



Polymères semiconducteurs halogénés pour la conversion photovoltaïque

Théodore Olla,¹ Narayanaswamy Kamatham,² Olzhas Ibraikulov,³ Stéphanie Ferry,¹ Pablo Durant,¹ Benoît Heinrich,² Thomas Heiser,³ Patrick Lévêque,³ Stéphane Méry,² et Nicolas Leclerc^{1,*}

¹ Institut de Chimie et Procédés pour l'Energie, l'Environnement et la Santé (ICPEES), CNRS, Université de Strasbourg, ECPM, UMR 7515, 25 rue Becquerel, 67087, Strasbourg, France

² Institut de Physique et de Chimie des Matériaux de Strasbourg (IPCMS), CNRS, Université de Strasbourg, UMR 7504, 23 rue du Loess, 67034, Strasbourg, France

³ Laboratoire ICube, CNRS, Université de Strasbourg, UMR 7357, 23 rue du Loess, 67037, Strasbourg, France

* leclercn@unistra.fr

Les polymères semi-conducteurs organiques partiellement fluorés ont connu un essor exceptionnel ces dernières années en tant que matériaux donneurs d'électrons utilisés au sein de cellules solaires photovoltaïques organiques. ^[1,2] Plusieurs raisons expliquent ce succès, parmi lesquelles on peut citer :

- La capacité des atomes de fluor à imposer une planarisation des squelettes polymères (via des liaisons faibles avec les atomes et hétéroatomes voisins) qui améliore l'empilement des polymères par π -stacking et par là-même, le transport de charge.
- Le caractère électrodéficient du fluor qui stabilise significativement les niveaux énergétiques des orbitales frontières.

Pour des raisons similaires, l'atome de chlore est récemment apparu comme un substitut de choix au fluor dans certaines structures (macro)-moléculaires.^[4] Cependant, son encombrement stérique supérieure et son électronégativité réduite, par rapport au fluor, modulent sensiblement son impact.

Au travers de cette conférence, nous nous proposons de rentrer un peu plus en détail dans les principes architecturaux qui régissent les propriétés des polymères contenant des atomes de Fluor et de Chlore. Nous discuterons en particulier de l'évolution des propriétés structurales et optoélectroniques de deux familles de polymères semiconducteurs organiques incorporant l'un et/ou l'autre de ces deux halogènes, en fonction de leurs positions et de leurs nombres. Par des travaux complémentaires d'ingénierie moléculaire au niveau des chaînes latérales (notamment via des chaînes innovantes de nature siloxane), nous discuterons également du rôle de ces chaînes latérales sur la solubilisation des polymères, leur orientation sur les substrats ainsi que sur leur miscibilité avec les matériaux de type accepteur d'électrons.

[1] N. Leclerc, P. Chávez, O. A. Ibraikulov, T. Heiser and P. Lévêque, *Polymers*, **2016**, *8*, 11.

[2] O. A. Ibraikulov, B. Heinrich, P. Chávez, I. Bulut, C. Ngov, O. Boyron, N. Brouckaert, S. Swaraj, K. L. Gerasimov, D. A. Ivanov, S. Mery, N. Leclerc, P. Lévêque and T. Heiser, *J. Mater. Chem. A*, **2018**, *6*, 12038.

[3] J. Yuan, Y. Zhang, L. Zhou, G. Zhang, H.-L. Yip, T.-K. Lau, X. Lu, C. Zhu, H. Peng, P. A. Johnson, M. Leclerc, Y. Cao, J. Ulanski, Y. Li and Y. Zou, *Joules*, **2019**, *3*, 1.

[4] S. Zhang, Y. Qin, J. Zhu and J. Hou, *Adv. Mater.*, **2018**, 1800868.