

Alexandre VERCOUTER (1)*, Vincent LEMAUR (1), Julien IDE (1), Luca MUCCIOLI (2),
David BELJONNE (1) et Jérôme CORNIL (1)

(1) Service de Chimie des Matériaux Nouveaux (CMN),
Université de Mons, 20 Place du Parc, 7000 Mons, Belgique,
alexandre.VERCOUTER@student.umons.be

(2) Dipartimento di Chimica Industriale "Toso Montanari",
Università di Bologna, Viale del Risorgimento 4, Bologna, Italie



Modélisation théorique de la conductivité thermique de réseau de semiconducteurs organiques

Theoretical characterization of the lattice thermal conductivity in organic semiconductors

Résumé

La thermoélectricité traduit la capacité à convertir de la chaleur en électricité (ou l'inverse) et offre un grand potentiel pour des systèmes de production électrique et de revalorisation énergétique. A l'heure actuelle, les modules commerciaux sont composés de matériaux inorganiques toxiques et coûteux, ce qui a motivé récemment l'emploi de semiconducteurs organiques dopés. Si la description du transport de charges électriques au sein de ces composés a fait l'objet de nombreuses études ces dernières années, la conception de modules thermoélectriques à base de semiconducteurs organiques est freinée par le manque de données concernant le transport de la chaleur. Afin de pallier cette insuffisance, ce travail a été dédié à l'estimation théorique de la conductivité thermique de réseau dans des cristaux à base de semiconducteurs organiques utilisés au sein de nombreux dispositifs, à savoir le pentacène, le TIPS-pentacène et le 2,7-BTBT (Fig.2). Dans cette optique, des simulations de dynamique moléculaire de non-équilibre ont été réalisées afin de créer un gradient de température stable via transfert de flux de chaleur au sein de l'échantillon et d'ainsi en estimer la conductivité thermique de réseau.

Abstract

Thermoelectricity reflects the ability to convert heat into electricity (or vice versa) and offers a great potential for power generation and energy recovery systems. Up to now, commercial modules are built with toxic and expensive inorganic materials; this has recently motivated the use of doped organic semiconductors. Whereas their charge transport properties have been widely studied in recent years, the design of thermoelectric modules based on organic semiconductors is still limited by the lack of data on thermal transport. In order to tackle this issue, this work has been dedicated to the theoretical characterization of the lattice thermal conductivity in single crystals of organic semiconductors widely used in devices, namely pentacene, TIPS-pentacene, and 2,7-BTBT. Non-equilibrium molecular dynamics simulations have been performed in order to generate stable temperature gradients via exchange of heat flux and estimate lattice thermal conductivity values.

Mots-Clés

Semiconducteurs Organiques ;
Thermoélectricité ; Conductivité Thermique ;
Champ de Force ; Dynamique Moléculaire de
Non-Equilibre
Organic Semiconductors ; Thermoelectricity ;
Force Field ; Non Equilibrium Molecular
Dynamics

1. Introduction à la thermoélectricité

La thermoélectricité traduit la faculté d'un matériau à convertir une différence de température en différence de potentiel électrique ou à refroidir un volume via l'application d'une tension électrique. Ainsi, il existe deux types de modules thermoélectriques : le générateur et le refroidisseur. Ces deux dispositifs présentent une architecture extrêmement semblable (Fig. 1) [1].

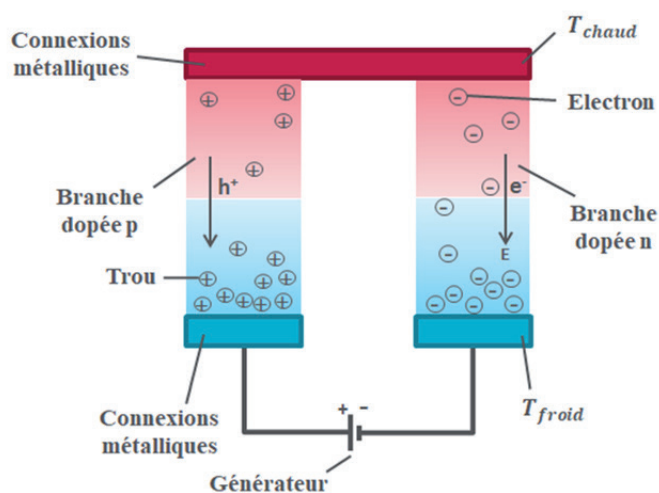


Figure 1 : Représentation schématique d'un générateur thermoélectrique adapté de la référence [1].

