



Université Claude Bernard



DIPLÔME NATIONAL DE DOCTORAT

(Arrêté du 25 mai 2016)

Date de la soutenance : **28 septembre 2021**

Nom de famille et prénom de l'auteur : **Mme TABATABAEIKAHANGI Fatemehsadat**

Titre de la thèse : « Une étude théorique du rendement thermoélectrique et du pouvoir de refroidissement des jonctions moléculaires inorganiques »

Résumé



La thermoélectricité est la conversion de chaleur en électricité et réciproquement. Comme l'a découvert Seebeck, une tension appliquée à un système électronique génère un flux de chaleur et un gradient de température peut générer un courant électrique. Durant ces dix dernières années, le nombre de consommateurs des systèmes électroniques a diminué de façon continue. La miniaturisation des systèmes électroniques demande d'optimiser la gestion de la dissipation de chaleur. Une manière intéressante pour réaliser ceci consiste à utiliser des molécules uniques comme composant électronique élémentaire, ce qui a donné naissance au champ de « l'électronique moléculaire ». En fait, l'utilisation de molécules organiques pour des applications thermoélectriques a attiré beaucoup d'attention du fait de leur flexibilité, leur faible coût et leur non-toxicité. Dans ce manuscrit, les propriétés thermoélectriques des jonctions moléculaires basées sur les dérivés d'oligos (phenyleneethynylene)(OP3) ont été étudiées. A l'aide de calculs reposants sur la Théorie Fonctionnelle de Densité (DFTB), nous avons construit des modèles de jonctions moléculaires. Les propriétés de transport électronique ont été obtenues grâce à la fonction non équilibrée de densité de fonction de Green « tight-binding » (NEGF-DFTB). Dans un premier temps, les effets des groupes pendants de la structure sur la conductance électronique et de la puissance thermique des dérivés de l'OP3 ont été quantifiés. Nous avons montré que ces dérivés proviennent des propriétés de structures qui sont utilisées afin d'obtenir des matériaux thermoélectriques présentant une grande efficacité. Ensuite, les effets d'enchevêtrement des molécules sur l'efficacité thermoélectrique ont été explorées. Les simulations de dynamique moléculaire classique (MD) ont été utilisées pour calculer le transport de phonons au travers des jonctions moléculaires. En combinant les résultats ab-initio avec le modèle classique MD pour décrire respectivement le transport des électrons et phonons, l'efficacité thermoélectrique en termes de figure de mérite ZT a été calculé pour les dérivés de l'OP3. Nous avons déterminé que les molécules enchevêtrées montrent un fort ZT ce qui les rend de bons candidats pour être utilisés comme système de refroidissement. Enfin, nous introduisons un modèle de circuit qui

combine transport de phonons et d'électrons. Ce modèle permet d'optimiser les paramètres qui maximisent le refroidissement. Globalement, nos résultats montrent que les dérivés de l'OP3 montrent la nécessité d'avoir des structures rigides et une structure électronique compatible ce qui permet d'avoir des dispositifs de haute-performance pour des applications de refroidissement.

Supervisors: Prof. Dr. Thomas NIEHAUS and Dr. Samy MERABIA