

# Théorie des propriétés opto-électroniques d'hétérostructures pérovskites

Thèse de 3 ans proposée à l'Institut Foton  
à Rennes de Sept-Oct 2023 à Sept-Oct 2026

## Encadrants :

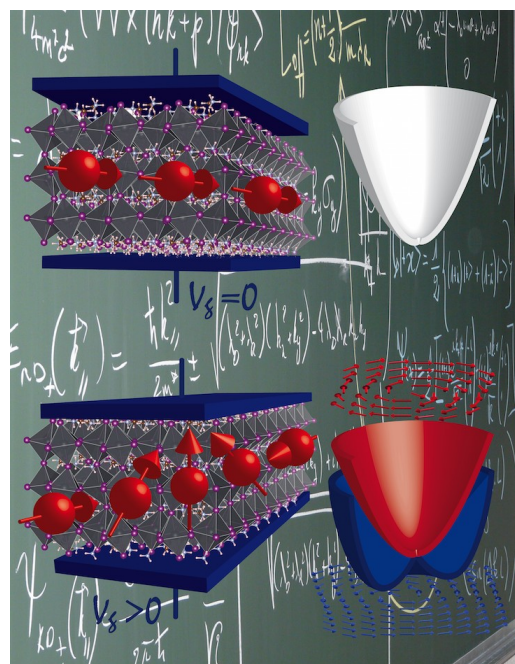
**Pr. Simon Thébaud**  
[simon.thebaud@insa-rennes.fr](mailto:simon.thebaud@insa-rennes.fr)

**Pr. Jacky Even**  
[jacky.even@insa-rennes.fr](mailto:jacky.even@insa-rennes.fr)

Mots clés : physique théorique, simulations numériques, modèles de liaisons fortes, théorie de la fonctionnelle densité, méthodes k.p, couplage électron-phonon, excitons, photovoltaïque, pérovskites.

Le groupe de théorie de l'institut Foton a développé depuis 2010 une expertise reconnue au niveau mondial pour la compréhension de la physique des matériaux pérovskites ainsi que la modélisation et la simulation de leurs propriétés optoélectroniques. Ces travaux, développés en partenariat étroit avec des laboratoires expérimentaux principalement situés à l'étranger, ont fait l'objet de publications dans des journaux tels que Nature et Science.

Les matériaux semiconducteurs pérovskites, en particulier comme empilements multicouches, sont devenus incontournables pour des applications photovoltaïques ou optoélectroniques de manière générale. La thèse, financée par le ministère de l'enseignement supérieure et de la recherche, portera sur la modélisation de structure électronique et de dynamique des porteurs de charge dans ces systèmes. Un intérêt particulier sera porté sur le couplage avec la dynamique du



réseau atomique, sur les interactions entre porteurs et sur les effets d'interface. Ces calculs seront en lien avec des études expérimentales de type pompe-sonde, microscopie, spectroscopie, sur de grandes infrastructures de recherche ou sur des dispositifs en fonctionnements effectuées par nos collaborateurs.

## Profil du candidat

Le candidat devra justifier d'un diplôme de master ou d'ingénieur, avoir des bases solides en physique de la matière condensée, et si possible des connaissances en simulation atomistique et en cristallographie. Le postulant devra avoir un intérêt prononcé pour la théorie et l'interaction avec les expérimentateurs.

La maîtrise de l'anglais est demandée (à l'écrit comme à l'oral). De bonnes notions de français sont un plus.

## Partenariats

Le projet bénéficiera des nombreuses collaborations (US/Europe) déjà existantes au sein du groupe pérovskites Rennais (<https://cv.archives-ouvertes.fr/jacky-even>). Le candidat retenu sera amené à intervenir dans le cadre des projets européens H2020 en cours.

## L'Institut Foton (CNRS, UMR6082)

L'Institut Foton est une unité mixte de recherche associant le CNRS, l'Université de Rennes et l'INSA de Rennes. La spécificité de Foton est de rassembler autour de programmes communs trois équipes et trois plateformes couvrant des domaines allant de la photonique à la production et la conversion d'énergie verte. L'équipe



Optoélectronique, Hétéroépitaxie et Matériaux, au sein de laquelle se déroulera la thèse, travaille notamment sur le photovoltaïque et

la production d'hydrogène, priorités européennes, nationales et régionales, et pour lesquelles les matériaux pérovskites font l'objet de développements sans précédent à l'échelle internationale.

Le doctorant travaillera principalement au sein du groupe Rennais de théorie (environ 15 permanents et non permanents) associant en étroite collaboration l'institut Foton et l'institut des Sciences Chimiques de Rennes sur la thématique des matériaux pérovskites. Le groupe fait partie de trois projets européens (Dropit/Perocube/Polloc), d'un projet M-ERA.NET (Phantastic) et d'un consortium d'universités et de laboratoires américains (Rice University à Houston, Northwestern University à Chicago, Los Alamos National Laboratory à Los Alamos).

## Candidater

Pour candidater et pour toute information complémentaire, contacter Jacky Even ([jacky.even@insa-rennes.fr](mailto:jacky.even@insa-rennes.fr)) et Simon Thébaud ([simon.thebaud@insa-rennes.fr](mailto:simon.thebaud@insa-rennes.fr)).

