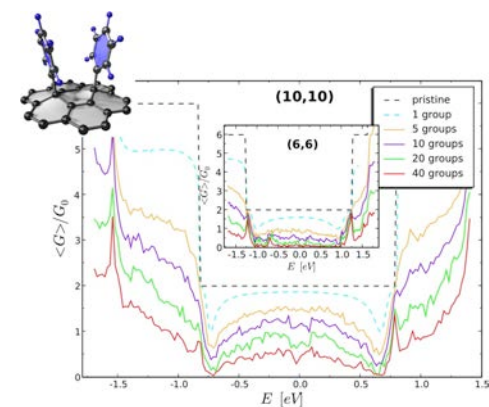
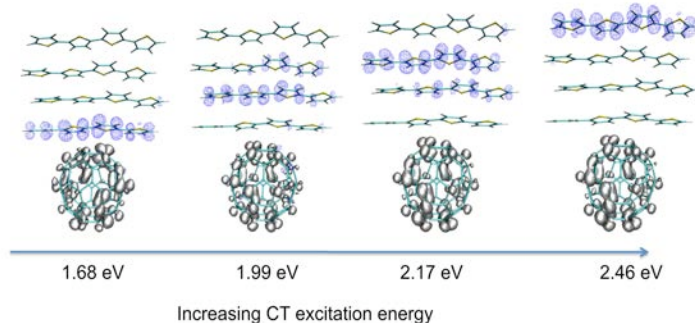




# Simulations quantiques *ab initio* pour l'électronique, l'optoélectronique et le photovoltaïque moléculaire

Xavier Blase, Institut Néel, Grenoble



# L'Institut Néel sur le polygone scientifique grenoblois

**Le polygone scientifique:** une concentration importante de laboratoires et grands instruments européens:

- European Synchrotron Research Facility (ESRF)
- Laboratoire National des Champs Intenses (LNCMI)
- Institut Leau-Langevin (réacteur neutrons)
- Commissariat Energies Atomiques et Alternatives
- Ecole Polytechnique de Grenoble
- Université Grenoble-Alpes
- **et .... le CNRS**



**L'Institut Néel** est le laboratoire « propre » du CNRS à Grenoble:

- créé en 2007 du rassemblement de plusieurs laboratoires
- 450 personnes dont **125 chercheurs et 50 enseignants-chercheurs, 130 ingénieurs**, techniciens, administratifs, 145 non permanents
- 400 publications/année, 30 soutenance de thèse, etc.
- 3 départements, 17 équipes de recherche, 17 services et pôles



- Département Nanosciences
- Département Basses températures
- Département Matériaux Multifonctions



## 5 « découvertes » principales

Domaine d'expertise: simulations quantiques *ab initio*, du développement de codes à la prédiction et compréhension des propriétés des matériaux.

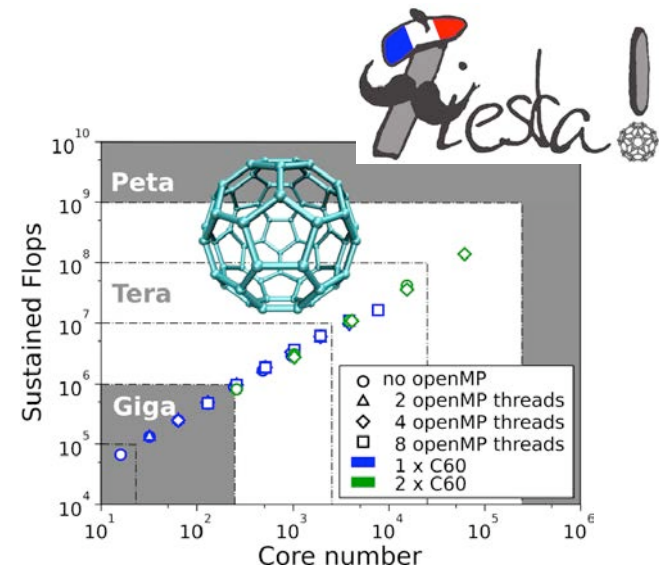
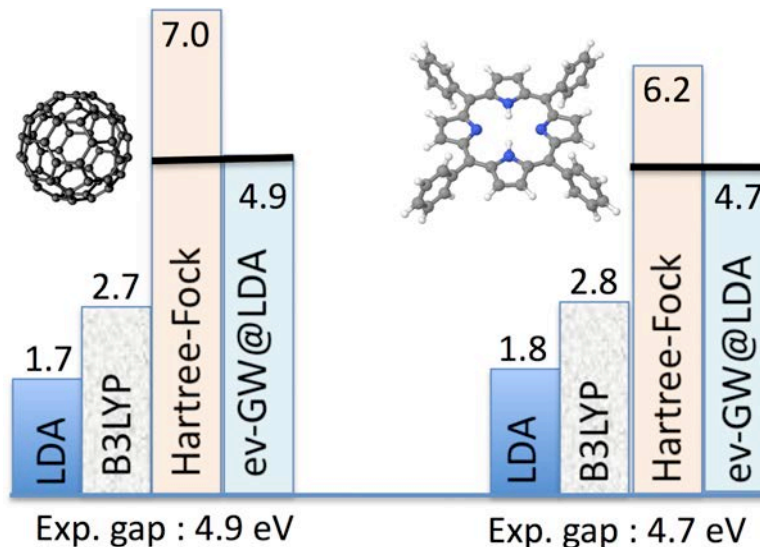


