



Service de Chimie des Matériaux Nouveaux (CMN)

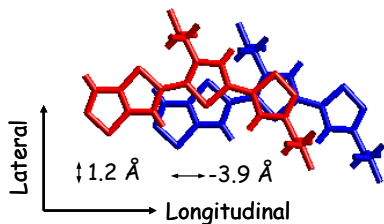


Membres permanents : Roberto Lazzaroni, David Beljonne, Jérôme Cornil,
Philippe Leclère, Mathieu Surin, Patrick Brocorens, Pascal Viville

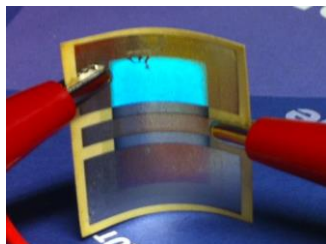
12 postdocs et 21 thésards*

*Alexandre Vercouter, Thésard de 1^{ère} année en Sciences Chimiques

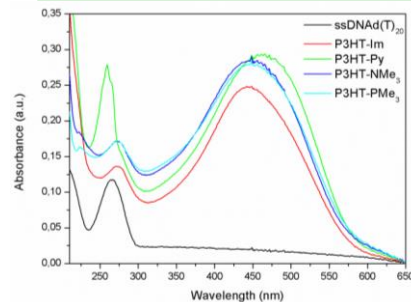
Modélisation des matériaux



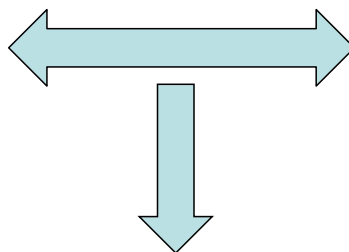
Calculs et simulations
sur des
systèmes-modèles



Mesures expérimentales



Spectroscopies optiques
Microscopies à sonde locale
Mesures électriques



Applications:
Fabrication de
dispositifs



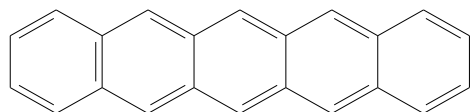
Quelques sujets actuels...

- Matériaux Emetteurs TADF (Théorie / expérience)
- Matériaux biohybrides ADN/systèmes conjugués (Théorie / expérience)
- Nouvelles approches de microscopie à sonde locale (Expérience)
- Singlet fission (Théorie)
- Thermoélectricité (Théorie)
- Spintronique moléculaire (Théorie)
- Bioélectronique / transport d'ions (Théorie)
- Interfaces avec métaux ou oxydes (Théorie / expérience)
- Interfaces avec matériaux 2D (Théorie)
- Perovskites (Théorie / expérience)
- Fabrication et caractérisation d'OLEDs et cellules solaires (Expérience)

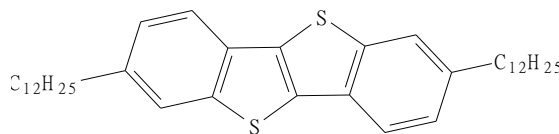
En particulier ... - Thermoélectricité -

- Etude de l'anisotropie du transport de chaleur au sein de 3 semi-conducteurs organiques
- Etablissement de relations “structures-propriétés”

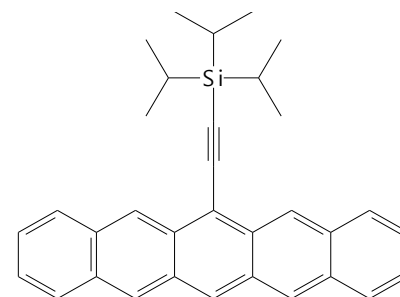
➔ **Modélisation Moléculaire**



Pentacène

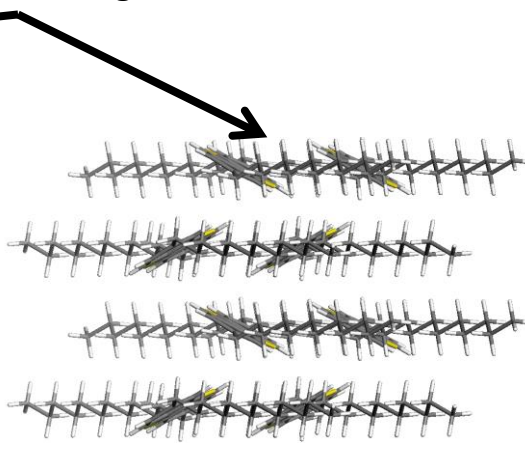
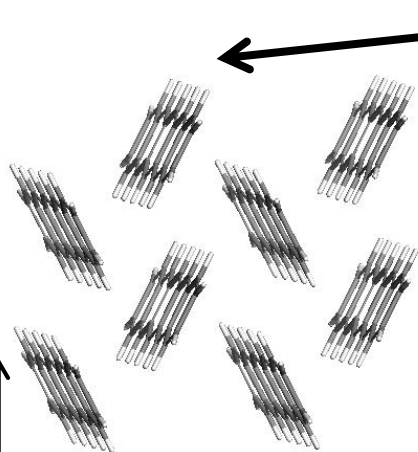


