IRAMIS : Institut Rayonnement Matlère de Saclay

Saclay

Photo-électrolyse de l'eau assistée par une couche pérovkite ferroélectrique

Spécialité Physique de la matière condensée

Niveau d'étude Bac+5

Formation Ingenieur/Master

Unité d'accueil

Candidature avant le 01/05/2018

Durée 6 mois

Poursuite possible en thèse oui

Contact MAGNAN Helene
+33 1 69 08 94 04
helene.magnan@cea.fr

Autre lien
http://iramis.cea.fr/spec/Phocea/Vie_des_labos/Ast/ast_visu.php?id_ast=1996&id_unit=9&id_groupe=179

Résumé

Des photo-anodes dédiées à la photo-électrolyse de l'eau seront réalisées et caractérisées. Il s'agira d'hétérojonctions d'oxydes élaborées par épitaxie par jets moléculaires dont une couche sera ferroélectrique et polarisée électriquement. Les effets de la polarisation électrique sur les propriétés de photo-électrolyse seront étudiés.

Sujet détaillé

La photo-électrolyse de l'eau permet la production directe d'hydrogène en utilisant l'énergie solaire. L'hydrogène, en tant que vecteur d'énergie propre et décarbonné, est une piste crédible pour résoudre la paradoxale nécessité d'une augmentation de la production énergétique et de la réduction des gaz à effets de serre. Les photo-anodes les plus performantes sont obtenues avec des oxydes métalliques. Toutefois, à ce jour, aucun oxyde semi-conducteur simple ne réunit toutes les propriétés de photo-anode nécessaires pour permettre une production raisonnable d'hydrogène par ce procédé. Les anodes permettant une bonne absorption du spectre lumineux souffrent d'un taux de recombinaison rédhibitoire. Il faut considérer des architectures de matériaux plus complexes afin d'améliorer les propriétés des électrodes simples. Dans cette étude, nous souhaitons combiner une couche d'oxyde efficace en tant que photo-anode avec une couche d'oxyde pérovskite ferroélectrique, fournissant une polarisation électrique interne permettant d'améliorer les propriétés de transport.
Dans le cadre du stage proposé, on s'attachera, dans un premier temps, à déterminer les conditions de croissance d'hétérojonctions monocristallines de type Fe2O3 / BaTiO3 et TiO2 /BaTiO3. Les dépôts seront réalisés sur des substrats adaptés et conducteurs (Pt(001) et Pt(111)), et seront déposés par épitaxie par jets moléculaires assistée par plasma d'oxygène atomique, une technique parfaitement maitrisée au laboratoire. La structure cristalline sera déterminée in situ et en temps réel grâce à la diffraction d'électrons rapides (RHEED). La stœchiométrie des films sera déterminée par spectroscopie d'électrons Auger et par photoémission (XPS). Les propriétés de photo-électrolyse (photo-courant, rendement) seront mesurées en lumière blanche et en lumière monochromatique. L'efficacité de la

photo-anode sera analysée en fonction de la nature de l'heterojonction et de l'orientation cristalline. Nous étudierons également les effets de la polarisation électrique (amplitude, orientation) de la couche ferrolectrique sur les propriétés de photo-électrolyse.
Le (la) candidat(e) abordera les techniques d'ultra-vide associées à la croissance par épitaxie par jets moléculaires (dépôt de couches minces, caractérisations in situ) ainsi que la caractérisation électrochimique de photo-anodes. Le caractère multi-disciplinaire du sujet sera très enrichissant pour le (la) candidat(e). Les couches élaborées durant ce stage s'inscrivent dans le cadre de recherches à long terme dans le groupe et d'un projet ANR (photo-pot) qui vient d'être accepté. Ce sujet pourra être prolongé par une thèse.

Mots clés

Couches minces, épitaxie, caractérisation, photo-anode, photo-électrolyse, cellule solaire

Compétences

MBE, spectroscopies, photolectrolyse

Logiciels

Water photolectrolysis assisted by a perovskite ferroelectric layer

Summary

Thin epitaxial films dedicated to water photolectrolysis will be prepared by atomic oxygen plasma assisted molecular beam epitaxy and characterized. We will study oxide heterojunction containing a polarized ferroelectric layer. We will study the influence of electrical polarization on the photoanode efficiency.

Full description

Thin epitaxial films dedicated to water photolectrolysis will be prepared by atomic oxygen plasma assisted molecular beam epitaxy and characterized. We will study oxide heterojunction containing a polarized ferroelectric layer. We will study the influence of electrical polarization (intensity and orientation) on the photoanode efficiency.
Solar energy has the potential to satisfy the increasing global energy demand. Semiconductors hold great promise for high-efficiency solar water splitting (water photo electrolysis). Indeed, they may be used for solar energy harvesting and/or chemical energy storage. Since the first demonstration using TiO_2 as a photoanode, a large number of metal oxides were studied for this application. However, all these simple oxides present some limiting factors (such as electron - hole recombination and position of the conduction band edge below the H^+/H_2 redox potential) which can explain a relatively low efficiency. Recently, we have shown in our group that the efficiency of solar water splitting can be strongly improved by using a ferroelectric layer ($BaTiO_3$) as photoanode [1].
In the present internship, we propose to prepare and study oxide heterojunctions (Fe_2O_3 / $BaTiO_3$ and TiO_2 /$BaTiO_3$) grown by Atomic Oxygen plasma assisted Molecular Beam Epitaxy. The introduction of the perovskite ferroelectric layer is expected to improve the photoanode efficiency of Fe_2O_3 or TiO_2 thanks to a better charge transport. For all samples, we will determine the crystallographic structure by in situ RHEED and the electronic structure by in situ XPS. The photoanode efficiency as a function of the nature of heterojunction and of its crystallographic orientation. Moreover the influence of ferroelectric polarization vector (direction and strength) will be also measured.

[1] M. Rioult, S. Datta, D. Stanescu, S. Stanescu, R. Belkhou, F. Maccherozzi, H. Magnan, A. Barbier, Appl. Phys. Lett 107, 103901 (2015)

Keywords

epitaxy, thin films, photoelectrolysis, solar fuel cell

Skills

MBE, Spectroscopy, photoelectrolysis

Softwares