- Première théorie *ab initio* des nanotubes de carbone (1993) et prédiction avant synthèse de la stabilité des nanotubes de nitrure de bore (1994)
- Prédiction avant synthèse de la transition supraconductrice dans les semiconducteurs  $sp^3$  colonne IV dopés (théorie 2003)
- Premier calculs « *ab initio* mésoscopiques » de la conductance de nanotubes et graphène dopés ou fonctionnalisés (Blase/Roche, 2006-2010)
- Développement d'un code *ab initio* « à N-corps » pour le photovoltaïque (Fiesta code).



# Perspectives principales

- Le développement de nouveaux outils numériques précis (« au delà de la DFT ») et performants (massivement parallèles) ouvrent de nouvelles perspectives en **électronique et optoélectronique organique et hybride**: exploration « in silico » de nouveaux systèmes.



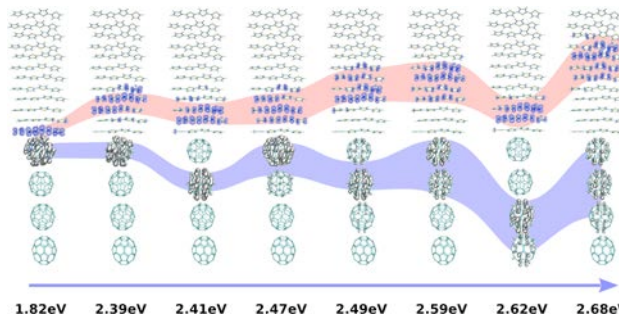
(European PRACE project 2013)

# Echantillonnage « in silico » de nouvelles molécules

The Harvard Clean Energy Project: Large-Scale Computational Screening and Design of Organic Photovoltaics on the World Community Grid

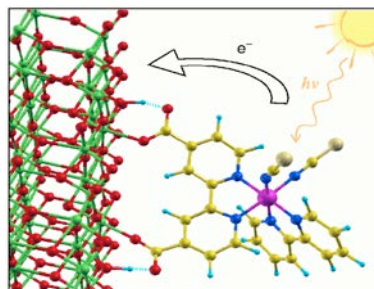


## Comprendre le rendement photovoltaïque

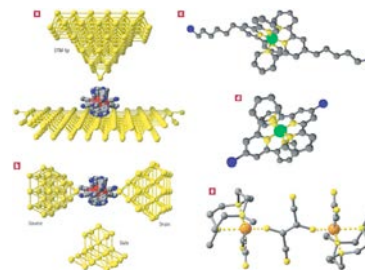


Dissociation électron-trou à une interface donneur/accepteur organique (collab. U Mons et CEA/INAC)

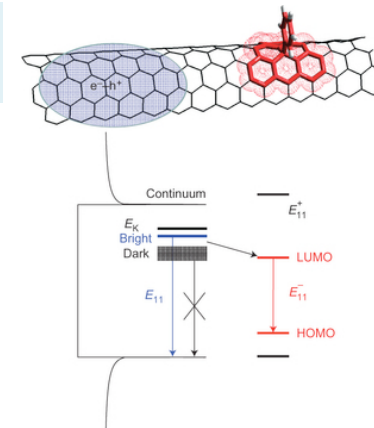
## Explorer de « nouvelles » architectures



Grätzel cells



Molecular (spin)tronique



Functionalized tubes

## Plateaux scientifiques dont on doit se doter pour réussir



- Collaborations théorie/expérience
- Doctorants et postdoctorants
- Moyens informatiques



