

Description:

L'équipe de simulation de Rennes (~ 8 permanents) dédiée à la recherche sur les pérovskites est une équipe commune entre l'Institut FOTON et l'Institut ISCR. L'équipe de simulation conjointe a une activité pionnière dans le domaine des semi-conducteurs à pérovskites halogénées, qui a débuté à l'Institut FOTON en 2010. Les pérovskites halogénées 3D ont ouvert au cours des dernières années une voie vers des cellules solaires à faible coût offrant actuellement des rendements de conversion de plus de 25%, au niveau des technologies de cellules solaires les plus connues. Les applications attendues de cette nouvelle classe de semi-conducteurs s'étendent désormais, notamment vers les dispositifs électroluminescents. De plus, l'équipe de simulation conjointe a une forte activité sur les pérovskites halogénées de faibles dimensionnalités, tels que les pérovskites en couches 2D et les nanostructures quantiques 0D, attestées par des percées majeures dans les collaborations avec les équipes expérimentales.

La tâche du doctorant sera de réaliser des simulations abinitio (DFT) et des simulations empiriques des propriétés optoélectroniques des matériaux pérovskites et des nanostructures. Cette activité se déroulera dans le cadre de trois projets européens H2020 appliqués (Dropit, Perocube, Polloc) s'étendant de 2020 à 2023. Outre les partenariats en Europe, le doctorant bénéficiera également de solides collaborations expérimentales avec des laboratoires américains de renom dans le domaine de pérovskites situées à la Rice University à Houston, à la Northwestern University à Chicago et au Los Alamos National Laboratory.