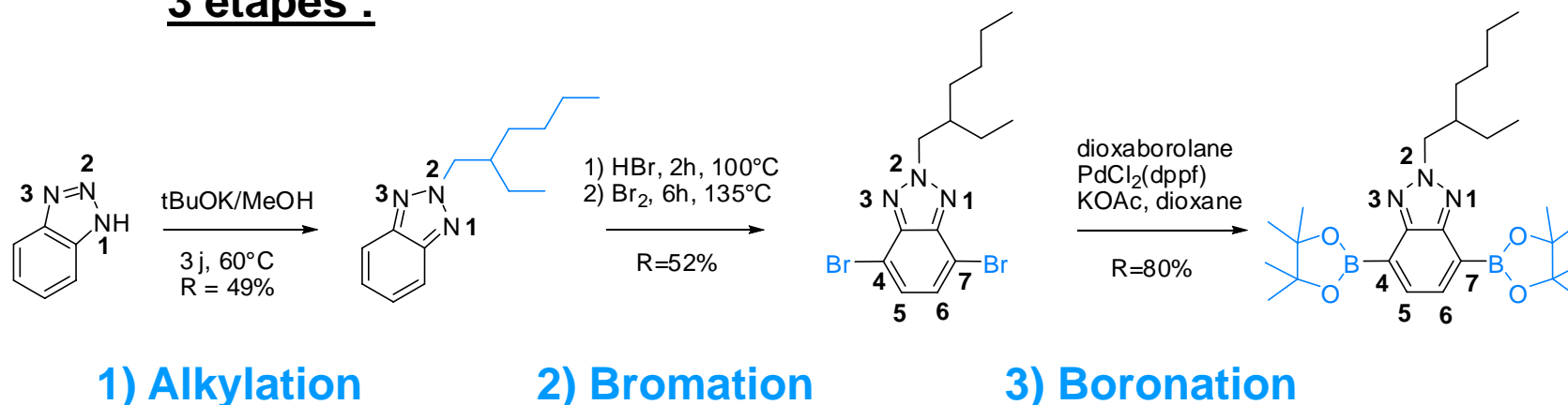


- Faire varier les proportions des motifs accepteurs (benzotriazole) et donneurs (cyclopentadithiophène) de la chaîne afin de voir l'influence sur le gap ; puis modifier la nature du motif donneur dans le copolymère

# Synthèse des composés :

- Stratégie de synthèse du précurseur accepteur :

