

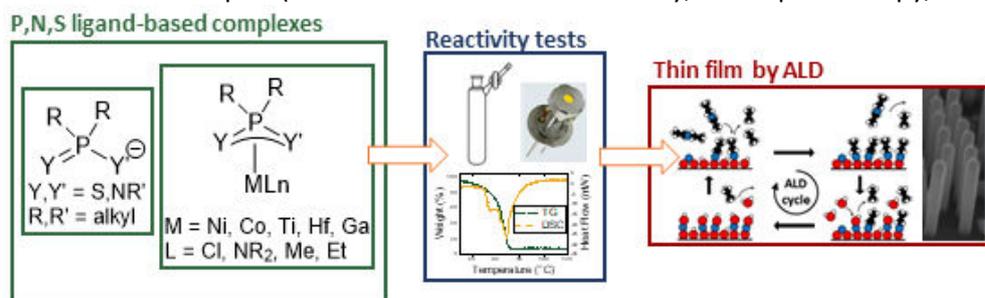
**WANTED : Talented candidate for a postdoctoral fellowship from [E4C interdisciplinary center](#)**

**Screening method of ALD (*Atomic Layer Deposition*) precursors to explore the potential of P,N,S ligands towards functional materials for photovoltaic devices**

The large deployment of photovoltaic (PV) energy is the result of lower production costs, support policies and technological advances.<sup>1</sup> By 2050, 4 to 8 TW will be installed worldwide, which requires a reduction of economic and environmental costs, an increase of the production capacity, and the development of alternative uses (BI-PV, agri-PV, flexible, etc.). Thus, academic and industrial communities are developing innovative architectures (bifacial, multi-junction, flexible, ...) involving new materials, new interfaces and giving an increasingly important place to chemistry. Atomic Layer Deposition (ALD) has emerged as a powerful tool for nanomaterial synthesis and surface functionalization because of its unique advantages: based on self-limiting surface chemical reactions it generates ultra-thin, dense, homogeneous, **conformal** films under **mild conditions** (T = 25 - 500°C, P = mbar), and with an **atom-level control of film thickness and composition**. It uses **molecular precursors** that must meet several criteria (in particular volatility, thermal stability and reactivity) and dictate the growth parameters and properties of the deposited films.<sup>2</sup> At this stage the role of the chemist is fundamental. Indeed, although the wide development of ALD technics, the number of precursors of ligands having been considered remain limited as there are mainly commercially available ones.

The goal of this postdoctoral proposal is dual. On one hand, it targets the development of new series of molecular precursors which are supported by **heteroatoms (P, S, N) rich ligands** in order to prepare new N-S, P- containing thin film materials. The synthesis and characterization of ligands and their metal complexes will be achieved using conventional techniques (air-sensitive molecular chemistry, NMR spectroscopy, X-ray diffraction analysis).

On the other hand, the project aims at developing an innovative screening method based on thermal analysis, reactivity tests in



solution, as well as ALD deposition tests using a QCM (Quartz Crystal Microbalance) setup.

Thus, best candidates will be used in ALD thin film deposition. The methodology is schematized above.

**We are looking for a talented synthetic chemist with an experience in organometallic chemistry and an interest for material science.** The experiments will take place in two laboratories of Ecole Polytechnique in the south of Paris ([Laboratoire de Chimie Moléculaire](#), [Institut Photovoltaïque d'Île de France](#)).

To apply, send a CV to be sent to Nathanaelle Schneider ([n.schneider@cnsr.fr](mailto:n.schneider@cnsr.fr)) and Audrey Auffrant ([audrey.auffrant@polytechnique.edu](mailto:audrey.auffrant@polytechnique.edu)). Application deadline: 10/04/2023

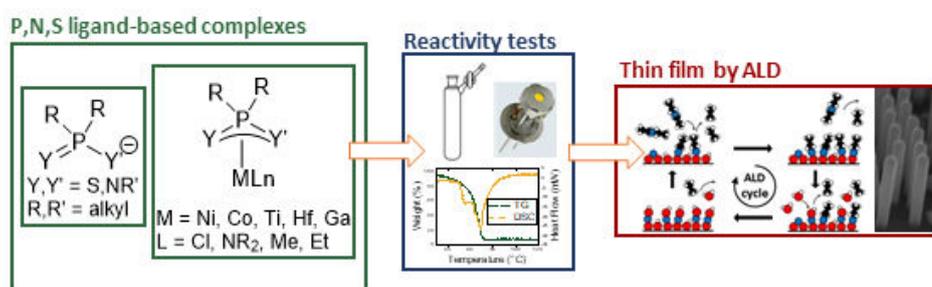
- (1) *Global Market Outlook 2018-2022*. <http://www.solarpowereurope.org/global-market-outlook-2018-2022/> (accessed 2019-04-05).
- (2) Johnson, A. L.; Parish, J. D. Recent Developments in Molecular Precursors for Atomic Layer Deposition. In *Organometallic Chemistry*; 2018; pp 1–53. <https://doi.org/10.1039/9781788010672-00001>.

