



HAL
open science

Polymères absorbant dans le proche infra-rouge

Wissem Khelifi, Hussein Awada, Katarzyna Brymora, Sylvie Blanc, L Hirsch, Frédéric Castet, Antoine Bousquet, Christine Lartigau-Dagron

► **To cite this version:**

Wissem Khelifi, Hussein Awada, Katarzyna Brymora, Sylvie Blanc, L Hirsch, et al.. Polymères absorbant dans le proche infra-rouge. Deuxièmes journées annuelles du GDR Organic Electronics for new eRA, Nov 2019, Paris, France. hal-04186865

HAL Id: hal-04186865

<https://univ-pau.hal.science/hal-04186865>

Submitted on 24 Aug 2023

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.



Distributed under a Creative Commons Attribution 4.0 International License

POLYMERES ABSORBANT dans le PROCHE INFRA-ROUGE

W. Khelifi^a, H. Awada^a, K. Brymora^b, S. Blanc^a, L. Hirsch^c, F. Castet^b, A. Bousquet^a, C. Lartigau-Dagron^a

^a CNRS/ Univ Pau & Pays Adour/ E2S UPPA, IPREM, UMR 5254, 64000, Pau

^b ISM, UMR CNRS 5255, Université de Bordeaux, 33405 Talence

^c IMS, UMR CNRS 5218, Université de Bordeaux, ENSCBP, 33607 Pessac

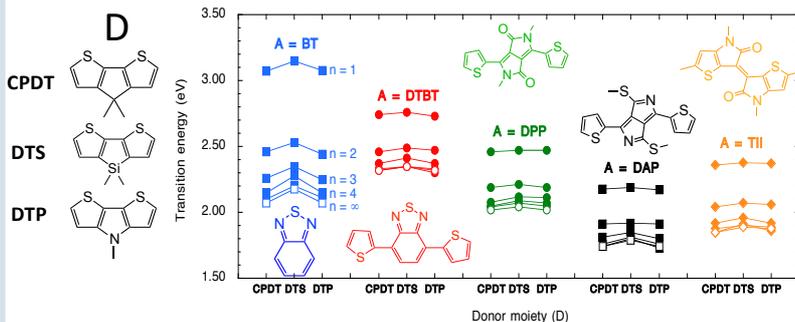
INTRODUCTION

Les matériaux absorbant dans le proche infra-rouge (NIR) ont un intérêt pour diverses applications en électronique organique : photovoltaïque, bio. Les polymères présentés ici ont été élaborés pour réaliser des photo-détecteurs dans le NIR.

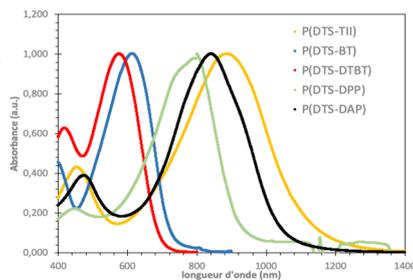
Stratégies pour réduire la bande interdite

• copolymères alternés $-(D-A)_n-$ (soumis)

Calcul de l'énergie de transition par TD-DFT (niveau M06-2X/6-311G(d))

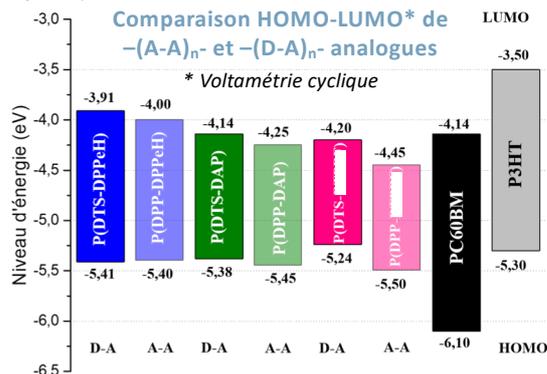
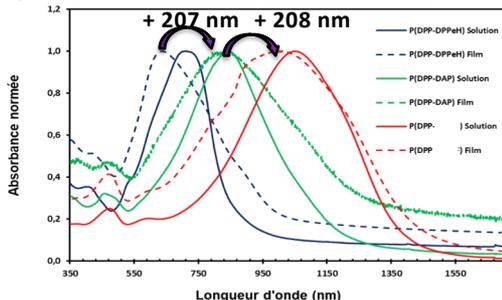


