

Afonso DA CUNHA FERREIRA présentera ses travaux de thèse le 16 juin prochain.
Vous pouvez diffuser cette information à des collègues pouvant être intéressés par
cette soutenance.

Soutenance de thèse
Institut Foton – équipe OHM
le mardi 16 juin 2020 à 14h (visioconférence)

Propriétés structurales et dynamiques de pérovskites hybrides pour le photovoltaïque

Afonso DA CUNHA FERREIRA

Jury :

Stéphane PAILHÈS	<i>Chargé de recherche CNRS HDR, ILM, Lyon</i>	Rapporteur
Emmanuelle DELEPORTE	<i>Professeure, ENS Cachan</i>	Rapporteuse
Bernard HEHLEN	<i>Professeur, Université Montpellier II</i>	Examineur
Claudine KATAN	<i>Directrice de recherche CNRS, ISCR, Rennes</i>	Examinatrice
Philippe BOURGES	<i>Directeur de recherche, LLB, Saclay</i>	Co-directeur de thèse
Jacky EVEN	<i>Professeur, Institut FOTON, INSA Rennes</i>	Directeur de thèse

Résumé

Ce projet se concentre sur l'étude de pérovskites hybrides à base de plomb (HOP), MAPbBr_3 , MAPbI_3 , FAPbBr_3 et $\alpha\text{-FAPbI}_3$. Nous nous appuyons sur la spectroscopie de diffusion inélastique de neutrons (INS), car elle permet de sonder systématiquement les propriétés structurales de ces matériaux. L'évolution des paramètres d'élasticité avec le paramètre de réseau permet d'expliquer les conductivités thermiques très basses de ces composés, et de comprendre l'instabilité structurale de $\alpha\text{-FAPbI}_3$. Nous présentons également ici une comparaison détaillée des excitations optiques dans les quatre composés, dans laquelle nous discutons avec soin de l'attribution des modes de vibrations structurales respectifs. Contrairement aux attentes théoriques et au comportement classique des composés semi-conducteurs classiques, les modes de phonon ne montrent pas de dispersion, ce qui suggère un comportement anharmonique très fort et des effets de localisation. Ce comportement remet en question la validité de l'image de quasi-particule pour décrire les phonons utilisée pour écrire l'interaction des porteurs de charges avec le réseau, interaction de Fröhlich pour la mobilité des porteurs. Par ailleurs, le recouvrement des modes acoustiques avec les modes optiques de basses énergie peut aider à résoudre le paradoxe apparent de la dépendance en température typique des phonons acoustiques. Cette étude expérimentale pourra également fournir un solide point de départ pour des calculs théoriques permettant de mieux comprendre les propriétés fondamentales de ces matériaux.