## 3 étapes :

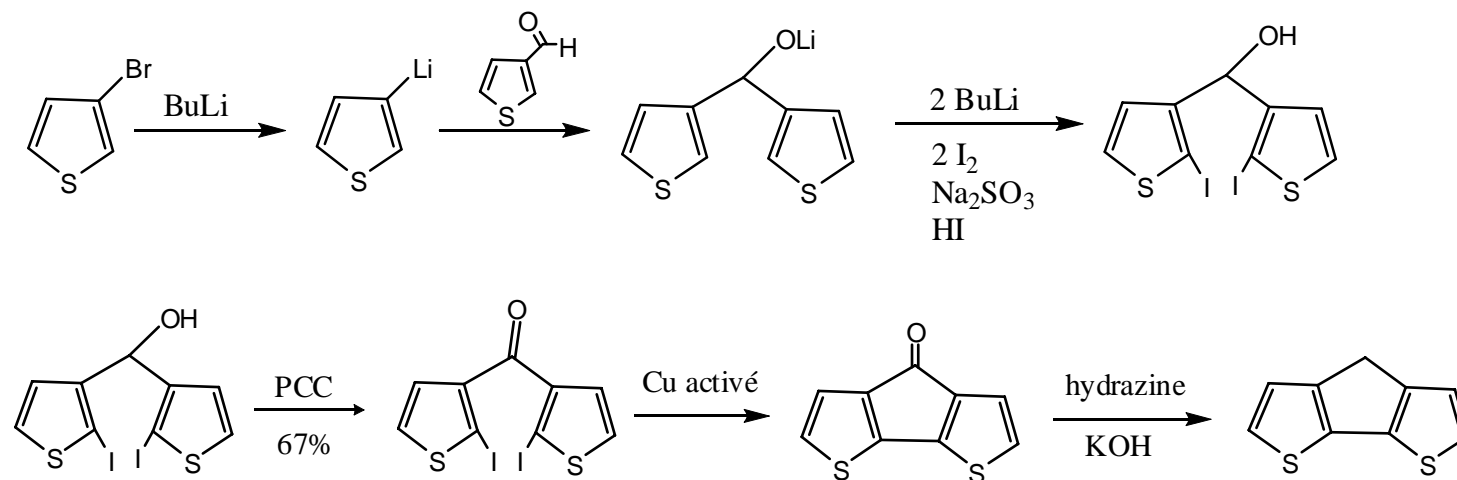


- Stratégie de synthèse du précurseur donneur :

Plusieurs modes opératoires inspirés de la littérature ont été testés ...



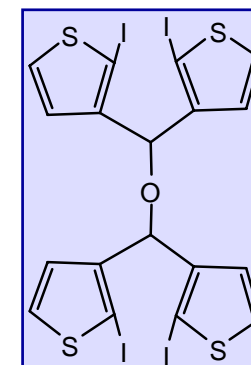
## Voie de synthèse selon Brzezinsky :



**Synthèse multi étapes**

**Très faible rendement**

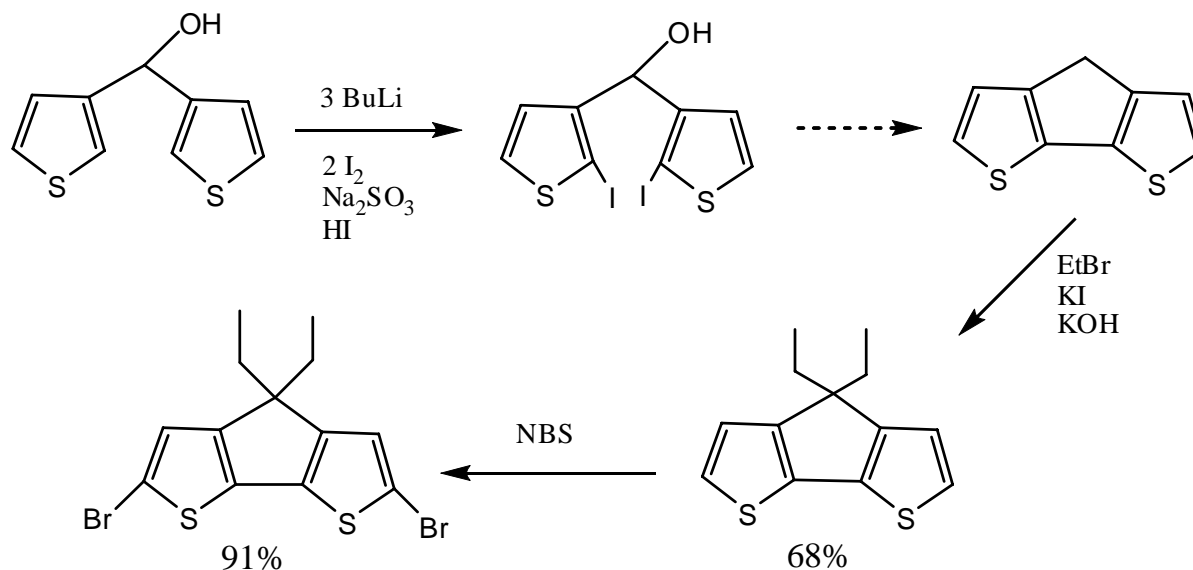
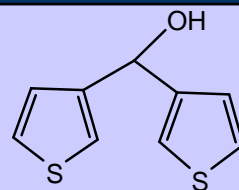
**Non reproductibilité de la synthèse : formation importante d'un produit secondaire de type éther (étape 3)**



Brzezinski, J. Z., et Reynolds, J. R. *Synthesis*, **2002**, 1053-1056.

Coppo, P., et al. *Macromolecules*, **2003**, 36, 2705-2711.

