

Ecole Doctorale

Matière, Molécules et Matériaux

Laboratoire de Chimie, Electrochimie Moléculaires et Chimie Analytique

AVIS DE SOUTENANCE DE THESE

Le lundi 21 décembre 2020 à 10h

à l'Université de SFAX - faculté des sciences.

Madame MEDHIOUB OLFA

soutiendra une thèse de doctorat sur le sujet suivant :

"Etude des propriétés structurales, optiques et de la structure de bandes électroniques dans des halogénures de Plomb organiques : ABTPbCl₃ et (Mélamine) PbCl₄"

Le jury sera ainsi composé :

- M. ABID YOUNES, Professeur

Faculté de Sciences de SFAX - 3000 SFAX

- M. BOUKHEDDADEN KAMEL, Professeur des universités

Université de Versailles - VERSAILLES

- M. GUERMAZI SAMIR, Professeur

Faculté des Sciences de SFAX - 3038 SFAX

- M. KOUBAA MOHAMED, Professeur

Institut Sup. de Biotechnologie - 3000 SFAX

- M. MLAYAH ADNEN, Professeur

Université Paul Sabatier - TOULOUSE

- M. TRIKI SMAIL, Professeur des universités

Univ. de Bretagne Occidentale - BREST

A BREST, le 11 décembre 2020

Le Président de l'Université de
Bretagne Occidentale,



M. GALLOU

Titre : Etude des propriétés structurales, optiques et de la structure de bandes électroniques dans des halogénures de Plomb organiques: ABTPbCl₃ et (Mélamine)PbCl₄

Mots-clés : Matériaux hybrides organiques-inorganiques, photoluminescence, exciton de transfert de charge, auto-piégeage, transfert d'énergie résonant.

Résumé : Les travaux de recherche présentés dans ce manuscrit portent sur l'étude des propriétés structurales et optiques de deux matériaux hybrides organiques-inorganiques à base de Plomb. Le premier matériau est de formule (C₇H₇N₂S)[PbCl₃]. Sa structure cristalline est constituée de doubles chaînes [PbCl₃]_nⁿ⁻, entourées par des cations organiques ABT.H⁺. La densité d'état partielle montre que le composé hybride a un alignement des niveaux électroniques de type-II. Sous une excitation UV, le composé présente une émission bleuâtre centrée à 483 nm attribuées aux excitons de transfert de charge, qui ont une durée de vie de 5.64 ns. La dynamique des porteurs est étudiée en mesurant les spectres de luminescence en fonction de la température. Le deuxième composé est de formule (C₃H₈N₆)[PbCl₄]. Sa structure cristalline est caractérisée par un empilement en alternance entre les couches formées par les cations organiques (Mélamine.2H)²⁺ et les feuillets inorganiques PbCl₄²⁻. Des calculs de la structure de bande électronique montrent l'apparition de bandes supplémentaires à l'intérieur de la bande interdite du matériau hybride à cause d'un mécanisme de transfert d'énergie résonant. Sous excitation UV, le spectre de photoluminescence présente une émission très intense quasi blanche. En plus des excitons inorganiques de Wannier (328 nm) et des excitons organiques singlets (470 nm), le diagramme d'énergie implique des exciton auto-piégés (500 nm), ainsi que des excitons organiques triplets autour de 555 et 595 nm.

Title: Structural, optical and electronic band structure study of organic lead halides: ABTPbCl₃ and (Melamine) PbCl₄

Keywords: Organic-inorganic hybrid materials, photoluminescence, charge transfer exciton, self-trapping, resonant energy transfer.

Abstract: The research presented in this manuscript focuses on the structural and optical properties of two organic-inorganic hybrid materials based on lead halide. The first hybrid is of formula (C₇H₇N₂S)[PbCl₃]. Its structure consists of double chains [PbCl₃]_nⁿ⁻, surrounded by organic cations of ABT.H⁺. The density of states calculations demonstrate that ABTPbCl₃ has a type-II band alignment. Under UV excitation, the photoluminescence spectrum of ABTPbCl₃ shows a band emission centered at 483 nm attributed to charge transfer excitons, which have a lifetime of 5.64 ns. The carrier dynamics is investigated by measuring the luminescence spectra as a function of temperature. The second compound is of formula (C₃H₈N₆)[PbCl₄]. Its crystal structure is characterized by an alternating stack between the layers formed by the organic (Mélamine.2H)²⁺ cations and the inorganic sheets PbCl₄²⁻. The density of states calculations shows the appearance of additional bands within the band gap of the hybrid material due to a resonant energy transfer. Under UV excitation, this material shows an intense quasi white light emission. In addition to the inorganic Wannier excitons (328 nm) and the singlet organic excitons (470 nm), the energy diagram describing the absorption and emission processes involves a self-trapped exciton characteristic of the highly distorted PbCl₆ octahedron layers (500 nm), as well as triplet organic excitons around 555 and 595 nm.