

Titre : Étude théorique et numérique des mécanismes associés au fonctionnement des cellules solaires organiques.

Directeur(s) de Thèse : LEROY Yann, Maître de Conférence, HDR

Contact : yann.leroy@unistra.fr

Unité d'Accueil : ICube, UMR 7357, D-ESSP / MaCEPV,
Groupe *Modélisation Physique du Transport de Charge*

Établissement de rattachement : ICube, UMR 7357,
300 bd Sébastien Brant
CS 10413
67412 ILLKIRCH Cedex

Résumé :

Au cours des dernières décennies, les cellules solaires organiques ont donné lieu à des recherches intensives, car elles sont flexibles, légères, et peu coûteuses. Un grand nombre d'études expérimentales leur est consacré, alors que seuls quelques modèles théoriques ont été développés. Parmi les diverses architectures de cellules solaires organiques, l'hétérojonction en volume est l'une des plus courantes: la couche active de la cellule est composée d'un mélange des matériaux donneurs et accepteurs permettant une génération efficace de charges libres.

Grâce aux approches théoriques et numériques, complémentaires des expériences, les différents mécanismes qui ont lieu dans la cellule peuvent être mieux appréhendés, le but étant d'améliorer les performances. Un modèle bidimensionnel a déjà été développé dans notre groupe, basé sur un mécanisme spécifique de génération de charges libres. Il permet d'obtenir les caractéristiques électriques de la cellule (densités de charges, courbes JV, performances).

Le but de la thèse est d'approfondir, à travers une étude théorique plus poussée et des simulations numériques complémentaires, la compréhension des différents mécanismes physiques mis en œuvre dans les cellules solaires organiques. Parmi les méthodes numériques, des approches de type de Monte-Carlo pourront être développées en amont du modèle existant, afin de déterminer plus précisément certains paramètres importants tels que la mobilité ou la constante de diffusion des porteurs.

Connaissances et compétences requises :

Le candidat devra bien maîtriser la Physique de la Matière Condensée et des Semiconducteurs, la Mécanique Quantique, ainsi que le Calcul Scientifique.

Date limite de candidature : 6 juin 2014, 18h

Lien pour la constitution du dossier :

<http://ed.math-spi.unistra.fr/candidature/sujets-des-contrats-doctoraux-de-recherche/>