

Titre Thèse Title	Machine learning for performance enhancement of flexible organic solar cells.	
(Co)-Directeur	Bruno GRANDIDIER	E-mail : bruno.grandidier@univ-lille.fr
(Co)-Directeur		
(Co)-Encadrant (s)	Kekeli N'KONOU	E-mail : kekeli.nkonou@junia.com
Laboratoire(s)	IEMN	Web : www.iemn.fr/
Groupe(s)	Physique	Web :www.iemn.fr/la-recherche/les-groupes/physique
Financement acquis ?	Oui <input type="checkbox"/>	Non <input checked="" type="checkbox"/>
	Origine :	
Financement demandé	Contrat Doctoral <input type="checkbox"/>	Etablissement porteur : Univ. Lille <input type="checkbox"/> Centrale Lille <input type="checkbox"/> JUNIA <input checked="" type="checkbox"/>
	Région <input checked="" type="checkbox"/>	Co-financement acquis : Oui <input type="checkbox"/> Non <input checked="" type="checkbox"/> Préciser son origine (qu'il soit acquis ou non) : ANR
	Autre :	

Résumé : Les performances des cellules solaires organiques (CSOs) se sont considérablement améliorées ces dernières années, grâce au développement des accepteurs non-fullerènes (ANF) asymétriques et à leur utilisation dans les mélanges ternaires. Bien qu'une efficacité de conversion de puissance (PCE) de plus de 19% (à l'échelle du laboratoire) pour des dispositifs de quelques mm² de surface active sur substrats rigides et une couche active mince d'environ 100 nm soient actuellement obtenue, les performances des CSOs sont fortement réduites lorsque les matériaux sont transférés par impression à l'air sur des substrats flexibles de grande surface (~cm²). Pour corriger l'écart d'efficacité entre les CSOs rigides de petite surface et les dispositifs ou modules flexibles de grande surface, ainsi que pour se rapprocher des spécifications industrielles avec des CSOs de plus de 200 nm d'épaisseur, il est important de se focaliser sur les principaux défauts de la technologie ANF tels que la stabilité moléculaire, le niveau d'énergie élevé et le fort comportement d'agrégation. Pour atteindre ces objectifs, le développement de matériaux efficaces et la fabrication d'électrodes hautement flexibles transparentes et conductrices sont nécessaires.

Ce projet de thèse vise à (i) identifier et synthétiser de nouveaux NFA asymétriques à partir d'un criblage virtuel à haut débit assisté par l'apprentissage automatique pour fabriquer des dispositifs et des modules CSOs de haute efficacité en couche épaisse (> 200 nm); (ii) à utiliser des mélanges ternaires et quaternaires déposés par une technique de dépôt séquentiel sur des électrodes de graphène intégrées au polyimide en utilisant la méthode d'impression à jet d'encre; (iii) à incorporer des nanofeuillets en 2D du MXene/Ti₃C₂Tx dans les deux couches interfaciales des CSOs (ingénierie des couches interfaciales) pour obtenir une efficacité supérieure à 15 % sur une grande surface (> 50 cm²) et une efficacité supérieure à 17 % sur une surface de l'ordre du cm² pour les modules entièrement imprimés.

Abstract: Thanks to the development of asymmetric non-fullerene acceptors (NFAs) and their use in ternary blending strategy, Organic solar cell (OSCs) performance has been significantly improved in recent years, achieving a power conversion efficiency (PCE) over 19% (at lab scale) for devices with mm² active surface on rigid substrates and a thin active layer of about 100 nm. However, the excellent performance of OSCs (at lab scale) is considerably reduced when transferred via air ink-printing on large-area and flexible substrates with industrial interfacial materials. To address the efficiency gap between small-area rigid OSCs and large-area flexible devices or modules as well as to be closer to industrial specifications with over 200 nm thick-film OSCs, it is necessary to focus on the key shortcomings of the NFA technology such as molecular stability, high energy level, and strong aggregation behavior. To achieve this goal, the development of efficient materials and highly flexible transparent conductive electrodes is required.

The PhD project aims at (i) identifying and synthesizing new asymmetric NFAs from Machine learning-assisted high throughput virtual screening to build high-efficiency thick-film (> 200 nm) OSC devices and modules; (ii) using ternary and quaternary blends deposited via sequential deposition technique on polyimide-integrated graphene electrodes using inkjet printing method; (iii) incorporating 2D MXene/Ti₃C₂Tx nanosheets in both OSC interfacial layers (interlayer engineering) to achieve an efficiency higher than 15% in a large area (> 50 cm²) and efficiency higher than 17% on a small area (< 1 cm²) for fully printed modules.