N° d'ordre : D -

THESE

présentée

devant l'Institut National des Sciences Appliquées de Rennes

en vue de l'obtention du

DOCTORAT

spécialité : Photonique

par M Zeli Xu

Intitulé : Physics of Lattice Dynamics and Electron-Phonon Coupling in Lead-Halide Perovskites

Directeur de Thèse : Even Jacky, Professeur d'Université, Institut National des Sciences Appliquées de Rennes

Date, heure et lieu de soutenance : 04/11/2026 à 15heures00 - Amphi Bonnin

Membres du jury (nom, prénom, titre et établissement de rattachement, fonction)

Damien Garrot, Maître de Conférences, Université de Versailles Saint-Quentin-en-Yvelines

Samy Merabia, Directeur de Recherche, Université Claude Bernard Lyon 1, CNRS

Emmanuelle Deleporte, Professeur d'Université, Ecole Normale Supérieure Paris Saclay

Jérémie Margueritat, Chargé de Recherche, Université Claude Bernard Lyon 1, CNRS

RESUME DE LA THESE

Les pérovskites halogénées sont des candidats prometteurs pour les technologies quantiques, notamment en information et en calcul quantiques. Fondamentalement, les propriétés spectrales des nanostructures de pérovskite, en particulier leur émission de lumière quantique, dépendent du couplage entre les excitons et la dynamique complexe du réseau cristallin, caractérisée par une forte anharmonicité et un désordre structural important. Dans cette thèse, nous étudions le spectre vibrationnel et le couplage électron-phonon de la pérovskite inorganique CsPbBr3 massive à l'aide de simulations basées sur la théorie de la fonctionnelle densité et la spectroscopie vibrationnelle. Nous calculons les couplages de Fröhlich à travers les transitions de phase structurales, ainsi que les spectres de diffusion inélastique de neutrons, Raman et de réflectivité, afin d'interpréter les mesures expérimentales. Nos travaux ouvrent la voie à la modélisation et à l'élucidation des effets polaroniques complexes présents dans les matériaux et hétérostructures de pérovskite halogénée.