

Avis de soutenance de thèse

Spécialité : Physique de la matière condensée

Présentée par **M. Fabien LAFOND**

Pour l'obtention du grade de DOCTEUR DE L'UNIVERSITE DE LORRAINE

Hybrid functionals approach of the properties of complex materials for photovoltaic applications

Soutenance prévue le lundi le **16 décembre 2019 à 14h00**

Amphithéâtre de l'ISEA

devant la commission d'examen composée de :

M Mébarek ALOUANI, Université de Strasbourg	(rapporteur)
M Ludger WIRTZ, Université du Luxembourg	(rapporteur)
Mme Jéléna SJAKSTE, École Polytechnique	(examineur)
M Michael SPRINGBORG, Université de la Sarre	(examineur)
Mme Hong XU, Université de Lorraine	(examineur)
M Andrei POSTNIKOV, Université de Lorraine	(directeur de thèse)

Thèse est préparée au sein de l'Institut Photovoltaïque d'Ile-de France (Palaiseau),
la Laboratoire de Chimie et Physique - Approche Multi-Echelles des Milieux Complexes
(LCP-A2MC) de l'Université de Lorraine
et l'Ecole Doctorale *Chimie - Mécanique - Matériaux- Physique* (C2MP).

Le travail porte sur l'optimisation et l'utilisation des fonctionnelles hybrides dans le cadre de la théorie de la fonctionnelle de la densité pour la caractérisation des matériaux pertinents dans le domaine de photovoltaïque : (i) les systèmes mixtes $\text{Cu}(\text{In}/\text{Ga})(\text{S}/\text{Se})_2$ de type chalcopyrite, notamment dopés avec des métaux alcalins, en vue de la réalisation de cellules photovoltaïques "en tandem", et (ii) le silicium vieilli sous rayonnement visible à haute température.