

THESE DE DOCTORAT DE

NANTES UNIVERSITE ET UNIVERSITE HASSAN II DE
CASABLANCA

ECOLE DOCTORALE N° 596

Matière, Molécules, Matériaux

Spécialité : Sciences des Matériaux

Par

Hind LAMKAOUANE

**Élaboration et caractérisation de couches tampons hybrides originales
pour des applications dans les cellules photovoltaïques organiques**

Thèse présentée et soutenue à Mohammedia, le 05/07/2022

Unité de recherche : Institut des Matériaux de Nantes, Nantes Université et Laboratoire de Physique de la
Matière Condensée et Energie Renouvelable, FST Mohammedia

Rapporteurs avant soutenance :

Lahcen KHOUCHAF
El Mustapha FEDDI

Maître de conférences, HDR, IMT Nord Europ, Université de Lille
Professeur, ENSAM, Université Mohammed V de Rabat

Composition du Jury :

Président : M. Mohammed ADDOU
Examineurs : M. Mohammed ADDOU
Mme Linda CATTAIN
Dir. de thèse : M. Guy LOUARN
Co-dir. de thèse : Mme Yamina MIR

Professeur, FST-Tanger, Université Abdelmalek Essâadi de Tétouan

Maître de conférences, IMN de Nantes, Nantes université
Enseignant chercheur, IMN de Nantes, Nantes université
Professeur, FST Mohammedia, Université Hassan II de Casablanca

Invité(s)

Jean Christian BERNEDE
Mimoun ZAZOUI
Mohammed ZAHOUILY

Chercheur senior, MOLTEC-Anjou, Université d'Angers
Professeur, FST-Mohammedia, Université Hassan II de Casablanca
Professeur, FST Mohammedia, Université Hassan II de Casablanca

Titre : Élaboration et caractérisation de couches tampons hybrides originales pour les cellules photovoltaïques organiques.

Mots clés : Cellules photovoltaïques organiques, couche tampon anodique, couche tampon cathodique, hybride, trioxyde de molybdène, disulfure de molybdène, cellules photovoltaïques organiques ternaires.

Résumé : Ce travail porte sur l'élaboration de couches tampons hybrides pour les cellules photovoltaïques organiques et amélioration des performances des cellules organiques via l'utilisation de la configuration ternaire. La première partie est dédiée à la synthèse de la couche tampon MoS_2 : MoO_3 par voie humide : exfoliation/oxydation de MoS_2 . Nous avons développé une méthode originale de dépôt par centrifugation pour la croissance de ces couches hybrides. L'XPS est utilisée pour le contrôle de la composition chimique du MoS_2 avant et après oxydation. Les résultats obtenus confirment la présence de trois composés : MoO_3 , MoS_2 et MoO_xS_y . L'application de la couche hybride MoO_3 : MoS_2 dans les cellules organiques binaires est une perspective de ce travail. Concernant, la couche tampon cathodique, une couche hybride KI/Alq_3 élaborée par évaporation/ sublimation sous vide est introduite dans une cellule PHJ inverse.

Alq_3 est déjà connu par sa propriété de blocage des excitons à l'interface cathode/accepteur d'électrons, alors que l'insertion de KI d'une épaisseur de 1 nm et la diffusion de K dans l' Alq_3 améliore de manière significative la collection des électrons ce qui augmente le rendement de la cellule. La deuxième partie concerne l'amélioration des cellules solaires organiques via l'insertion d'une couche ternaire dans la couche active. Dans ce travail, différentes conceptions d'OPV ternaires sont étudiées afin d'améliorer l'absorption de la lumière par la couche active. A ce propos, de nombreuses petites molécules sont proposées pour étudier les alignements possibles de structure de bande d'énergie. L'effet de l'absorption, de la mobilité des porteurs de charges, de la morphologie des couches minces sur l'efficacité de ces molécules est discuté pour réaliser des cellules OPVs ternaires performantes.

Title : Elaboration and characterization of original hybrid buffer layers for organic photovoltaic cells

Keywords : Organic solar cells, ternary solar cells, anode buffer layer, cathode buffer layer, molybdenum oxide, molybdenum disulfide, ternary organic solar cells.

Abstract: This thesis work deals with the synthesis and elaboration of original hybrid buffer layers for organic photovoltaic cells and improvement of organic cell performances via the use of the ternary configuration. The first part is dedicated to the synthesis of MoS_2 : MoO_3 by wet route; exfoliation/partial MoS_2 oxidation where an original and efficient centrifugation-coating deposition method is adopted for the growth of hybrid and MoS_2 layers. The XPS technique is used to control chemical composition of MoS_2 before and after reaction. The obtained results confirm the presence of three compounds such as MoO_3 , MoS_2 and MoO_xS_y . The application of the MoO_3 : MoS_2 hybrid layer in organic binary cells is a perspective of this work. Concerning the cathode buffer layer, a hybrid KI/Alq_3 elaborated by thermal evaporation/sublimation under vacuum is introduced in an inverse binary solar cell.

Alq_3 is already known by its exciton blocking property at the cathode/acceptor interface, while the insertion of 1 nm of KI and diffusion of K into Alq_3 significantly improves the electron collection which improved the cell Voc and efficiency compared to the cell with Alq_3 only as cathode buffer layer. The second part concerns the study of the improvement of organic solar cells via active layer enhancement using ternary layer insertion. Different designs of ternary OPVs are investigated in order to improve the absorption of the active layer. In this regard, many small molecules have been proposed to study the possible alignments of energy band structure. Based on the experimental results, the effect of parameters such as absorption, charge carrier mobility, thin film morphology on the efficiency of these molecules is discussed to build an efficient ternary OPV cells.