Interaction électron-trou et rendement photovoltaique dans le modèle à deux niveaux

T. Nemati Aram[1,2] P. Anghel Vasilescu[1], M. Ernzerhof [3] , D. Mayou[1]

1) *Institut Néel CNRS and UGA Grenoble, France*

2) *Research Institute for Applied Physics and Astronomy, University of Tabriz, Iran*

3) *Chemistry Department, University of Montréal, Montréal Canada*

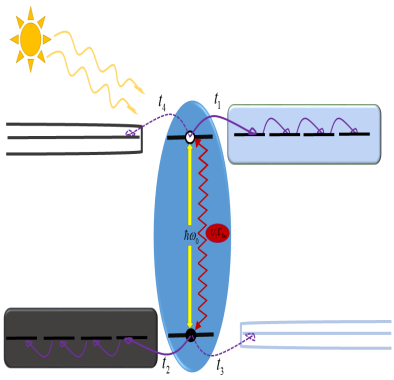

Figure 1 : Modèle à deux niveaux

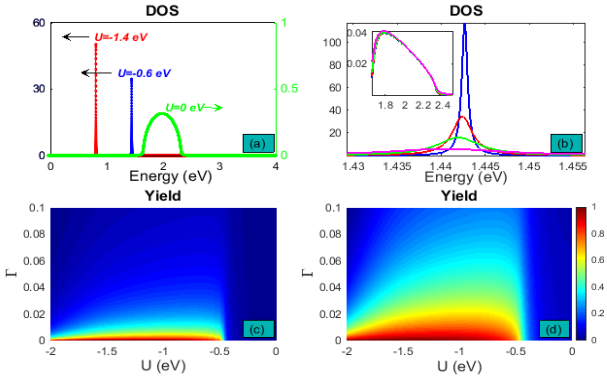

Figure 2 : Densité spectrale et rendement (2 canaux de trous)

L'interaction électron-trou peut affecter le rendement des cellules photovoltaïques notamment lorsqu'elles sont basées sur l'absorption de la lumière par des zones confinées telles que les nanostructures ou des molécules. Dès lors une question centrale est de comprendre dans quelle mesure cette interaction peut modifier le rendement photovoltaïque d'une cellule. Du point de vue théorique cette question est difficile à étudier et nécessite d'aller au delà des approches semi-classiques. Nous avons développé un formalisme entièrement quantique hors équilibre [1] et nous l'avons appliqué à une étude détaillée d'un système à deux niveaux qui absorbe les photons et évacue les électrons et les trous dans des fils (Figure 1). Nous prenons en compte l'interaction entre l'électron et le trou sur la molécule et aussi en dehors de la molécule. Nous considérons aussi une recombinaison possible de l'électron et du trou lorsqu'ils sont tout les deux sur la molécule. Nous étudions dans ces limites le rendement de la cellule pour un rayonnement incident à large spectre de fréquences.

Dans le cas ou la molécule est couplée à un seul canal pour les électrons et un seul pour les trous nous trouvons que la création d'un état localisé excitonique diminue rapidement le rendement de la cellule. Toutefois l'interaction électron-trou locale (sur la molécule) et l'interaction à longue distance ont des effets très différents quantitativement. Contrairement à ce qui est généralement supposé un état excitonique peut aussi améliorer rendement de la cellule. Par exemple dans le cas ou les trous peuvent être évacués par deux canaux nous montrons des situations simples dans lesquelles un état excitonique contribue à augmenter considérablement le rendement de la cellule photovoltaïque (Figure 2) Cette situation pourrait se réaliser par exemple dans des cellules de Grätzel ou les trous peuvent être évacués soit dans l'électrolyte soit dans les états de défauts du TiO2. Dans le cas ou les électrons et les trous ont chacun deux canaux de sortie nous étudions la limite de bande large et généralisons le résultat de Galperin et Nitzan [2] en prenant en compte interaction électron-trou et recombinaison.

Références

[1] T. Nemati Aram, P. Anghel Vasilescu, M. Ernzerhof and D. Mayou submitted to Nat. Phys.

[2] M.Galperin and A.Nitzan Phys. Rev. Lett. 95, 206802 (2005)