## Partenariats incontournables

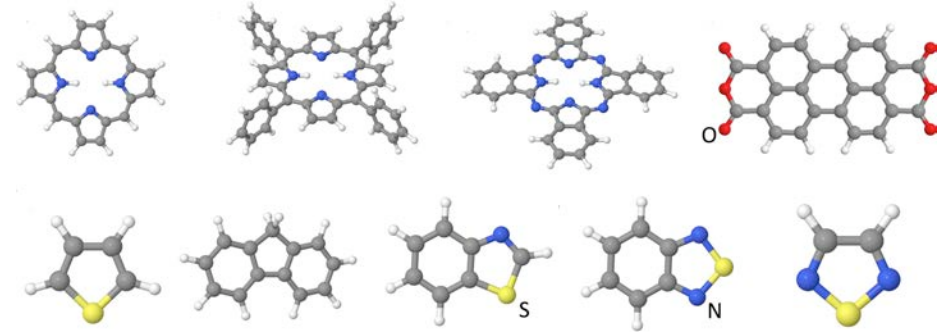
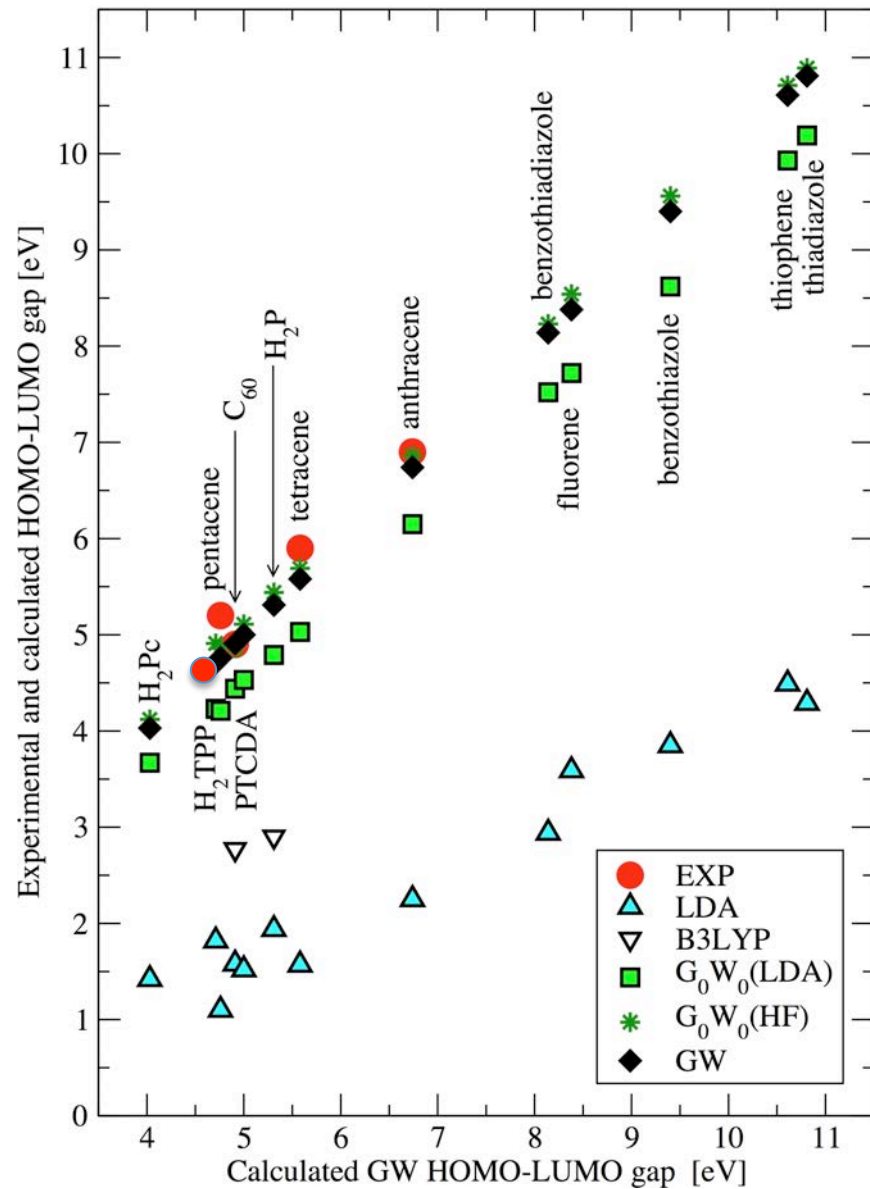


Professeur Michel Côté, Département de Physique, UdeM  
=> Approches théoriques complémentaires  
=> collaborateur Profs. Carlos Silva et Mario Leclerc



Professeur Richard Martel, Chaire en nanosciences, UdeM  
=> (Opto) électronique nanotubes, etc.

