



Ecole Doctorale - 104

Sciences de la Matière, du Rayonnement
et de l'Environnement

ETABLISSEMENT : Université de Lille

Laboratoire(s) de Rattachement : Unité de Catalyse et Chimie du Solide (UCCS) & Laboratoire de Spectroscopie pour les Interactions, la Réactivité et l'Environnement (LASIRE)

Domaine scientifique, Spécialité :

DS4 | Chimie des matériaux

Direction de thèse : REDDY Manjunatha, MCF, HDR, gnm.reddy@univ-lille.fr

Co-direction : VEZIN Hervé, DR, CNRS, herve.vezin@univ-lille.fr

Titre de la thèse : Révéler le potentiel des photovoltaïques en couches minces grâce aux méthodes de résonance magnétique

SUJET DE THESE (environ 1/2 page)

Les polymères semi-conducteurs organiques et les matériaux hybrides à base de pérovskites se sont imposés comme des technologies prometteuses pour la conversion de l'énergie solaire dans des **applications de grande surface** et distribuées, telles que le **photovoltaïque intégré au bâtiment, les façades actives**, l'Internet des objets et les réseaux de capteurs extérieurs. Leur attractivité repose sur leur faible masse, leur flexibilité mécanique, leur mise en œuvre par procédés en solution et leur compatibilité avec des techniques de fabrication à grande échelle, ainsi que sur **l'amélioration continue de leurs rendements de conversion énergétique**. Néanmoins, la stabilité opérationnelle limitée demeure un verrou majeur à leur déploiement à grande échelle. Les pertes de performance résultent de processus de dégradation complexes et multi-échelles, impliquant des réactions chimiques, une évolution morphologique des couches minces photoactives et des instabilités aux interfaces des architectures de dispositifs. Dans ce projet, nous proposons d'exploiter la spectroscopie et l'imagerie par résonance magnétique comme une plateforme puissante et non destructive pour étudier le dépôt des films, l'assemblage des dispositifs et leur instabilité en fonctionnement. Ces méthodes peuvent être mises en œuvre sous illumination, température et environnement contrôlés, permettant des analyses de **RMN du solide in situ lors du dépôt des couches** et des **caractérisations operando par RPE** lors des tests de stabilité, comblant ainsi l'écart entre les conditions de laboratoire et l'utilisation réelle. La RMN du solide (SSNMR, à RM2I-UCCS) offre une sensibilité atomique à la structure moléculaire, aux interactions intermoléculaires et aux dynamiques locales, fournissant un accès direct aux mécanismes de dégradation photo- et thermiques dans les couches photovoltaïques. En complément, la résonance paramagnétique électronique (RPE, à LASIRE) permet de détecter spécifiquement les espèces paramagnétiques, telles que les radicaux, états pièges et charges accumulées, qui gouvernent la durée de vie des dispositifs. Les approches d'imagerie RMN et RPE apportent enfin une vision spatialisée de l'hétérogénéité, de la diffusion et des gradients de dégradation, reliant les évolutions locales aux performances macroscopiques et guidant la conception rationnelle de technologies photovoltaïques plus stables et commercialement viables.

Date de recrutement envisagée : 01/10/2026

Contact (adresse e-mail) : herve.vezin@univ-lille.fr ; gnm.reddy@univ-lille.fr

Remarques/commentaires supplémentaires : Financement l'UE (~25k €) disponible





Ecole Doctorale - 104

Sciences de la Matière, du Rayonnement
et de l'Environnement

INSTITUTION: University of Lille

Laboratory(s) to which they are attached : Unité de Catalyse et Chimie du Solide (UCCS) & Laboratoire de Spectroscopie pour les Interactions, la Réactivité et l'Environnement (LASIRE)

Scientific field, Specialty :

DS4 | Materials Chemistry

Thesis supervision: REDDY Manjunatha, MCF, HDR, gnm.reddy@univ-lille.fr

Co-supervision: VEZIN Hervé, DR, CNRS, herve.vezin@univ-lille.fr

Thesis title: Unlocking the potential of thin film photovoltaics by magnetic resonance methods

THESIS SUBJECT (about 1/2 page)

Organic semiconducting polymers and hybrid perovskite materials have emerged as attractive energy-harvesting technologies for **large-area and distributed applications**, including **building-integrated photovoltaics**, façades, the Internet of Things, and outdoor sensor networks. Their appeal stems from low weight, flexibility, solution deposition, and compatibility with scalable fabrication, alongside **steadily improving solar energy conversion efficiencies**. However, limited operational stability remains a major bottleneck to widespread deployment. Performance losses originate from complex, multiscale degradation processes involving chemical reactions, morphological evolution within the photoactive thin films, and interfacial instabilities at device architectures. In this project, we propose to use magnetic resonance spectroscopy and imaging as a powerful, non-destructive platform for probing film deposition, device assembly and operational instability. Crucially, magnetic resonance methods can be applied under controlled illumination, temperature, and environmental conditions, supporting structure solid-state NMR analysis during **in-situ film deposition**, and EPR-based **operando characterization** during stability assessment. These results fill the gaps between laboratory characterization and real-world operation. Solid-state nuclear magnetic resonance (SSNMR, at RM2I-UCCS) provides atomic-level sensitivity to molecular structure, intermolecular interactions, and local dynamics, enabling direct insight into photo- and thermal-degradation pathways in photovoltaic thin films. Complementary electron paramagnetic resonance (EPR, at LASIRE) spectroscopy uniquely detects paramagnetic species, allowing identification of photo- and thermally generated radicals, trap states, and charge accumulation that strongly influence device lifetime. Spatially resolved NMR and EPR approaches (i.e., imaging/mapping) provide further insights into morphology, heterogeneity, diffusion, and degradation gradients across films and devices, linking local structural changes to macroscopic performance. By correlating magnetic resonance observables with energy conversion metrics, this approach delivers mechanistic understanding beyond the reach of conventional optical or diffraction techniques, guiding the rational design of more stable and commercially viable photovoltaic technologies.

Planned recruitment date: 01/10/2026

Contact (email address): herve.vezin@univ-lille.fr ; gnm.reddy@univ-lille.fr

Additional Notes/Comments: Financement l'UE (~25 k€) available

