

Titre: Simulations numériques quantiques pour l'électronique et le photovoltaïque organique
Xavier Blase, CNRS et UJF, Institut Néel, Grenoble.

Résumé: Le photovoltaïque "tout silicium" est déjà une réalité industrielle. Pourtant, le développement d'approches alternatives plus flexibles et à bas coût reste un sujet d'étude actif aussi bien dans les labos R&D qu'au niveau fondamental. L'électronique et le photovoltaïque organique et/ou hybride offre par sa diversité et flexibilité des perspectives importantes bien qu'aujourd'hui les rendements restent trop faibles pour être commercialement viable. De fait, les mécanismes fondamentaux contrôlant le rendement de la conversion photon-courant sont très mal compris. Nous présenterons les difficultés et efforts de la communauté "simulations quantiques ab initio" pour modéliser ces systèmes complexes et comprendre leurs propriétés photoélectriques.