2,7-BTBT

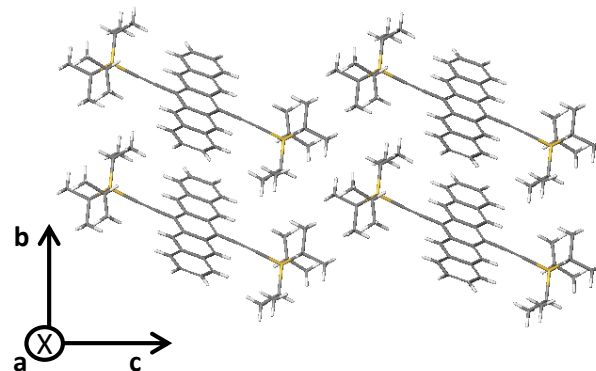


TIPS-Pentacène

Empilement “herringbone”



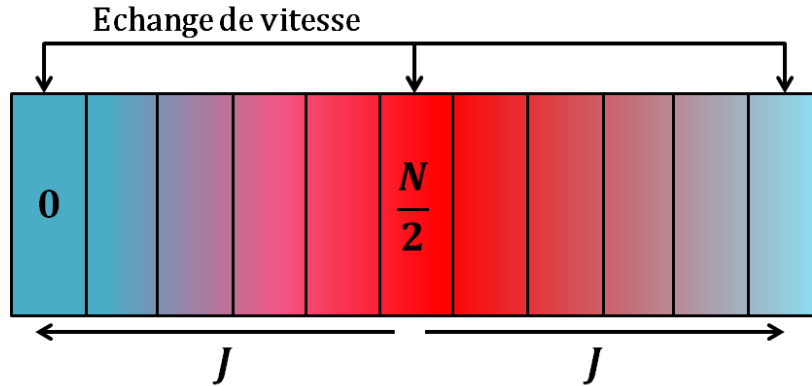
3



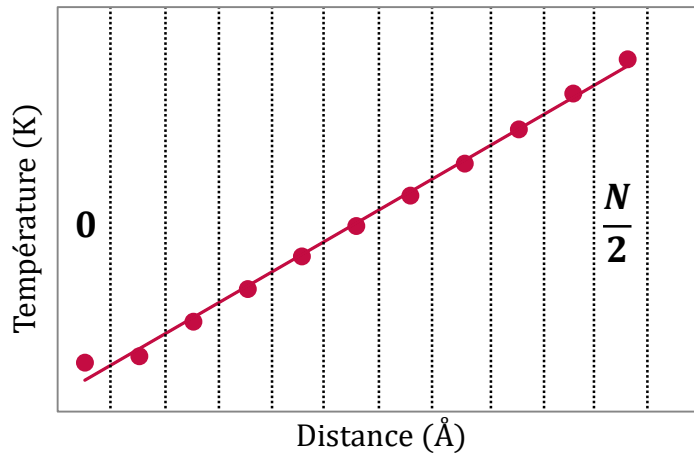
Dynamique Moléculaire de non- Equilibre Algorithme de Müller-Plathe

Loi de Fourier

$$\kappa_l = - \frac{J}{\nabla T}$$



- Allongement de la longueur du système L selon la direction d'intérêt
- Création d'un flux de chaleur J via échanges des vitesses atomiques