Un thermogénérateur électrique est typiquement construit en connectant en série un semiconducteur dopé de type *p* et un semiconducteur dopé de type *n*. Les extrémités de ce thermocouple sont alors mises en contact avec une zone chaude et une zone froide, donnant lieu à une différence de température ΔT . Puisque les électrons et les trous sont des particules chargées occupant préférentiellement des états de plus basses énergies, cette mise en contact provoque un déplacement vers la zone froide des électrons dans le semiconducteur *n* et des trous dans le semiconducteur *p*. C'est ce phénomène qui permet de générer une différence de potentiel ΔV .

Les propriétés thermoélectriques sont actuellement exploitées au sein de thermogénérateurs mettant à profit la chaleur émise par désintégration de radioisotopes dans le domaine spatial ou au sein de refroidisseurs pour des composants électroniques ou pour des réfrigérateurs portables, parmi d'autres applications. L'utilisation de modules thermoé-

lectriques présente différents avantages : ils sont complètement silencieux, de très grande fiabilité et leur fonctionnement ne nécessite pas l'usage de gaz nocifs pour l'environnement. De plus, un développement de thermogénérateurs à plus grande échelle pourrait constituer une nouvelle source significative d'énergie en revalorisant les quantités colossales de chaleur générées au cours de nombreux processus industriels (à titre d'exemple, les centrales nucléaires relarguent près de 70% de leur énergie sous forme d'eau chaude) [2].

L'efficacité de fonctionnement d'un module thermoélectrique est définie par le facteur de mérite adimensionnel ZT défini comme :

$$ZT = \frac{\sigma \alpha^2 T}{\kappa} \quad (\text{Éq. 1})$$

Où σ , α , κ et T désignent, respectivement, la conductivité électrique (exprimée en S/m), le coefficient de Seebeck (en V/K) qui représente le rapport entre la tension générée et la différence de température, la conductivité thermique (en $W/m.K$) et la température moyenne entre la zone chaude et la zone froide (en K). Plus le facteur de mérite est élevé et plus le thermogénérateur sera capable de convertir efficacement de la chaleur en électricité. De ce fait, l'optimisation des performances thermoélectriques d'un matériau implique une maximisation de son facteur de mérite, c'est-à-dire de maximiser la conductivité électrique tout en minimisant la conductivité thermique. A ce jour, les seuls matériaux réussissant à concilier ces deux propriétés *a priori* contradictoires sont les semiconducteurs.

C'est la raison pour laquelle la plupart des modules thermoélectriques actuellement commercialisés reposent sur l'emploi de semiconducteurs inorganiques (en particulier des dérivés de tellure de bismuth, Bi_2Te_3) qui sont difficiles à mettre en œuvre, coûteux et toxiques. De plus, leur facteur de mérite ne dépasse guère l'unité à température ambiante. À titre de comparaison, une valeur de ZT d'au moins 3 unités serait nécessaire pour qu'un refroidisseur thermoélectrique puisse concurrencer un réfrigérateur « classique » à cycle détente/compression [1].

En conséquence, le fait que les modules thermoélectriques reposent sur l'utilisation de matériaux toxiques et que leur rendement insuffisant ne contrebalance pas un coût de production élevé limite leur utilisation à quelques niches technologiques. Par contre, l'utilisation de semiconducteurs organiques constitue une voie particulièrement prometteuse.

2. Utilisation des semiconducteurs organiques dans le domaine thermoélectrique

C'est dans le courant des années quatre-vingt qu'a été découvert le potentiel des composés organiques conjugués (moléculaires et polymères) en tant que matériaux semiconducteurs. À la différence de leur pendant inorganique, ces composés sont caractérisés par des propriétés mécaniques très attractives (flexibilité, légèreté), une mise en œuvre facile par voie liquide, un faible coût de production, et une toxicité limitée. Ces différents avantages font de ces matériaux des candidats naturels à la fabrication de dispositifs thermoélectriques, moyennant un processus de dopage chimique pour les rendre conducteurs de l'électricité. Une valeur de $ZT=0.42$ a ainsi été mesurée récemment au sein d'un film de poly(3,4-éthylènedioxythiophène) et de polystyrène sulfonate (PEDOT-PSS) où le volume total de dopants a été minimisé. Il s'agit du plus grand facteur de mérite mesuré à ce jour pour un semiconducteur organique qui est à comparer aux valeurs de ZT de 0.8 - 1.1 obtenues pour des

alliages de Bi_2Te_3 , qui sont les matériaux les plus répandus pour des applications à une température inférieure à 200°C [3,4].