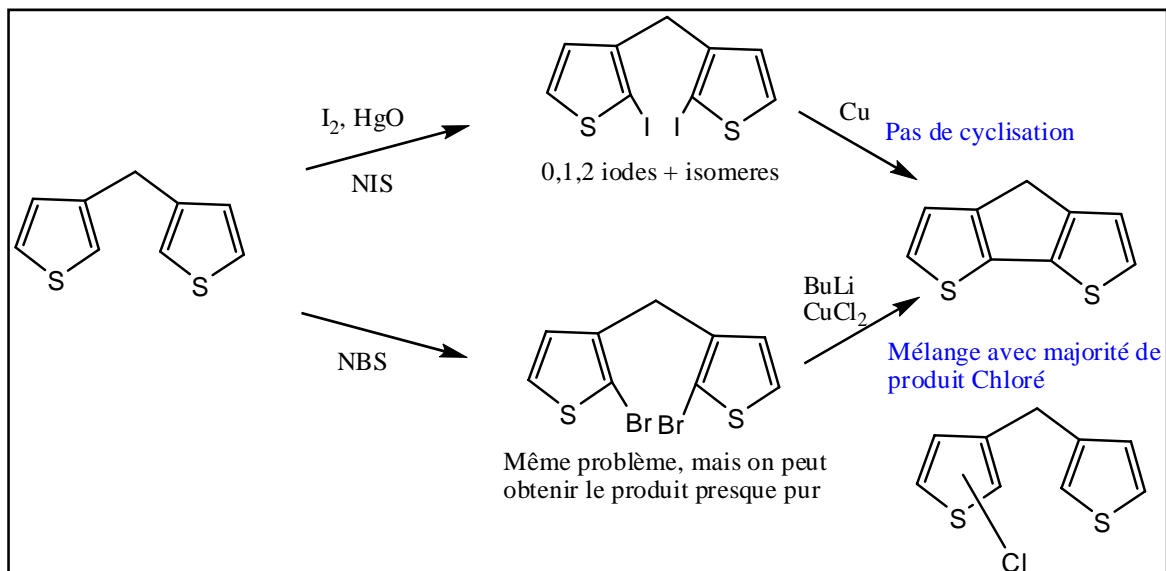
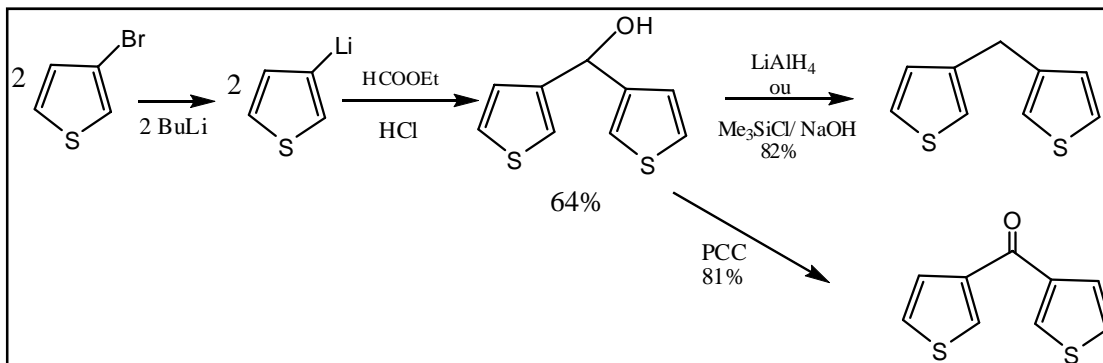
Adaptation de la méthode de Brzezinsky à :



