

Modélisation d'une hétérojonction de van der Waals de dichalcogénures de métaux de transition pour le craquage solaire de l'eau

Paul Dalla Valle¹, Nicolas Cavassilas¹

¹ Aix Marseille Université, CNRS, Université de Toulon, IM2NP UMR 7334, 13397, Marseille, France
paul.dalla-valle@im2np.fr

Nous proposons un système monolithique et sans contact (fig. 1a) pour réaliser le craquage solaire de l'eau afin de produire de l'hydrogène en utilisant directement l'énergie électrique générée par effet photovoltaïque. La partie active du système est basée sur une hétérojonction de van der Waals *Z-scheme* (cellule tandem) composée de monocouches de dichalcogénures de métaux de transitions (TMD). Cette structure assure la différence de potentiel nécessaire à l'électrolyse ($V_{oc} > 2V$) tout en maximisant l'absorption de l'énergie solaire¹ avec des gaps de l'ordre de 1,6 eV. MoS_2 et WSe_2 sont *a priori* choisis pour respectivement l'anode et la cathode du fait de leurs propriétés électrochimiques²⁻⁵ et optiques^{6,7}. Deux régions distinctes composent cette partie active. La première (fig. 1b) est une hétérojonction $MoS_2/hBN/WSe_2$. Le nitrure de bore hexagonal (hBN) permet d'isoler les deux TMD⁸. Les électrons (trous) photogénérés dans WSe_2 (MoS_2) sont consommés par la demi-réaction d'évolution de l'hydrogène (oxygène). Dans la deuxième région (fig. 1c), le hBN est retiré pour que les porteurs non-utilisés (*i.e.* les trous de WSe_2 et les électrons de MoS_2) puissent se recombiner. Des membranes mésoporeuses d'oxydes métalliques transparents soutiennent l'hétérojonction et permettent à l'eau d'atteindre la partie active. Enfin, des cristaux photoniques doivent augmenter l'absorption de la lumière dans les monocouches de TMD. Nous avons conçu un modèle multi-physique pour comprendre le fonctionnement de ce dispositif et prédire son rendement. Ce modèle est paramétré par des résultats *ab initio* des propriétés physiques des TMD. Les premiers résultats montrent un rendement photoélectrochimique supérieur à 10% dans des conditions réalistes de fonctionnement, ce qui, pour un dispositif bas coût ne nécessitant pas d'épitaxie, est remarquable.

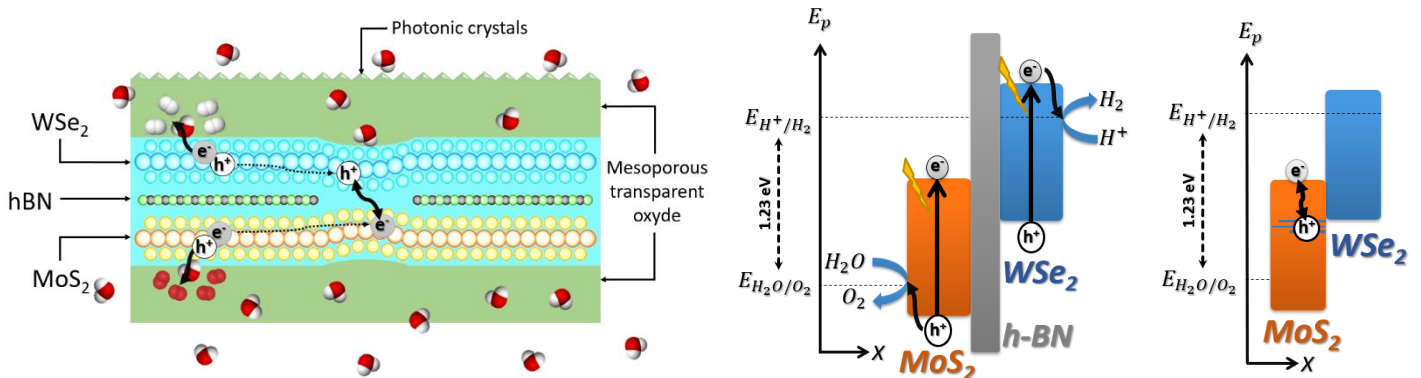


Figure 1 : (a) Schéma explicatif du fonctionnement du système de craquage solaire de l'eau proposé. (b) Représentation de la structure de bandes dans la région active de craquage de l'eau (avec hBN). (c) Représentation de la structure de bandes dans la région de recombinaison (sans hBN). La recombinaison est possible grâce à l'hybridation des états électroniques des TMD.

1. Xu, Q. *et al.* Direct Z-scheme photocatalysts: Principles, synthesis, and applications. *Mater. Today* **21**, 1042–1063 (2018).
2. Wu, J. *et al.* Exfoliated 2D Transition Metal Disulfides for Enhanced Electrocatalysis of Oxygen Evolution Reaction in Acidic Medium. *Adv. Mater. Interfaces* **3**, 1500669 (2016).
3. Si, K. *et al.* A two-dimensional MoS_2/WSe_2 van der Waals heterostructure for enhanced photoelectric performance. *Appl. Surf. Sci.* **507**, 145082 (2020).
4. Kadam, S. R., Enyashin, A. N., Houben, L., Bar-Ziv, R. & Bar-Sadan, M. Ni- WSe_2 nanostructures as efficient catalysts for electrochemical hydrogen evolution reaction (HER) in acidic and alkaline media. *J. Mater. Chem. A* **8**, 1403–1416 (2020).
5. Sun, Y., Zhang, X., Mao, B. & Cao, M. Controllable selenium vacancy engineering in basal planes of mechanically exfoliated WSe_2 monolayer nanosheets for efficient electrocatalytic hydrogen evolution. *Chem. Commun.* **52**, 14266–14269 (2016).
6. Bernardi, M., Palummo, M. & Grossman, J. C. Extraordinary Sunlight Absorption and One Nanometer Thick Photovoltaics Using Two-Dimensional Monolayer Materials. *Nano Lett.* **13**, 3664–3670 (2013).
7. Jiang, X. *et al.* Approaching perfect absorption of monolayer molybdenum disulfide at visible wavelengths using critical coupling. *Nanotechnology* **29**, 335205 (2018).
8. Wickramaratne, D., Weston, L. & Van de Walle, C. G. Monolayer to Bulk Properties of Hexagonal Boron Nitride. *J. Phys. Chem. C* **122**, 25524–25529 (2018).