

Contribution de la RMN haute résolution Proton à l'étude de l'ordre local dans des pérovskites hybrides

C. Roiland^a, J.-Y. Seo^b, L. Le Pollès^a, J.-C. Ameline^c, S. M. Zakeeruddin^b, J. Even^d, M. Grätzel^b, C. Katan^a

^a ISCR, UMR 6226, CNRS, Université de Rennes 1, Rennes, France (claire.roiland@univ-rennes1.fr)

^b Laboratory of Photonics and Interfaces, École Polytechnique Fédérale de Lausanne, Lausanne, Switzerland

^c IPR, UMR 6251, CNRS, Université de Rennes 1, Rennes, France

^d Foton, UMR 6082, INSA Rennes, CNRS, Rennes, France

Les cellules solaires à base de pérovskites hybrides apparaissent depuis quelques années comme des candidats de choix pour concurrencer les cellules conventionnelles à base de silicium cristallin¹. En effet, les rendements photovoltaïques obtenus avec les pérovskites halogénées dépassent aujourd'hui 22 % et leur stabilité temporelle sous irradiation lumineuse ne cesse de s'améliorer². Ces performances s'obtiennent grâce à l'emploi de solutions solides de plus en plus complexes. Dans le cas particulier des pérovskites à réseau tri-dimensionnel formule générique APbX₃, A est un petit cation organique (Méthylammonium=MA, Formamidinium=FA,...) ou inorganique (Cs, Rb,...) et X un halogène (Cl, Br ou I).² Dans ces solutions solides, l'influence des substitutions de A et de X sur la structure et la dynamique est peu appréhendée et la RMN peut s'avérer être un outil de choix.

Récemment nous avons montré le fort potentiel de la RMN pour ces matériaux et notamment celle du plomb-207 pour sonder l'effet de la substitution de l'halogène dans MAPbX₃ (X=Cl, Br, I)³. Cet exposé vise à discuter des performances de la RMN pour analyser les implications de la substitution du cation organique MA. Nous montrerons qu'à température ambiante, la RMN du plomb-207 présente peu d'intérêt. Elle est peu sensible à la substitution du cation A et présente des temps de relaxations transversales courts qui empêchent d'envisager des expériences de corrélations. En revanche, le proton apparaît comme un candidat de choix pour l'étude de l'ordre local. Les temps de relaxation sont favorables et permettent l'utilisation du couplage dipolaire pour sonder les proximités spatiales (RFDR, BABA).

1. T.M. Brenner, *et al.* *Nature Reviews Materials* 1, 15007 (2016)

2. M. Saliba, *et al.* *Science*, 10.1126/science.aah5557 (2016)

3. C. Roiland, L. Le Pollès, R. Gautier, J. Even, C. Katan *et al.* *PCCP* 18, 27133 (2016)

The project leading to this work has received funding from the European Union's Horizon 2020 programme, through a FET Open research and innovation action under grant agreement No 687008.