

Séminaire de Chimie Théorique

Salle conférence, 3eme Est, bat. A12

Lundi 24 Avril à 14 :30

Dr. Laurent Ducasse

Groupe Chimie Théorique, ISM

CNRS/ Université Bordeaux

Email : l.ducasse@ism.u-bordeaux1.fr

Etude théorique de la mobilité de trou dans les cellules solaires hybrides tout-solide

Les cellules solaires hybrides dites de Grätzel sont une alternative aux cellules au Silicium. Par ailleurs, leur performance est supérieure à celle des cellules tout-organique. Une sous-famille de cellules hybrides est constitué par les cellules « tout-solide » dans lesquelles le couple électrochimique liquide à base d'iode ou de cobalt, présent dans la cellule est remplacé par un système de transport de trou, constitué de verres moléculaires organiques.

Récemment, de nouveaux verres moléculaires ont été synthétisés et les cellules construites à partir de ces verres montrent des efficacités contrastées pour des systèmes qui ont des propriétés moléculaires très voisines. Par contre, leurs mobilités de trou mesurées sont très différentes.

Dans ce séminaire, je montrerai par des calculs quantiques (DFT et semi-empirique) et de dynamique moléculaire qu'il est possible d'évaluer les taux de transfert intermoléculaires suivant le formalisme de Marcus et de déterminer quels sont les paramètres microscopiques pertinents qui expliquent cette différence de mobilité.

Contact : pascal.larregaray@u-bordeaux.fr