

## **Optimisation des cellules solaires à base de pérovskite :**

*Développement d'un procédé innovant de dépôt par électrodéposition*

*afin de réaliser des matériaux pérovskites moins toxiques et de nouvelles architectures de dispositifs photovoltaïques*

*Development of an innovative electrodeposition process to produce less toxic perovskite materials and new photovoltaic device architectures*

**Type d'offre :** Offre de thèse

**Financement :** Public

**Etablissement d'accueil :** LEPMI (UMR 5279 CNRS) – équipe GUIDE

**Lieu de travail :** Le Bourget du Lac - France

**Spécialité :** Chimie - **Chimie des matériaux** - Physique

La thèse se déroulera dans les locaux du LEPMI (Laboratoire d'Electrochimie et de Physicochimie des Matériaux et des Interfaces, UMR n°5279) basé à l'INES (Institut National de l'Energie Solaire) au Bourget du Lac (73370).

Le candidat doit posséder un master II ou un diplôme d'ingénieur en sciences pour l'énergie, ou sciences des matériaux. Cette thèse s'adresse à un candidat possédant un goût prononcé pour l'expérimentation avec de bonnes compétences en sciences des matériaux, en électrochimie, ainsi qu'en caractérisation des propriétés physico-chimique et fonctionnelles. Quelques notions en chimie et une expérience soit dans le domaine du photovoltaïque, soit en électrochimie seront un plus pour cette offre de thèse.

### CRITERES EVALUATION DOSSIERS :

Les candidats seront sélectionnés d'abord sur dossier. Un entretien par téléphone ou visioconférence sera ensuite organisé.

- Adéquation entre le diplôme de Master (ou équivalents) et le sujet de thèse
- Notes et classements en Master, et régularité dans le cursus universitaire
- Maîtrise de l'anglais
- Capacité du candidat à présenter ses travaux
- Expériences professionnelle de type stage(s) en laboratoire ou autre ; éventuels travaux de recherche déjà réalisés (rapports, publications).

Pour candidater, contacter par email avant le 01 mai 2022:

Lara PERRIN : [lara.perrin@univ-smb.fr](mailto:lara.perrin@univ-smb.fr)

**SUJET :** L'énergie photovoltaïque est considérée de nos jours comme la source d'énergie naturelle la plus utile. Différents types de technologies solaires sont actuellement disponibles industriellement, et les travaux de recherche et développement pour améliorer leur potentiel se poursuivent. De nos jours, les cellules à base de silicium sont les plus commercialisées et elles produisent des rendements de conversion solaire élevés. Cependant, des procédés coûteux à haute température et utilisant un vide poussé sont nécessaires afin d'élaborer du silicium suffisamment pur. Un autre matériau photo-actif appelé pérovskite vient d'émerger dans la communauté de l'énergie solaire. Il attire actuellement l'attention du monde entier car il se distingue par ses performances photovoltaïques exceptionnelles, ses propriétés d'absorption et sa mobilité de porteurs de charge élevées, ainsi que son processus de fabrication plutôt simple. Le coût de production étant inférieur à celui des cellules solaires au silicium tout en étant aujourd'hui capable de générer un rendement de conversion d'énergie proche de celui des cellules solaires au silicium, les cellules solaires à pérovskite sont considérées comme l'avenir de la technologie photovoltaïque.

En plus de leur efficacité rapidement accrue, ces dernières se caractérisent par une grande flexibilité en terme de possibilités à la fois lors du choix de la méthode de déposition ou de l'architecture. C'est dans ce contexte que s'inscrit le sujet de thèse proposé. Au effet, l'un des facteurs les plus importants pour optimiser les performances des cellules solaires à base de pérovskite est la qualité de la couche active élaborée. La plupart des propriétés de ce film comme sa cristallinité, sa morphologie et son uniformité dépendent de la méthode de fabrication utilisée. Le revêtement par enduction centrifuge (spin-coating) est actuellement la méthode de dépôt la plus couramment utilisée pour les pérovskites. Cependant, elle ne permet le dépôt que sur de petites surfaces, nécessite quelques additifs toxiques pour maintenir la stabilité de la pérovskite, ainsi qu'un travail en milieu inerte, ce qui augmente son coût. Il existe donc un besoin crucial de rechercher d'autres méthodes de dépôt, plus écologiques, à moindre coût, et applicables à une production à grande échelle. En particulier, une technique de dépôt par électrodéposition a pu récemment être explorée au sein du laboratoire LEPMI grâce à une première thèse. Celle-ci s'est avérée très prometteuse : elle est peu coûteuse, forme des couches lisses et uniformes, peut être appliquée pour des dispositifs à grande échelle et, surtout, elle est élaborée en conditions ambiantes et est écologique concernant l'ingénierie des solvants. En effet, aucun solvant toxique n'est nécessaire pour stabiliser ou améliorer la morphologie des films obtenus. Les principaux solvants utilisés sont l'eau déminéralisée, l'éthanol et l'isopropanol. Le sujet de cette nouvelle thèse consistera donc maintenant à imaginer le développement d'une stratégie par électrodéposition permettant de répondre à une préoccupation majeure concernant la toxicité du matériau pérovskite en lui-même. La pérovskite hybride halogénée la plus courante pour les applications photovoltaïques est  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ , mais celle-ci contient du plomb. La substitution du plomb par Sn, Ge, Bi, Sb, Cu ou d'autres candidats potentiels n'a jamais été exploré par électrodéposition et serait un objectif très pertinent afin de développer ce procédé de dépôt innovant.