- Moyenne temporelle de l' E_{cin} associée aux atomes de chaque couche

➔ Régression linéaire

Comparaison du transport de la chaleur et de charges - 2,7-BTBT-

$$\frac{\mu_{h+}^a}{\mu_{h+}^b} \sim 3.67$$

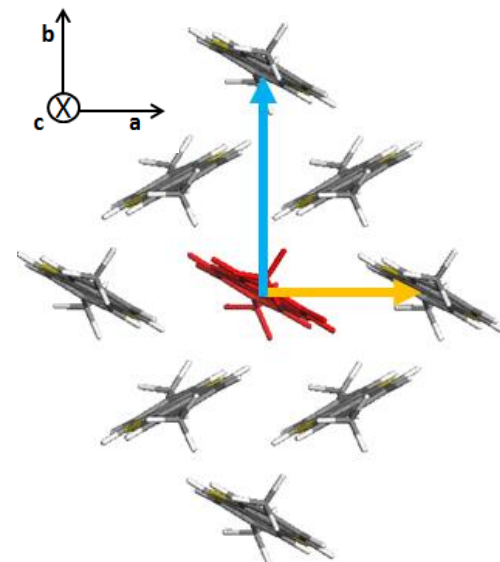
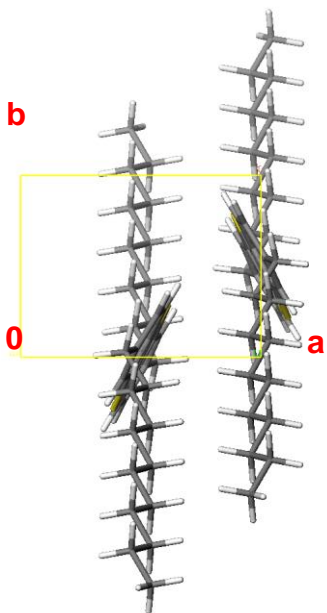
	Transport électrique	Transport thermique
	μ_{h+} [cm ² /V.s]	κ_l [W/m.K]
a	3.31	0.33
b	0.90	0.25
c	X	0.90

$$\frac{\kappa_l^a}{\kappa_l^b} \sim 1.32$$

Isotropie du transport de la chaleur dans le plan *ab* (2D)

$$\mu_{h+}^a > \mu_{h+}^b$$

Anisotropie du transport de charges
électriques dans le plan *ab* (1D)



Comparaison du transport de la chaleur et de charges - 2,7-BTBT-

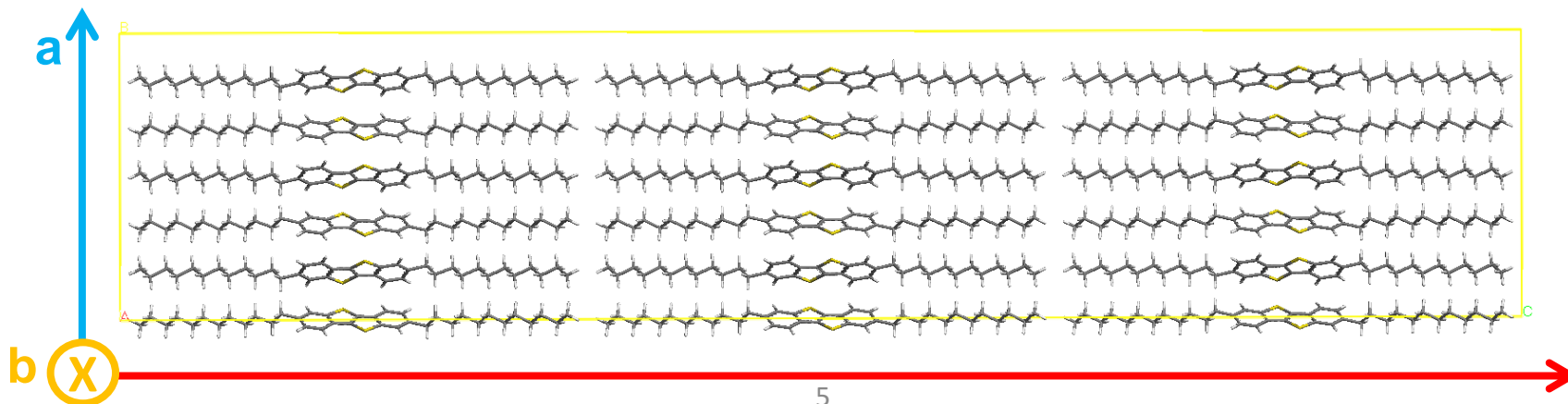
$$\frac{\mu_{h+}^a}{\mu_{h+}^b} \sim 3.67$$

	Transport électrique	Transport thermique
	μ_{h+} [cm ² /V.s]	κ_l [W/m.K]
a	3.31	0.33
b	0.90	0.25
c	X	0.90

$$\frac{\kappa_l^a}{\kappa_l^b} \sim 1.32$$

Isotropie du transport de la chaleur dans le plan *ab* (2D)

Transport de la chaleur plus favorable **selon la direction des groupements latéraux**



Comparaison du transport de la chaleur et de charges - 2,7-BTBT-

$$\frac{\mu_{h+}^a}{\mu_{h+}^b} \sim 3.67$$

	Transport électrique	Transport thermique
	μ_{h+} [cm ² /V.s]	κ_l [W/m.K]
<i>a</i>	3.31	0.33
<i>b</i>	0.90	0.25
<i>c</i>	X	0.90

$$\frac{\kappa_l^a}{\kappa_l^b} \sim 1.32$$

Isotropie du transport de la chaleur dans le plan *ab* (2D)

Transport de la chaleur plus favorable **selon la direction des groupements latéraux**

Orthogonalité entre le transport du courant et de la chaleur

Intérêt technologique