# Document supplémentaire: HOMO-LUMO gap of porphyrins, fullerenes, phtalocyanines, and other molecules of interest for photovoltaic applications



	Pentacene	C60	H <sub>2</sub> TPP
DFT-LDA	▲ 1.10	1.58	1.82
G <sub>0</sub> W <sub>0</sub>	■ 4.21 (4.34*)	4.40 (4.40*)	4.21
GW	◆ 4.96	4.91	4.71
Exp.	● 5.20	4.95	4.7

(\*Pham, Rocca, Galli, PRB 2013)

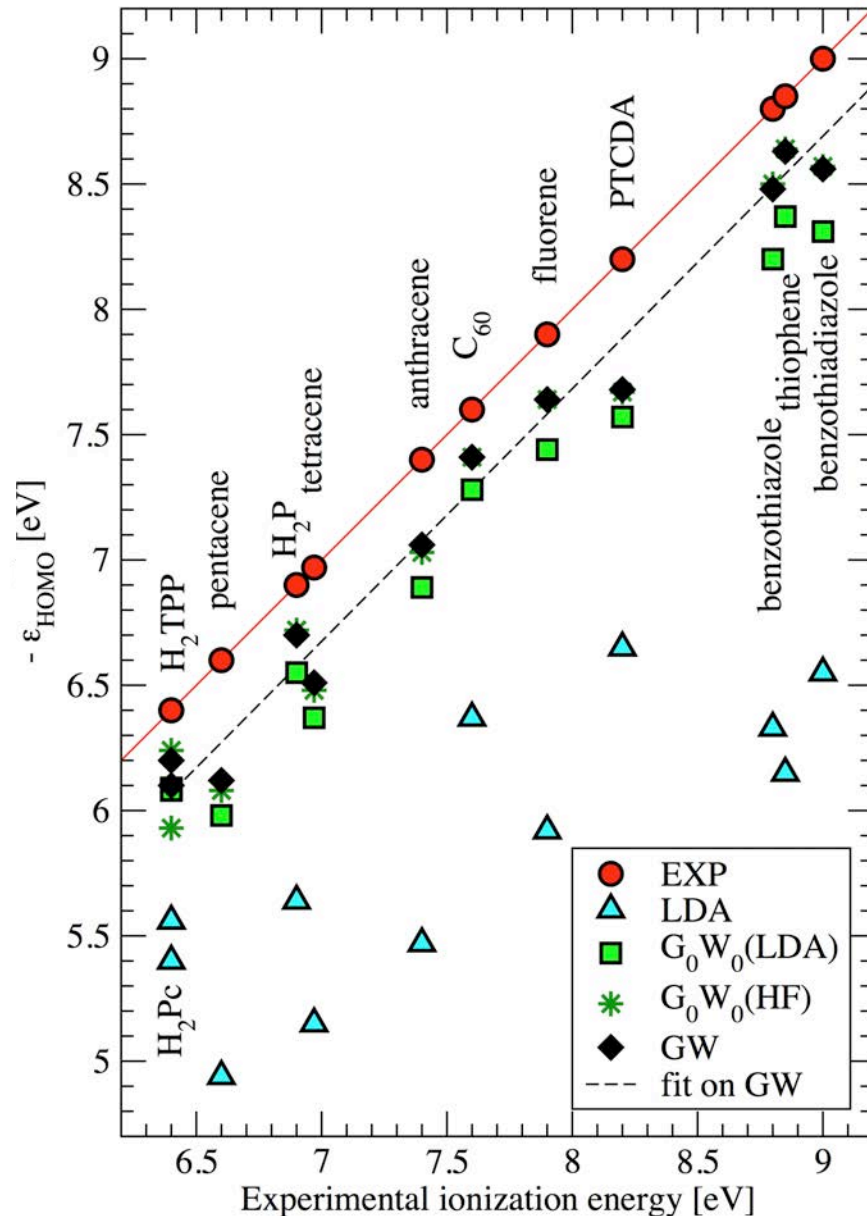
Typical timings for C<sub>60</sub>:

- 1 day on simple PC
- less than 10 secs on ... 10000 cores

(Blase, Attacalite, Olevano, 2011)



**Document supplémentaire:** Ionization energy of porphyrins, fullerenes, phtalocyanines, and other molecules of interest for photovoltaic applications



Mean average error (eV)

DFT-LDA-KS	1.85 eV (25%)
$G_0W_0(\text{LDA})$	0.47 eV (6%)
$G_0W_0(\llcorner \text{HF} \lrcorner)$	0.31 eV (4%)
ev-GW@LDA	0.30 eV (3.8%)

ev-GW Self-consistency on eigenvalues only

$G_0W_0(\llcorner \text{HF} \lrcorner)$ : a diagonal Hartree-Fock

$$\epsilon_n^{\text{HF}} = \epsilon_n^{\text{LDA}} + \langle \phi_n^{\text{LDA}} | \Sigma_x - V_{xc}^{\text{LDA}} | \phi_n^{\text{LDA}} \rangle,$$

P. H. Hahn, W. G. Schmidt, and F. Bechstedt,  
Phys. Rev. B **72**, 245425 (2005).

Overscreening when building W from LDA:  
K. Kaasbjerg and K. S. Thygesen, *PRB.* **81**, 085102 (2010).

(Blase, Attaccalite, Olevano, 2011)