
Elucider les mécanismes de Photo-dégradation dans les Halogénures de Pérovskites pour le Photovoltaïque

DIRECTEUR DE THESE : LAURENT SIMON CO-ENCADRANT : JEREMY HIEULLE
INSTITUT DE SCIENCE DES MATERIAUX DE MULHOUSE (IS2M) - UMR 7631 DU CNRS,
3B RUE ALFRED WERNER - 68093 MULHOUSE CEDEX
TEL : 0671939840; E-MAIL : JEREMY.HIEULLE@UHA.FR ET LAURENT.SIMON@UHA.FR,

Contexte général : Les cellules solaires tandem en silicium/pérovskite ont le potentiel de dépasser la limite d'efficacité des dispositifs à une seule jonction tout en conservant des coûts faibles [1]. Cependant, leur stabilité reste un enjeu majeur, car la migration ionique [2-3] et la ségrégation de phase dans la couche de Pérovskite, induites par la lumière, favorisent la dégradation de leur performance [4-5].

Objectifs du projets : Ce projet de thèse vise à comprendre la dégradation des pérovskites hybrides, essentielles pour les cellules solaires tandem. Il étudie la migration ionique et la ségrégation de phase induites par la lumière, en utilisant l'outil AttoLight pour analyser, à l'échelle nanométrique, la structure, la composition et les propriétés optoélectroniques des frontières de grain avant et après illumination. L'objectif est de déterminer comment ces phénomènes participent à la dégradation, et d'élaborer des stratégies pour améliorer la stabilité des matériaux Pérovskites, cruciale pour leur déploiement à grande échelle dans l'énergie solaire.

La microscopie corrélative AttoLight permettra de suivre en temps réel la ségrégation de phase et la dégradation dans la pérovskite. Elle combinera des cartes topographiques MEB, cathodoluminescence et photoluminescence pour relier directement topographie et propriétés optoélectroniques. Les phénomènes de migration ionique s'observent sur des durées allant de quelques minutes à une heure. Une attention particulière sera portée à la dépendance de ces phénomènes par rapport à la longueur d'onde de la lumière incidente. Identifier les longueurs d'onde auxquelles la dégradation apparaît est un enjeu majeur pour le photovoltaïque, car cela pourrait permettre de protéger la cellule solaire simplement en utilisant un filtre de couleur adapté. Le projet vise également à identifier si il y a un type de défaut ou de lacunes bien particulier qui favorisent la migration ioniques. Enfin, l'utilisation de couches de passivation (par exemple, des dérivés aromatiques) pourra être envisagée pour bloquer la migration des ions et prévenir la formation de défauts ou de lacunes dans la structure de la pérovskite. La microscopie corrélative offrira ainsi une mesure directe de l'impact de ces passivations sur les propriétés optoélectroniques.

Encadrement :

L'étudiant travaillera sous la supervision du Dr. Jeremy Hieulle, maître de conférence à l'UHA, au sein du groupe *Physique des Systèmes de Basse Dimensionnalité (PSBD)*, dirigé par Dr. Laurent Simon.

[1] National Renewable Energy Laboratory NREL Chart, (2023).

[2] Y. Yuan, J. Huang, Photovoltaic Switching Mechanism in Lateral Structure Hybrid Perovskite Solar Cells, *Adv Energy Mater.* **5** (2015).

[3] C. Eames, A. Walsh, Ionic transport in hybrid lead iodide perovskite solar cells, *Nat Commun.* **6** (2015).

[4] E.T. Hoke, D.J. Slotcavage, M.D. McGehee, Reversible photo-induced trap formation in mixed-halide hybrid perovskites for photovoltaics, *Chem Sci.* **6**, 613 (2015).

[5] K. Domanski, A. Hagfeldt, A. Abate, Migration of cations induces reversible performance losses over day/night cycling in perovskite solar cells, *Energy Environ Sci.* **10**, 604 (2017).