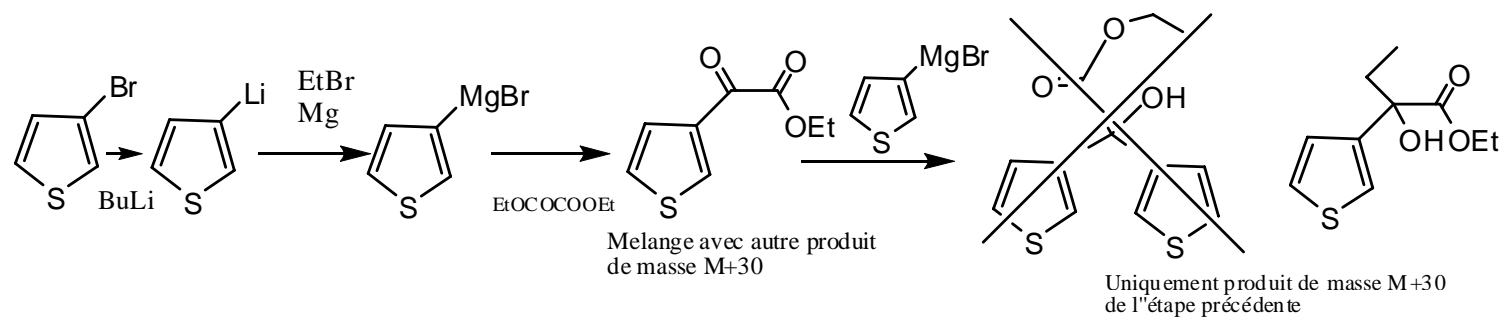
*Rendement : 4.1% pour la totalité de la synthèse.*

