

Modélisation quantique de la dissociation de la paire électron-trou à l'interface accepteur-donneur d'une cellule solaire organique

Nicolas Cavassilas¹, Fabienne Michelini¹, Marc Bescond^{1,2}

¹IM2NP, CNRS, Aix Marseille Université, France

²LIMMS, CNRS, Université de Tokyo, Japon

Les cellules solaires organiques offrent des efficacités quantiques très élevées alors même que l'énergie de liaison de l'exciton y est très élevée [1]. De nombreuses études ont tenté depuis longtemps d'apporter des explications à cette efficacité surprenante, mais il n'existe pas de réponse claire à cette question. Par exemple, aucun modèle n'est pour l'instant en mesure de reproduire cette efficacité quantique. Mais il est important de noter qu'aucun des modèles développés pour ces études ne reposent sur un formalisme quantique. Pour cette étude, en reprenant le schéma classique utilisé pour modéliser la dissociation de la paire électron-trou à une interface donneur-accepteur (Fig. 1a) [2]), nous avons développé un modèle basé sur le transport électronique quantique, hors-équilibre (Fig. 1b)). Nos résultats montrent qu'en considérant ces aspects tels que le confinement, la délocalisation, les interactions électron-phonon, il est possible de trouver théoriquement des efficacités aussi élevées que celles obtenues expérimentalement. Nous montrons qu'il existe un régime que nous nommons « d'interaction forte », dans lequel l'élargissement des états quantiques dû à l'interaction électron-phonon est suffisant pour permettre une délocalisation des porteurs qui favorise largement la dissociation de la paire électron-trou. Ces résultats sont en accord avec des observations expérimentales [3] auxquelles il manquait une explication précise. Ce travail, en plus d'apporter des éléments de compréhension de la dissociation, montre que l'utilisation de modèles de transport quantique permettra de contribuer au futur développement des cellules organiques.

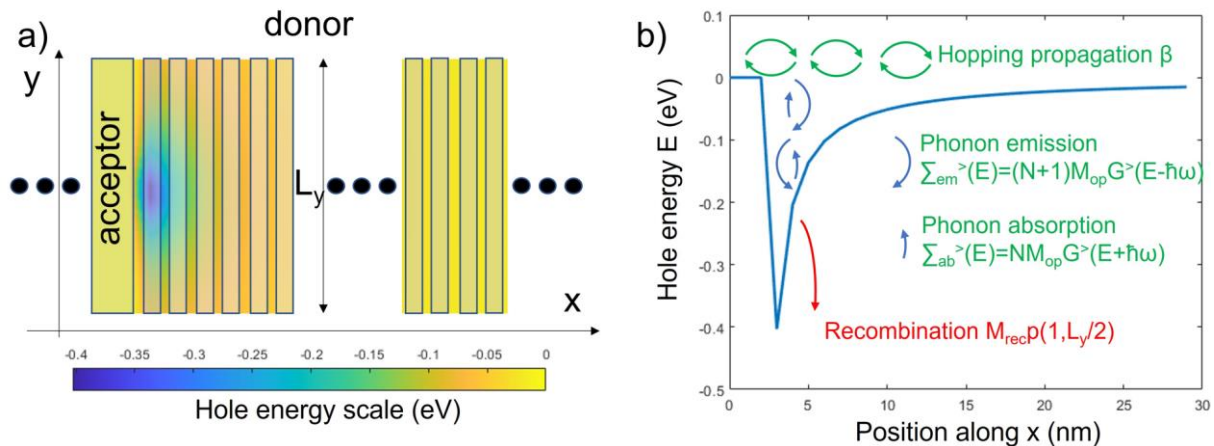


Fig. 1. a) Représentation schématique du système modélisé et cartographie de l'énergie potentielle. Nous modélisons une cellule dont le donneur est constitué de chaînes de polymères alignées le long de l'interface accepteur/donneur, qui sont schématiquement représentées par les rectangles verticaux. L'énergie potentielle est l'énergie coulombienne due à l'électron considéré à l'interface. Nous calculons la probabilité qu'un trou, issu d'un exciton généré dans l'accepteur, de s'échapper de ce potentiel attractif avant recombinaison avec l'électron. b) Énergie potentielle des trous au milieu des chaînes en fonction de la position x et représentation schématique des processus considérés dans le modèle. β est le *hopping* permettant au trou de se déplacer d'une chaîne à l'autre. Les $\sum^>$ représentent les *self-energies* des interactions électron-phonon, tandis que les $G^>$ représentent les fonctions de Green des trous. N est le nombre de phonons et M_{op} le paramètre de couplage électron-phonon. Le courant de recombinaison est considéré comme proportionnel à la densité de trous au milieu de la première chaîne, avec M_{rec} le paramètre de proportionnalité.

[1] Advanced Materials 36, 2302005 (2024)

[2] Physical Review Letters 103, 036402 (2009)

[3] Science 335, 1340–1344 (2012).