

Etude *Ab initio* des pérovskites hybrides 2D et 3D : Confinements quantiques et diélectriques et effet Rashba

D. Sapori¹, L. Pedesseau¹, M. Kepenekian², A. Rolland¹, C. Katan², J. Even¹

¹ *Fonctions Optiques pour les Technologies de l'Information, FOTON UMR 6082, CNRS, INSA de Rennes, 35708 Rennes, France*

² *Institut des Sciences Chimiques de Rennes, ISCR UMR 6226, CNRS, Université de Rennes 1, 35042 Rennes, France*

Contact : daniel.sapori@insa-rennes.fr

Mots Clés: pérovskites hybrides, cellules solaires, confinement diélectrique, confinement quantique, effet Rashba, effet Dresselhaus, théorie de la fonctionnelle de la densité

Depuis les années 80, les pérovskites hybrides 2D sont étudiées pour leurs propriétés semi-conductrices pour des applications telles que les transistors à effet de champs (FET)¹ ainsi que les diodes électroluminescentes (LED)². Ce n'est que très récemment que les pérovskites hybrides 3D ont intéressé la communauté scientifique du à une évolution spectaculaire des rendements de 3.8% en 2009³ à plus de 21% en 2016⁴. Les confinements quantiques et diélectriques peuvent avoir un impact non négligeable sur les propriétés physiques des matériaux et hétérostructures. Le confinement diélectrique était modélisé jusqu'à présent de façon rudimentaire et totalement empirique à l'aide de jonctions abruptes. Ici nous utilisons une nouvelle méthode reposant sur la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT), développée pour étudier les effets de confinement diélectrique⁵⁻⁷, pour les pérovskites hybrides 2D et 3D. Cette méthode permet de prendre en compte les détails des interfaces à l'échelle atomique. Très récemment, des colloïdes de pérovskites hybrides ont été synthétisés permettant d'obtenir de nouvelles propriétés^{8,9}. Le confinement quantique de nanoplaquettes de pérovskites hybrides 3D est également abordé⁵. Par ailleurs, en 2013, la présence d'un couplage spin-orbite géant dans les pérovskites hybrides a été prédit par des calculs basés sur la DFT¹⁰⁻¹² et l'effet Rashba (dédoublment du spin) a également été prédit pour MAPbI₃^{12,13} offrant ainsi de nouvelles possibilités pour des applications basées sur la spintronique. Nous proposons ici également une étude de l'effet Rashba et de Dresselhaus dans les pérovskites hybrides sous champ électrique externe¹⁴.

1 C. R. Kagan, *Science*, 1999, **286**, 945–947.

2 K. Chondroudis and D. B. Mitzi, *Chem. Mater.*, 1999, **11**, 3028–3030.

3 A. Kojima, K. Teshima, Y. Shirai and T. Miyasaka, *J. Am. Chem. Soc.*, 2009, **131**, 6050–6051.

4 NREL (National Renewable Energy Laboratory), 2015.

5 D. Sapori, M. Kepenekian, L. Pedesseau, C. Katan and J. Even, *Nanoscale*, 2016, DOI: 10.1039/C5NR07175E

6 J. Even, L. Pedesseau and M. Kepenekian, *Phys Chem Chem Phys*, 2014, **16**, 25182–25190.

7 R. Benchamekh, N. A. Gippius, J. Even, M. O. Nestoklon, J.-M. Jancu, S. Ithurria, B. Dubertret, A. L. Efros and P. Voisin, *Phys. Rev. B*, 2014, **89**.

8 J. A. Sichert, Y. Tong, N. Mutz, M. Vollmer, S. Fischer, K. Z. Milowska, R. García Cortadella, B. Nickel, C. Cardenas-Daw, J. K. Stolarczyk, A. S. Urban and J. Feldmann, *Nano Lett.*, 2015, DOI: 10.1021/acs.nanolett.5b02985.

9 P. Tyagi, S. M. Arveson and W. A. Tisdale, *J. Phys. Chem. Lett.*, 2015, **6**, 1911–1916.

10 J. Even, L. Pedesseau, M.-A. Dupertuis, J.-M. Jancu and C. Katan, *Phys. Rev. B*, 2012, **86**.

11 J. Even, L. Pedesseau, J.-M. Jancu and C. Katan, *J. Phys. Chem. Lett.*, 2013, **4**, 2999–3005.

12 J. Even, L. Pedesseau, J.-M. Jancu and C. Katan, *Phys. Status Solidi RRL - Rapid Res. Lett.*, 2014, **8**, 31–35.

13 M. Kim, J. Im, A. J. Freeman, J. Ihm and H. Jin, *Proc. Natl. Acad. Sci.*, 2014, **111**, 6900–6904.

14 M. Kepenekian, R. Robles, C. Katan, D. Sapori, L. Pedesseau and J. Even, *ACS Nano*, 2015, DOI: 10.1021/acs.nano.5b04409.