

## Exemples d'application de la DFT au photovoltaïque.

Laurent Pedesseau<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Univ Rennes, INSA Rennes, CNRS, Institut FOTON - UMR 6082, F-35000 Rennes, France

Il y a plus de 180 ans E. Becquerel découvrait la première cellule photovoltaïque<sup>1,2</sup> à base de AgCl et AgBr. Ce n'est que 30 ans plus tard que W. Adams et R. Days observent le même phénomène dans le matériau de Selenium<sup>3</sup>. L'explication de l'effet photoélectrique<sup>4</sup> a été établie par A. Einstein en 1905. Cela fait d'ailleurs 100 ans que A. Einstein a été récompensé du prix Nobel en Physique: "for his services to Theoretical Physics, and especially for his discovery of the law of the photoelectric effect." De la première cellule à base de Si du laboratoire BELL Labs (1954, efficacité<sup>5</sup> 6%) au record actuel<sup>6</sup> avec une efficacité de plus de 26%, il y a plus de 60 ans de travaux de recherche. Plus généralement, la course actuelle pour trouver des absorbeurs plus efficaces et moins coûteux s'accélère grandement depuis 10-15 ans. Ainsi, des matériaux absorbeurs émergents sont apparus dans les laboratoires de recherche tel que les cellules à pigment (cellule de Grätzel), de pérovskite halogéné, CZTSSe, mais encore les cellules tout organiques.

La compréhension des propriétés mécaniques, électroniques, et optiques de ces matériaux émergents est primordiale. L'absorption de la lumière par le matériau bulk n'est qu'une étape indispensable au bon fonctionnement de la cellule photovoltaïque. En effet, il est aussi essentiel que les porteurs puissent être extraits le plus efficacement possible. Ainsi, il est judicieux de séparer en 3 niveaux d'études bien spécifiques i) le matériau bulk, ii) l'étude des surfaces, et iii) pour finir l'étude des interfaces. Ici, des exemples d'études pour le photovoltaïque sont illustrés avec l'aide de la théorie de la fonction de la densité.

### Références :

- [1] Becquerel, E. Mémoire Sur Les Effets Électriques Produits Sous l'influence Des Rayons Solaires. *Comptes Rendus Séances Hebd.* **1839**, 9, 561–567.
- [2] Becquerel, E. Recherches Sur Les Effets de La Radiation Chimique de La Lumière Solaire Au Moyen Des Courants Électriques. *Comptes Rendus L'Académie Sci.* **1839**, 9, 145–149.
- [3] Adams, W. G.; Day, R. E. V. The Action of Light on Selenium. *Proc. R. Soc. Lond.* **1877**, 25 (171–178), 113–117.
- [4] Einstein, A. Über Einen Die Erzeugung Und Verwandlung Des Lichtes Betreffenden Heuristischen Gesichtspunkt. *Ann. Phys.* **1905**, 322 (6), 132–148.
- [5] Chapin, D. M.; Fuller, C. S.; Pearson, G. L. A New Silicon P-n Junction Photocell for Converting Solar Radiation into Electrical Power. *J. Appl. Phys.* **1954**, 25 (5), 676–677.
- [6] Yoshikawa, K.; Kawasaki, H.; Yoshida, W.; Irie, T.; Konishi, K.; Nakano, K.; Uto, T.; Adachi, D.; Kanematsu, M.; Uzu, H.; et al. Silicon Heterojunction Solar Cell with Interdigitated Back Contacts for a Photoconversion Efficiency over 26%. *Nat. Energy* **2017**, 2 (5), 17032.