Le choix de la formulation de la pérovskite ainsi que l'architecture du dispositif prise dans son intégralité étant une combinaison indissociable pour obtenir de bonnes performances, les deux seront modifiées de concert afin de maximiser l'efficacité des cellules solaires réalisées. De plus, précédemment avec d'autres méthodes de dépôt, le design d'architectures moléculaires par substitution de cations ou d'anions, ou même l'utilisation d'additifs, s'est avéré être une stratégie efficace pour améliorer davantage les propriétés optoélectroniques de la pérovskite permettant d'optimiser à la fois performance et stabilité. Ainsi, une méthode d'incorporation de ce genre d'additif pourrait être imaginé lors du processus d'élaboration de la pérovskite par électrodéposition.

**SUBJECT:** Photovoltaic energy is considered the most useful natural energy source today. Different types of solar technologies are currently available industrially, and research and development work to improve their potential is ongoing. Today, silicon-based cells are the most commercially available and produce high solar conversion efficiencies. However, expensive high temperature and high vacuum processes are required to produce sufficiently pure silicon. Another photo-active material called perovskite has just emerged in the solar energy community. It is currently attracting worldwide attention because of its outstanding photovoltaic performance, high absorption properties and charge carrier mobility, as well as its rather simple fabrication process. With production costs lower than those of silicon solar cells, yet now capable of generating energy conversion efficiencies close to those of silicon solar cells, perovskite solar cells are considered the future of photovoltaic technology.

In addition to their rapidly increasing efficiency, these cells are characterized by a great flexibility in terms of both the choice of the deposition method and the architecture. This is the context of the proposed PhD thesis. Indeed, one of the most important factors to optimize the performance of perovskite-based solar cells is the quality of the active layer elaborated. Most of the properties of this film such as its crystallinity, morphology and uniformity depend on the fabrication method used. Spin coating is currently the most commonly used deposition method for perovskites. However, it only allows deposition on small areas, requires some toxic additives to maintain the stability of the perovskite, as well as working in an inert environment, which increases its cost. Therefore, there is a crucial need to search for alternative deposition methods that are more environmentally friendly, with lower cost, and applicable to large-scale production. In particular, an electrodeposition technique has recently been explored in the LEPMI laboratory thanks to a first thesis. This technique has proven to be very promising: it is inexpensive, forms smooth and uniform layers, can be applied for large-scale devices and, most importantly, it is developed under ambient conditions and is environmentally friendly regarding solvent engineering. Indeed, no toxic solvent is needed to stabilize or improve the morphology of the obtained films. The main solvents used are demineralized water, ethanol and isopropanol. The subject of this new thesis will now be to imagine the development of an electrodeposition strategy to address a major concern regarding the toxicity of the perovskite material itself. The most common halogenated hybrid perovskite for photovoltaic applications is  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ , but it contains lead. The substitution of lead by Sn, Ge, Bi, Sb, Cu or other potential candidates has never been explored by electrodeposition and would be a very relevant objective to develop this innovative deposition process.

The choice of the perovskite formulation as well as the architecture of the device taken as a whole being an inseparable combination to obtain good performances, both will be modified in concert in order to maximize the efficiency of the realized solar cells. Furthermore, previously with other deposition methods, the design of molecular architectures by cation or anion substitution, or even the use of additives, has proven to be an effective strategy to further improve the optoelectronic properties of perovskite allowing to optimize both performance and stability. Thus, a method of incorporating this kind of additive could be imagined during the process of elaboration of novel perovskite materials by electrodeposition.