**Pb: formation également du produit secondaire de type éther**

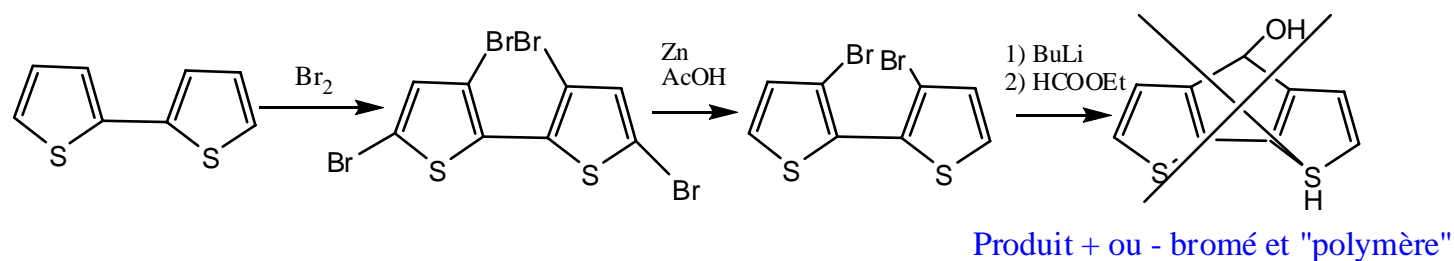
# AUTRES VOIES DE SYNTHÈSE ENVISAGÉES



## AUTRES VOIES DE SYNTHÈSE ENVISAGÉES



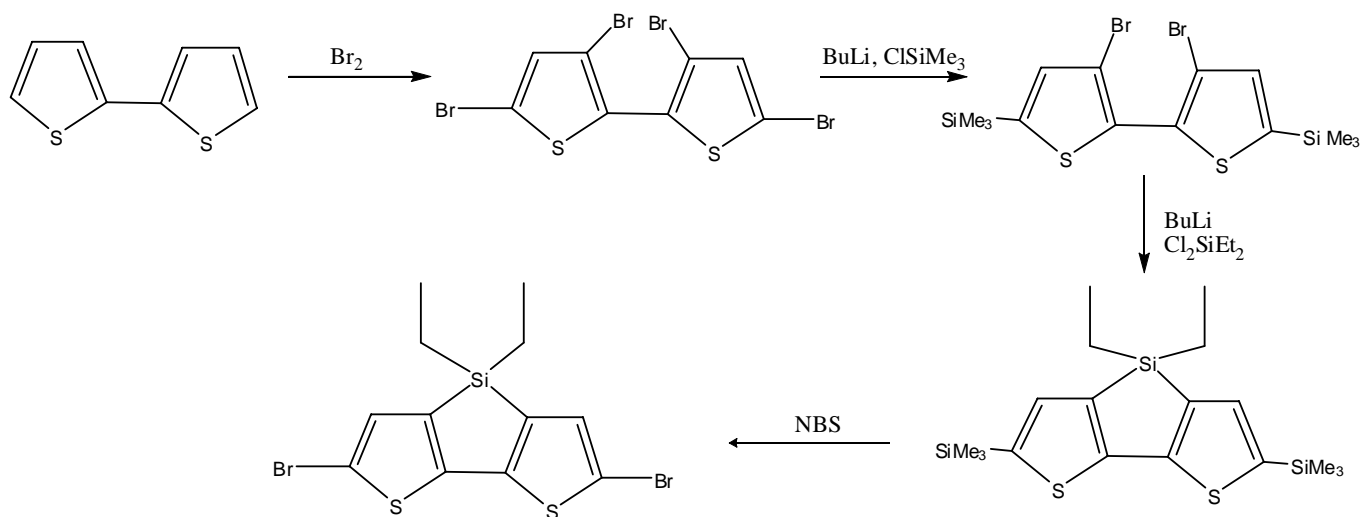
Essai utilisant la voie bithiophène



Jeffries A., Moore K.C., Ondeyka D.M., Springsteen A.W. and MacDowell D.W.H., *J. Org. Chem.*, **1981**, 46, 2885-2889  
 Khor E., Ng S.C., Li H.C. and Chai S., *Heterocycles*, **1991**, 32(9),1805-1811

# Conclusion-Perspectives :

- Les différentes voies de synthèse du monomère donneur qui ont été utilisées ne nous ont pas permis d'isoler ce composé pur avec un rendement global correct.
- Une voie alternative a été retenue et validée pour la synthèse d'autres précurseurs donneur pour la conception de polymères Low Band Gap originaux :



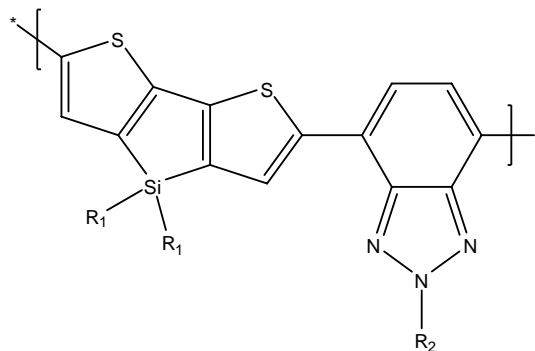
**SYNTHESE EN QUATRE ETAPES (Rendement global > 50%)**

Hou J., Chen H.Y., Zhang S., Li G. and Yang Y. *J. Am. Chem. Soc.*, **2008**, 130,16144-16145

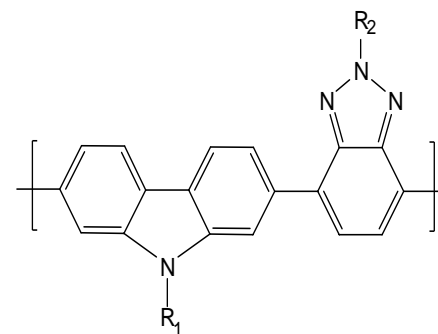
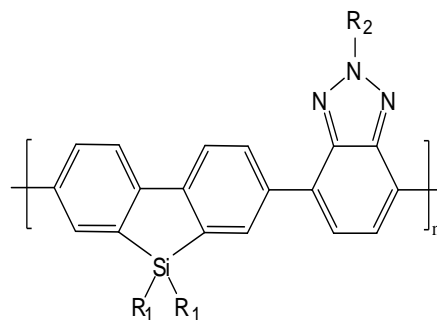
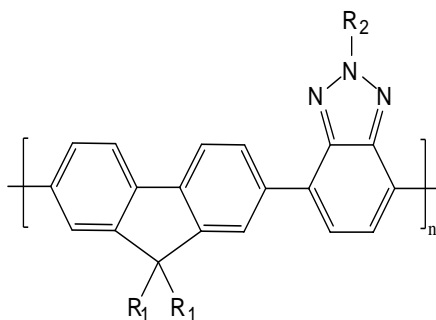
Colloque Energie CNRS - Novembre 2009

# Conclusion-Perspectives :

- Synthèse du polymère Low Band Gap en cours:



- Autres structures de polymères Low Band Gap envisagés :



**Merci de votre attention**