

## Synthèse du thiéno[3,4- c]pyrrole-4,6-dione et optimisation de la couche HTM sur dispositif photovoltaïque à base de pérovskite

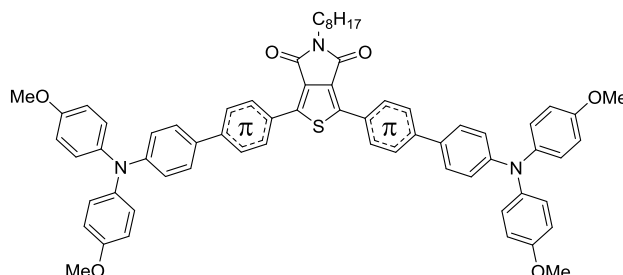
Thybault de Monfreid<sup>1</sup>, Seul-Gi Kim<sup>2</sup>, Thi Huong Le<sup>1</sup>, Fabrice Goubard<sup>1</sup>, Nam-Gyu Park<sup>2</sup>, Thanh-Tuân Bui<sup>1</sup>

<sup>1</sup> CY Cergy Paris Université, LPPI, F-95000 Cergy, France

<sup>2</sup> School of Chemical Engineering, Sungkyunkwan University (SKKU), Korea

\* [fabrice.goubard@cyu.fr](mailto:fabrice.goubard@cyu.fr)

Cette étude présentera la conception et la synthèse d'une série de molécules conjuguées de cœur central le thiéno[3,4- c]pyrrole-4,6-dione dans une configuration moléculaire D- $\pi$ -A- $\pi$ -D pour l'application photovoltaïque à base de pérovskite. Leurs caractéristiques ont suggéré que ces molécules pourraient être de bonnes candidates comme matériaux de transport de trous (HTM) dans des dispositifs photovoltaïques à base de pérovskite. L'application photovoltaïque préliminaire a donné des dispositifs avec une efficacité de conversion de puissance (PCE) d'environ 17 %. Nous montrerons l'impact de l'ingénierie de l'interface avec l'hydroiodure de 2-(2-aminoéthyl)thiophène (2-TEAI) entre la pérovskite et la couche HTM améliorant le PCE de 19,60 % à 21,98 %, rendement supérieur à celui du dispositif à base de spiro-MeOTAD (21,15 %). De plus, la stabilité thermique (85°C, 1000 heures) a montré que le PSC employé par le nouveau HTM conserve 85,9% du PCE initial à l'inverse du spiro-MeOTAD se dégrade de manière irréversible de 21,1% à 5,8%. Les études de spectrométrie de masse des ions secondaires à temps de vol couplées à la spectroscopie FTIR révèlent que le nouveau HTM présente une diffusivité de l'ion lithium beaucoup plus faible que le spiro-MeOTAD en raison d'une forte complexation de l'ion lithium avec le HTM, expliquant le degré plus élevé de stabilité thermique. Ce travail délivre un message important : la capture du Li<sup>+</sup> mobile dans la couche de transport de trous est critique dans la conception de nouveaux HTM pour améliorer la stabilité thermique des PSCs. En outre, il souligne également l'importance de l'ingénierie interfaciale sur un HTM non conventionnelle.



### Références

[1] Capturing Mobile Lithium Ion in Molecular Hole Transporter Enhances Thermal Stability of Perovskite Solar Cells. S.-G. Kim, T. H. Le, T. de Monfreid, F. Goubard, T.-T. Bui, N.-G. Park. *Advanced Materials* **33** (2021) 2007431. <https://doi.org/10.1002/adma.202007431>