

Impact de la nature et de la position des halogènes sur les propriétés opto-électroniques de polymères conjugués

[Théodore S. OLLA](#) & Nicolas LECLERC

*Institut de chimie et procédés pour l'énergie, l'environnement et la santé (ICPEES),
UMR 7515, Université de Strasbourg*

Depuis une demi-douzaine d'années, l'utilisation de polymères semi-conducteurs fluorés a permis une augmentation impressionnante de l'efficacité des cellules photovoltaïques, qui dépasse désormais les 10 %^[1]. Il semble établi que l'origine de cette amélioration est double : un abaissement des niveaux d'énergie HOMO et LUMO du polymère, et une planarisation des chaînes macromoléculaires favorisant le π -stacking dans le matériau^[2], deux effets généralement expliqués par la très forte électronégativité du fluor.

Cependant, des travaux plus récents montrent que l'utilisation du chlore permet d'obtenir un effet similaire, voire amplifié, avec un abaissement accru des niveaux HOMO et LUMO^[3]. Ceci va à l'encontre de l'idée selon laquelle l'électronégativité serait le paramètre à l'origine des effets opto-électroniques favorables à la conversion photovoltaïque.

Notre travail cherche à expliquer finement le rôle joué par les halogènes dans les propriétés physico-chimiques des polymères semi-conducteurs. Dans ce but, deux familles de copolymères porteurs d'halogènes sur différentes positions du squelette conjugué ont été synthétisés. La première famille, basée sur les synthons thiénothiophène et benzothiadiazole, nous a permis de mettre en lumière l'importance des effets de torsion, très défavorables au π -stacking, que provoquent les atomes de chlore trop proches les uns des autres. La seconde famille, basée sur les synthons bithiophène et thiéno-pyrroledione, nous a quant à elle permis d'étudier l'importance de la position des halogènes dans le développement de liaisons faibles capables d'augmenter sensiblement les interactions entre chaînes macromoléculaires.

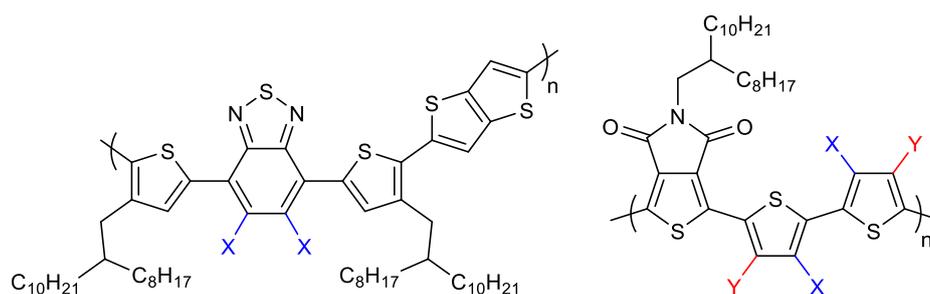


figure 1 – Structure générale des polymères étudiés (X, Y = H, F ou Cl)

Références :

[1] L. YE, Y. XIONG, Q. ZHANG, S. LI, C. WANG, Z. JIANG, J. HOU, W. YOU & H. ADE, « Surpassing 10% efficiency benchmark for nonfullerene organic solar cells by scalable coating in air from single nonhalogenated solvent », *Advanced Materials*, **2018**, 30, 1705485.

[2] N. LECLERC, P. CHAVEZ, O. A. IBRAIKULOV, T. HEISER & P. LEVEQUE, « Impact of backbone fluorination on π -conjugated polymers in organic photovoltaic devices: a review », *Polymer*, **2016**, 8, 11.

[3] X. GAO, J. SHEN, B. HU & G. TU, « A straightforward synthesis of chlorine-bearing donor–acceptor alternating copolymers with deep frontier orbital levels », *Macromolecular Chemistry and Physics*, **2014**, 215, 1388.