**Recherche de candidats talentueux pour un financement postdoctoral du centre  
interdisciplinaire [E4C \(Energy for Climate\)](#)**

**Exploration du potentiel des complexes à ligands P,N,S comme précurseurs ALD  
par une méthode de criblage innovante pour la fabrication de matériaux  
fonctionnels pour des dispositifs photovoltaïques**

Le déploiement croissant de l'énergie photovoltaïque (PV) est le fruit des baisses des coûts de production, des politiques de soutien et des avancées technologiques.<sup>1</sup> D'ici 2050, c'est 4 à 8 TW qui seront installés dans le monde ce qui impose une réduction du coût économique et environnemental, une augmentation des capacités de production, et le développement d'usages alternatifs (BI-PV, agri-PV, flexible, ...). C'est pourquoi les milieux industriel et académique travaillent au développement d'architectures innovantes (bifaciale, multi-jonction, flexible, ...) utilisant de nouveaux matériaux, de nouvelles interfaces et donc faisant une place grandissante à la chimie. L'ALD (Atom Layer Deposition) est un outil puissant de **synthèse de nanomatériaux** et de **fonctionnalisation de surface** car elle possède des atouts uniques. C'est un dépôt en phase vapeur qui met en jeu des réactions chimiques **séquentielles et autolimitées de surface** permettant d'engendrer des couches ultra minces et homogène avec un excellent contrôle et ceux dans des conditions douces. Il met en jeu des **précurseurs moléculaires utilisés** qui doivent répondre à certains critères (volatilité, thermal stabilité, and réactivité) et dicte les paramètres de croissance et les propriétés des films déposés.<sup>2</sup> C'est à ce niveau que l'apport du chimiste de synthèse est fondamental. En effet malgré le large développement de la technique ALD, le nombre de précurseurs moléculaires utilisés reste très limité puisque la majeure partie d'entre eux sont des composés commerciaux.

L'enjeu de ce sujet de postdoc est double. Il s'agit d'une part de mettre au point une nouvelle gamme de précurseurs moléculaires comportant **des ligands riches en hétéroatomes (P, S, N)** dans l'objectif de préparer, de nouveaux matériaux de type nitrure, phosphure, et sulfure. Il faudra donc mener à bien la synthèse et la caractérisation de ces ligands et de leurs complexes (synthèse sous atmosphère inerte, spectroscopie RMN, cristallographie des rayons X). D'autre part, il s'agit de mettre au point une méthode de sélection innovante des précurseurs métalliques basés sur des mesures thermiques, des tests de réactivité en solution, et des tests de dépôts ALD sur microbalance à quartz. Ainsi seuls les meilleurs candidats seront utilisés pour la préparation de couches minces pour ALD. La méthodologie est schématisée ci-contre.



En conséquence pour ce projet nous recherchons un.e chimiste de synthèse ayant une expérience en chimie organométallique et un intérêt pour la chimie des matériaux. Les travaux seront menés au sein de 2 labos de l'école polytechnique Paris ([Laboratoire de Chimie Moléculaire](#), [Institut Photovoltaïque d'Île de France](#)).

Pour candidate merci d'envoyer un CV à Nathanaelle Schneider ([n.schneider@cnsr.fr](mailto:n.schneider@cnsr.fr)) and Audrey Auffrant ([audrey.auffrant@polytechnique.edu](mailto:audrey.auffrant@polytechnique.edu)) au plus tard le 10/04/2023.

- (1) *Global Market Outlook 2018-2022*. <http://www.solarpowereurope.org/global-market-outlook-2018-2022/> (accessed 2019-04-05).
- (2) Johnson, A. L.; Parish, J. D. Recent Developments in Molecular Precursors for Atomic Layer Deposition. In *Organometallic Chemistry*; 2018; pp 1–53. <https://doi.org/10.1039/9781788010672-00001>.