Spectres UV-visible-NIR (solution)



• copolymères alternés $-(A-A)_n-$ (non publié)

Spectres UV-visible-NIR (solution et films)

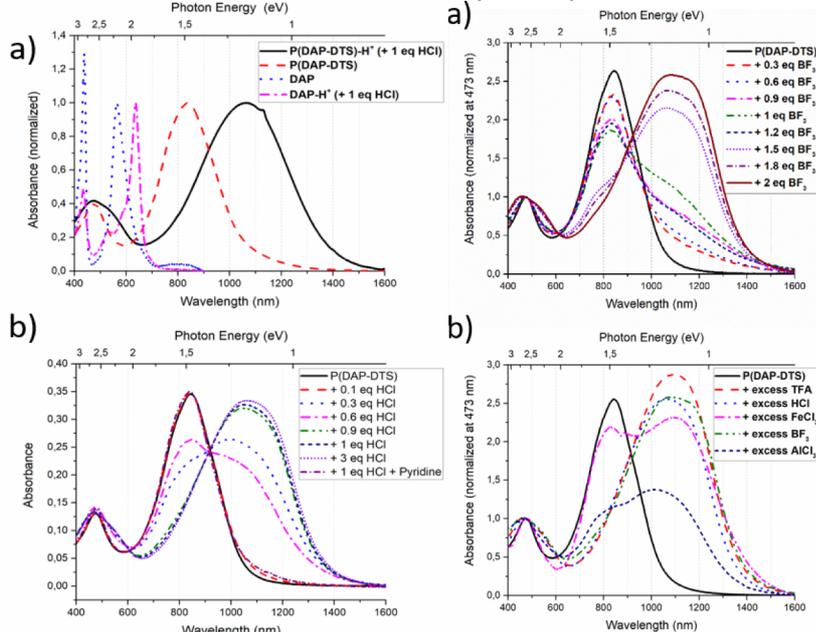


Pour D-A et A-A analogues, niveau LUMO plus profond pour A-A.

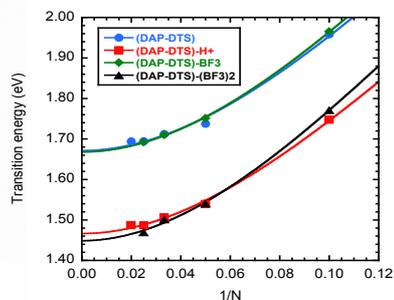
• Halochromisme sur P(DTS-DAP) (W. Khelifi et al. Macromolecules 52, 4820-4827)

L'unité DAP présente des propriétés d'halochromisme avec l'ajout d'un acide de Brønsted ou Lewis.

Spectres UV-visible-NIR (solution)



Calcul de l'énergie de transition par TD-DFT en fonction du nombre d'unités



Calculs montrent que :

- 1 eq. BF_3 ne modifie pas l'énergie de transition,
- shift observé par spectro UV-vis-NIR attribué à l'ajout de 2 eq. BF_3 sur 1 unité de DAP.

1 eq. HCl : shift 225 nm, 1 eq. BF_3 : shift 245 nm, excès $AlCl_3$ ou $FeCl_3$ ne permet pas de complexer totalement.



CONCLUSION

- Pour D donné, bande interdite modulée en changeant A.
- DAP permet de décaler le spectre d'absorption vers NIR, en particulier par halochromisme.
- unité A originale permet de décaler de 400 nm par rapport à P(DPP).
- D-A et A-A analogues : A-A présentent un niveau LUMO plus profond.



REMERCIEMENTS

TAPIR ANR-15-CE24-0024-03
CRA TAMANOIR



CONTACT

IPREM, Université de Pau et des Pays de l'Adour, E2S UPPA
Christine.lartigau-dagron@univ-pau.fr

