

Simulation numérique de nouveaux oxychalcogénures thermoélectriques

E. Amzallag¹, C. Barreteau², D. Berardan¹

1 Institut de Chimie Moléculaire et des Matériaux d'Orsay, Synthèse, Propriétés & Modélisation des Matériaux, Univ. Paris-Sud, CNRS UMR8182, Orsay, France

2 Department of Quantum Matter Physics, University of Geneva, 24 Quai Ernest-Ansermet, 1211 Geneva 4, Switzerland

L'étude de nouvelles familles de matériaux pour la thermoélectricité est une des voies explorées au cours de ces dernières années. Les nombreuses possibilités offertes par les composés en couches contenant un élément chalcogène ouvrent d'importantes perspectives. Non seulement ces matériaux furent les premiers à présenter des performances proches des composés habituellement utilisés, mais l'absence d'éléments chimiques nocifs en font d'excellents candidats pour des applications.

En 2010¹, notre équipe au sein de l'Institut de Chimie Moléculaire et des Matériaux d'Orsay (Univ. Paris Sud) a mis en évidence les propriétés thermoélectriques très prometteuses d'un composé de cette famille, BiCuSeO. Après optimisation (dopage, optimisation microstructurale), ce composé présente un facteur thermoélectrique parmi les plus élevés jamais rapportés pour un matériau massif polycristallin de type p dans la gamme 400-650°C, principalement du fait d'une contribution du réseau à la conductivité thermique intrinsèquement très faible.

Afin d'améliorer les performances de ces matériaux, il est nécessaire de comprendre plus finement leur structure électronique et l'influence des substitutions et de la structure cristalline sur cette structure électronique. Nous montrerons le rapport des calculs de structure électronique² par des méthodes ab initio pour aller plus loin dans la compréhension des propriétés physiques de ces matériaux et l'amélioration de leurs performances.

1. Zhao L. D., Berardan D., Pei Y. L., Byl C.; Pinsard-Gaudart L.; Dragoe N., Applied Physics Letters, 97, 092118, 2010.
2. Barreteau C., Pan L., Amzallag E., Zhao L-D., Berardan D., Dragoe N., Semicond. Sci. Technol., 29, 064001, 2014.