

## DRF : Sujet de thèse SL-DRF-19-0533

### DOMAINE DE RECHERCHE

---

Physique du solide, surfaces et interfaces / Physique de l'état condensé, chimie et nanosciences

### INTITULÉ DU SUJET

---

Etude théorique des transports couplés des électrons et de la chaleur pour concevoir des matériaux thermoélectriques à température ambiante

### RÉSUMÉ DU SUJET

---

La thermoélectricité est une solution possible pour la production d'énergie électrique (effet Seebeck) et pour le refroidissement nanodispositifs (effet Peltier), évitant leur surchauffe. De nouveaux efforts scientifiques et technologiques sont cependant nécessaires pour trouver des matériaux peu coûteux et efficaces afin de développer l'utilisation de ces dispositifs thermoélectriques et pour un fonctionnement à température ambiante. Les simulations numériques, cœur des méthodes qui seront utilisées au cours de ce travail de thèse, sont un outil précieux pour atteindre cet objectif.

La méthode théorique permettant de montrer l'effet de la nanostructuration sur le facteur de mérite ZT devra être développée, tandis que sera fourni un outil de simulation intégré permettant d'évaluer à la fois les contributions de la traînée de diffusion et de la traînée de phonon au coefficient de Seebeck, c'est-à-dire la contribution due au couplage avec les phonons. Cette approche totalement ab initio sera appliquée au germanium (abondant et non toxique) et au bismuth (matériau parmi ceux présentant le coefficient de Seebeck le plus élevé), ce qui permettra d'obtenir une description sans paramètre de la thermoélectricité pour ces matériaux, leurs nanostructures et leurs composés (Si- Alliages de Ge et Bi<sub>2</sub>Te<sub>3</sub>).

Les équations de transport de Boltzmann (BTE) pour les électrons et les phonons, qui sont couplées par l'interaction électron-phonon, seront résolues au-delà des approximations standard. L'anharmonicité phonon-phonon et la diffusion de phonons avec des surfaces et des interfaces dans des nanostructures seront prises en compte, dans le but d'ajuster la distribution de phonons afin d'accroître l'effet thermoélectrique. Le couplage électron-phonon sera calculé selon une méthode récente interpolation dans l'espace de Wannier. Enfin, les résultats basés sur la DFT pour le couplage électron-phonon seront couplés à un code de transport de Monte Carlo, ouvrant même la possibilité de modéliser des nano-dispositifs complexes à partir des matériaux qui seront théoriquement étudiés.

### INFORMATIONS PRATIQUES

---

Institut rayonnement et matière de Saclay

Laboratoire des Solides Irradiés

Laboratoire des Solides Irradiés

Centre : Saclay

Date souhaitée pour le début de la thèse : 01/10/2019

### PERSONNE À CONTACTER PAR LE CANDIDAT

---

Nathalie VAST

CEA

DRF/IRAMIS/LSI/LSI

IRAMIS/LSI

Ecole Polytechnique

91120 Palaiseau

Téléphone : +33 1 69 33 45 51

Email : [nathalie.vast@polytechnique.edu](mailto:nathalie.vast@polytechnique.edu)

## UNIVERSITÉ / ÉCOLE DOCTORALE

---

Interfaces: Approches interdisciplinaires / fondements; applications et innovation

## EN SAVOIR PLUS

---

<https://www.polytechnique.edu/annuaire/fr/users/nathalie.vast>

<https://portail.polytechnique.edu/lsi/fr/recherche/theorie-de-la-science-des-materiaux>

## DIRECTEUR DE THÈSE

---

Nathalie VAST

CEA

DRF/IRAMIS/LSI/LSI

IRAMIS/LSI

Ecole Polytechnique

91120 Palaiseau