

Projet de thèse année 2023-2026

Photoélectrodes à base de clusters de molybdène pour la réalisation de cellules solaires

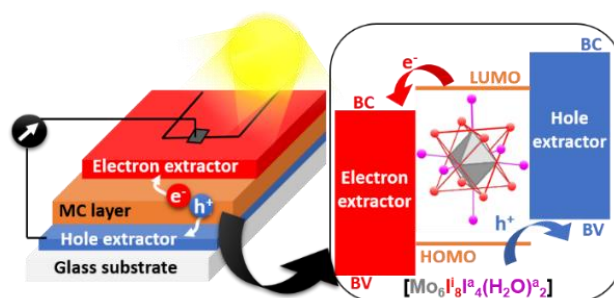
Institut des Sciences Chimiques de Rennes (UMR CNRS 6226) – Univ. Rennes

Compétences recherchées :

- cursus Master 2 ou équivalent
 - motivation pour la chimie expérimentale et la chimie-physique (synthèse et caractérisation des matériaux)
 - maîtrise de l'anglais
 - capacité à travailler en équipe, bonne organisation et présenter de bonnes aptitudes à communiquer (à l'écrit et à l'oral).
 - documents demandés: CV, résultats de M1 ou niveau équivalent, rapport de stage M1 ou niveau équivalent (ou L3), en vue d'un entretien
-

Descriptif :

Contexte scientifique. Dans le contexte du réchauffement climatique, la nécessité de développer des énergies décarbonées, propres, peu coûteuses et fiables motive les efforts de recherche à concevoir des systèmes de conversion de l'énergie solaire efficaces et propres. Le sujet de thèse



s'inscrit dans le cadre du projet ANR NanoLEtsGOs qui vise à développer de nouvelles couches collectrices de lumière (photoélectrodes), exempt d'éléments stratégiques et/ou toxiques, intégrables dans des cellules photovoltaïques. Le projet se concentre sur la conception de photoélectrodes à base de nano-objets inorganiques moléculaires, les clusters octaédriques de molybdène (MC), composés de Mo, l'un des principaux métaux industriels peu toxiques. Les halogénures de MC (Mo_6X_{14} , X = Cl, Br, I) présentent des caractéristiques optiques et électroniques remarquables (forte absorption dans le visible, durée de vie dans la gamme 1-1000 μs , propriétés ambipolaires) nécessaires à leur utilisation comme collecteur de lumière dans des cellules solaires efficaces.^[1-7] Le projet NanoLEtsGOS a pour but l'optimisation des propriétés optiques et électroniques (collection de la lumière, séparation et transport des charges) des couches de clusters *via* le contrôle des interactions entre ces nano-objets. La thèse se focalisera sur l'assemblage contrôlé de ces briques moléculaires selon deux

stratégies : i) la condensation progressive des MC et ii) l'incorporation dans une matrice polymérique conductrice.

Sujet. Le travail de thèse s'articule autour de deux axes correspondant aux deux stratégies d'assemblage des MC. Le contrôle du degré de condensation des MC se fera *via* des voies de chimie en solution à travers la substitution progressive des ligands halogènes par du soufre. L'incorporation dans une matrice polymère selon des approches électrostatique ou supramoléculaire est un axe déjà développé à l'ISCR.^[6,7] La synthèse des polymères ne fera pas l'objet de la thèse. Ces derniers seront synthétisés sur mesure dans le cadre du projet ANR. L'étudiant se concentrera plus spécifiquement sur l'intégration des MC et sur le dépôt des couches.

Les propriétés optiques et électroniques des photoélectrodes obtenues après dépôts des couches à clusters seront étudiées en combinant des techniques de caractérisation optiques (UV-vis, photoluminescence), électrochimiques (photoélectrochimie, impédance complexe) et spectroscopiques (XPS, UPS). La dynamique de transfert de charges et la construction des diagrammes d'énergie des photoélectrodes permettront, d'une part, de juger du potentiel de telles couches photoactives, et d'autre part, de sélectionner les matériaux d'électrodes extracteurs de charges pour la réalisation des cellules solaires. La réalisation et l'étude des performances de ces dernières seront réalisées durant la dernière année des travaux de thèse.

Financement : ANR NanoLEtsGOs, 2044 € brut

Contacts ISCR

- Adèle Renaud – (adele.renaud@univ-rennes1.fr) équipe Chimie du Solide et Matériaux.
- Stéphane Cordier - (stephane.Cordier@univ-rennes1.fr) équipe Chimie du Solide et Matériaux.

Références

- [1] A. Renaud et al., *ChemistrySelect*. 2016, 1, 2284.
- [2] A. Renaud et al., *Electrochimica Acta* 2019, 317, 737.
- [3] A. Renaud et al., *ACS Appl. Mater. Interfaces* 2022, 14, 1347.
- [4] Y. Zhao et al., *Adv. Energy Mater.* 2013, 3, 1143.
- [5] K. Costuas et al., *Phys. Chem. Chem. Phys.* 2015, 17, 28574.
- [6] M. Amela-Cortes et al., *J. Mater. Chem. C* 2014, 2, 1545.
- [7] S. Khlifi et al., *J. Mater. Chem. C* 2021, 9, 7094.