

---

# Propriétés opto-électroniques des interfaces organique/inorganique: vers un design rationnel de dispositifs

Sébastien Nénon\*<sup>1</sup>

<sup>1</sup>École normale supérieure de Lyon (ENS LYON) – École Normale Supérieure (ENS) - Lyon – Site Monod, 46 allée d'Italie, 69364 LYON Cedex 07, France

## Résumé

Les interfaces organique/inorganique sont présentes dans une très large gamme de dispositifs, allant de la cellule solaire à la nanoparticule greffée pour l'imagerie médicale, en passant par les transistors ou les capteurs. Cette interface est généralement constituée d'une molécule (ou film moléculaire) déposée ou greffée sur une surface inorganique, qui peut être un simple support ou un matériau actif. Quels que soient les matériaux mis en contact au niveau de l'interface, ils altèrent leurs propriétés respectives en fonction du type d'interaction entre eux, modifiant ainsi les performances attendues lors de l'étude des constituants isolés. Cette modification des propriétés peut être bénéfique ou non, mais doit dans tous les cas être prise en compte a priori lors de la conception d'un dispositif pour l'électronique organique. A l'heure actuelle, de nombreuses méthodes de chimie théorique permettent de traiter de grands systèmes riches en électrons. Parmi ces méthodes, la "Self Consistent Charge Density Functional Tight Binding" (SCC-DFTB) représente un bon compromis entre le temps de calcul des méthodes semi-empiriques, et la qualité de la DFT. Cette méthode permet donc de traiter des systèmes de plusieurs nanomètres sous conditions périodiques, offrant ainsi la possibilité d'étudier des surfaces de grande dimension.

Après une brève introduction sur la méthode DFTB, nous verrons l'impact des interfaces sur les propriétés de matériaux à travers quelques exemples dans le domaine de l'optique non linéaire ou du photovoltaïque, ainsi que l'utilité d'outils comme la DFTB lors du design rationnel d'un dispositif.

**Mots-Clés:** DFTB, électronique organique, photovoltaïque, optique non linéaire, grands systèmes

---

\*Intervenant