Toute candidature devra comporter les éléments suivants :

- Lettre de motivation
- CV détaillé
- Copie du diplôme de master ou équivalent
- Bulletins de notes
- Liste de publications s'il y a lieu
- Lettres (2) de recommandation

## Autres opportunités dans le groupe

Deux autres opportunités sont ouvertes dans le groupe Rennais de théorie :

- Une thèse de 3 ans proposée à l'Institut des Sciences Chimiques de Rennes de Sept-Oct 2023 à Sept-Oct 2026, contacter George Volonakis ([yorgos.volonakis@univ-rennes1.fr](mailto:yorgos.volonakis@univ-rennes1.fr)).
- Un contrat postdoctoral de 2 ans (1 an renouvelable) à l'Institut Foton avec démarrage immédiat possible, contacter Simon Thébaud ([simon.thebaud@insa-rennes.fr](mailto:simon.thebaud@insa-rennes.fr)).

# Theory of optoelectronic properties of perovskite heterostructures

3-year PhD position offered at the Foton Institute in Rennes, France, from Sept-Oct 2023 to Sept-Oct 2026

## Supervisors:

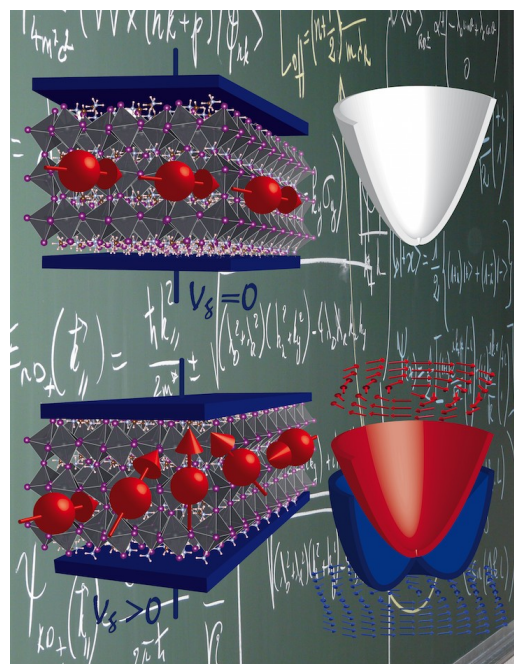
**Pr. Simon Thébaud**  
[simon.thebaud@insa-rennes.fr](mailto:simon.thebaud@insa-rennes.fr)

**Pr. Jacky Even**  
[jacky.even@insa-rennes.fr](mailto:jacky.even@insa-rennes.fr)

Keywords : theoretical physics, numerical simulations, tight-binding models, density functional theory, k.p methods, electron-phonon coupling, excitons, photovoltaics, perovskites.

The theory group at the Foton Institute has developed since 2010 a world-class expertise in understanding the physics of perovskite materials as well as modeling and simulating their optoelectronic properties. This work, done in tight collaboration with experimental laboratories in Europe and the US, has yielded multiple publications in high-impact journals such as Nature and Science.

Perovskite semiconductors have become paramount for photovoltaic applications and optoelectronics more generally, especially in the form of multilayers stackings. The PhD, fully funded by the french government, will entail modeling the electronic structure and the charge carrier dynamics in these systems. A particular interest will be given to the coupling with atomic lattice dynamics, to carrier-carrier interactions and to surface effects. These calculations will be related to experimental studies performed by our collaborators :





pump-probe, microscopy, spectroscopy, using large scientific instruments or done on functioning devices.

## Profile of the candidate

The successful candidate must have a master's degree or an engineering degree, must possess robust training in condensed matter physics and if possible in atomistic simulations and in crystallography. The candidate must have a marked interest for theory and for interactions with experimentalists.

Spoken and written proficiency in english is required. Good notions of french are a plus.

## Collaborations

The project will benefit from the many existing collaborations (US/Europe) of the Rennes theory group (<https://cv.archives-ouvertes.fr/jacky-even>). The PhD student will have the opportunity to work on ongoing H2020 EU projects.

## The Foton Institute (CNRS, UMR6082)

The Foton institute is a research laboratory managed by the National Center for Scientific Research (CNRS), the Rennes University and INSA Rennes. The specificity of Foton is to gather around common research programs three groups and three facilities spanning multiple fields from photonics to green energy generation and conversion. The PhD student will join the Optoelectronics, Heteroepitaxy and Materials group working most notably on photovoltaics and hydrogen production, which are european, national and regional priorities, and for which perovskites materials are a topic of intense research activities worldwide.



The PhD student will mainly work within the theory group in Rennes (around 15 staff, PhD students and postdocs) involving the Foton Institute and the Rennes Chemical Sciences Institute in tight collaboration on the topic of perovskite materials. The group is involved in three European Union projects (Dropit/Perocube/Polloc), a M-ERA.NET project (Phantastic), and in a consortium of american universities and laboratories (Rice University in Houston, Northwestern University in Chicago, Los Alamos National Laboratory in Los Alamos).

## Applying

To apply and for any further information, please contact Pr. Jacky Even ([jacky.even@insa-rennes.fr](mailto:jacky.even@insa-rennes.fr)) and Pr. Simon Thébaud ([simon.thebaud@insa-rennes.fr](mailto:simon.thebaud@insa-rennes.fr)).

A successful application must contain the following elements :

- Motivation letter
- Detailed *curriculum vitae*
- Copy of a master's degree or equivalent
- Grade certificates
- Publication list if applicable
- Two letters of recommandation

## Other opportunities in the group

The theory group in Rennes has two other openings :

- A 3-year PhD position offered at the Rennes Chemical Sciences Institute from Sept-Oct 2023 to Sept-Oct 2026, contact George Volonakis ([yorgos.volonakis@univ-rennes1.fr](mailto:yorgos.volonakis@univ-rennes1.fr)).

- A 2-years (1 year reconducible) postdoctoral position at the Foton Institute with immediate start possible, contact Simon Thébaud ([simon.thebaud@insa-rennes.fr](mailto:simon.thebaud@insa-rennes.fr)).