
Efficacité des Semiconducteurs Utilisés en Photovoltaïque et en Photocatalyse : Une Analyse Fondée sur la DFT.

Tangui Le Bahers^{*1}, Michel Rérat², Philippe Barboux³, Thierry Le Mercier⁴, and Philippe Sautet⁵

¹Université Claude Bernard Lyon 1 (Laboratoire de Chimie de l'ENS Lyon) – Université Claude Bernard - Lyon I – ENS Lyon, 46 allée d'Italie 69342 Lyon Cedex 07, France

²Institut Pluridisciplinaire de Recherche sur l'Environnement et les Matériaux (IPREM) – CNRS : UMR5254, Université de Pau et des Pays de l'Adour [UPPA] – Hélioparc Pau Pyrénées 2 av. P. Angot 64053 PAU CEDEX 9, France

³Institut de Recherche de Chimie Paris (IRCP UMR 8247) – Chimie-Paristech – Chimie-Paristech, 11 rue Pierre et Marie Curie, F-75231 Paris, France

⁴Solvay, RIC-Paris – Solvay (France) – 52 rue Haie Coq, F-93308, Aubervilliers, France

⁵Laboratoire de Chimie (LC) – CNRS : UMR5182, École Normale Supérieure (ENS) - Lyon – Ens de Lyon, Site Jacques Monod - 46 allée d'Italie - 69364 Lyon cedex 07, France

Résumé

Les systèmes convertissant l'énergie de la lumière, provenant généralement du soleil, en d'autres formes d'énergie telles que l'électricité (photovoltaïque, PV) ou en composés chimiques (photocatalyse, dissociation de l'eau, photoréduction du CO₂...) représentent une réelle opportunité de produire de l'électricité, des produits chimiques, de l'hydrogène... à un faible coût environnemental et économique.

Généralement, ces systèmes impliquent un semiconducteur (SC) pour l'absorption de la lumière, pour la conduction des charges photogénérées ou pour les deux. Bien que les principes de fonctionnement puissent être complexes et très différents d'une technologie à l'autre, plusieurs étapes de fonctionnement fondamentales sont communes à tous ces systèmes telles que l'absorption de la lumière ou la dissociation de l'exciton. Ces étapes sont gouvernées par des propriétés (bandgap, énergie de dissociation de l'exciton, constante diélectrique...) du SC. Des calculs fondés sur la DFT peuvent aider les scientifiques à la conception rationnelle de nouveaux semiconducteurs pour des applications en PV et en photocatalyse en calculant en amont ces propriétés.

Dans la présentation, une introduction pédagogique du principe de fonctionnement de ces systèmes photocatalytiques sera faite où le rôle et l'importance de chaque propriété du SC seront mis en avant. La fiabilité de la DFT pour le calcul de ces propriétés (telles que la contribution vibrationnel à la constante diélectrique ou l'énergie de liaison de l'exciton avec le modèle de Wannier) sera l'objet de la section suivante. Cette étude est réalisée en calculant avec différentes fonctionnelles ces propriétés pour des semiconducteurs bien connus

*Intervenant

dans le domaine du PV et de la photocatalyse. Les codes CRYSTAL09 et VASP (5.2) sont utilisés pour ces calculs. Enfin, le protocole ressorti de l'étude précédente sera utilisé pour déterminer les propriétés d'un nouveau semiconducteur développé et synthétisé pour des applications en PV.

Mots-Clés: DFT, Photovoltaïque, Semiconducteur, Bandgap, Exciton