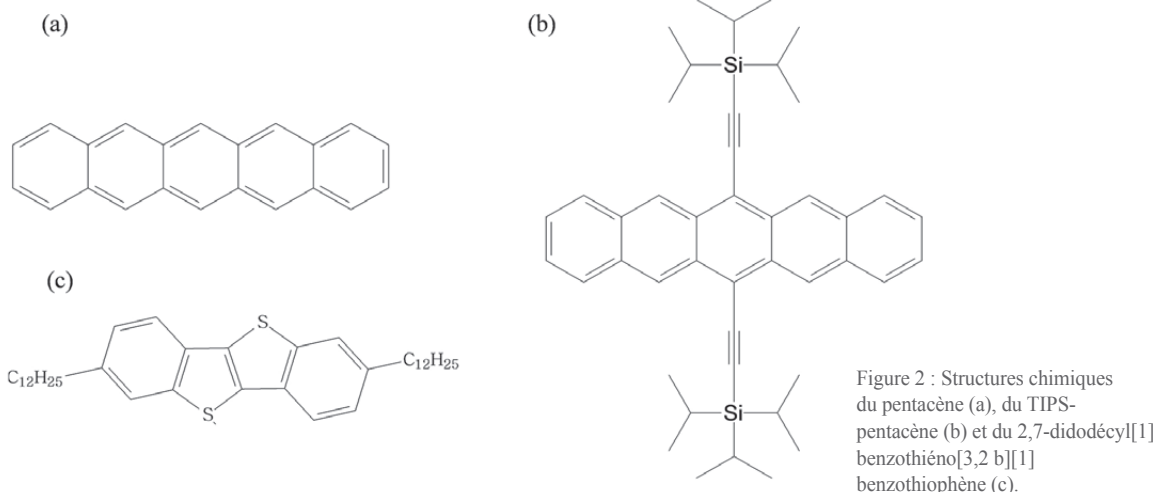
Parmi l'ensemble des paramètres définissant le transport thermoélectrique, la conductivité thermique est de loin celui qui a reçu le moins d'attention et ce, aussi bien d'un point de vue théorique qu'expérimental. Par ailleurs, les rares mesures de conductivité thermique qui ont été rapportées dans la littérature pour des systèmes moléculaires organiques font état de valeurs s'étalant de 0.1 à 0.7, ce qui est tout à fait encourageant dans le domaine thermoélectrique en comparaison du tellure de bismuth ($\kappa_N = 1.2 \text{ W/m.K}$).

3. Description de la conductivité thermique de réseau de semiconducteurs organiques

D'un point de vue théorique, le transport de la chaleur est assuré par deux vecteurs différents (Éq. 2) : d'une part, les électrons (κ_e) et d'autre part, les mouvements de vibration de réseau collectifs, appelés phonons (κ_N).

$$\kappa = \kappa_e + \kappa_N \quad (\text{Éq. 2})$$

Pour les semiconducteurs faiblement dopés, c'est la contribution vibrationnelle qui gouverne généralement la conductivité thermique ($\kappa_N \gg \kappa_e$) [5]. C'est le manque d'intérêt porté



à l'égard de (κ_N) qui est à l'origine de ce travail. En effet, ce dernier est consacré à la modélisation théorique de la contribution vibrationnelle à la conductivité thermique au sein de cristaux moléculaires à base des trois semiconducteurs moléculaires organiques, à savoir le pentacène, un dérivé de pentacène (TIPS-pentacène) et un dérivé de benzothiénobenzothiophène (2,7-BTBT), voir Figure 2.

Dans le cadre de ce travail, leur conductivité thermique de réseau a été estimée selon chacune des directions de l'espace à partir de simulations classiques en champ de force (Dreiding) via l'algorithme de Müller-Plathe implémenté dans le programme LAMMPS. Etant donné qu'un matériau à bonnes performances thermoélectriques doit être caractérisé à la fois par une conductivité électrique élevée et une conductivité thermique faible, les résultats déduits par cette approche ont été confrontés à des valeurs de mobilité de porteurs de charge (qui est une quantité proportionnelle à la conductivité électrique). Celles-ci ont été obtenues au niveau de la Density Functional Theory (DFT) dans le programme Amsterdam Density Functional (ADF) via une méthodologie déjà décrite dans la littérature. De cette manière, il a été possible de comparer l'anisotropie du transport de chaleur avec celle du transport de charges et d'établir des relations structure-propriétés [6,7,8,9].

4. Introduction à la modélisation moléculaire et à la dynamique moléculaire de non-équilibre

La modélisation moléculaire repose sur l'emploi d'un champ de force. L'expression utilisée pour le champ de force fait intervenir une somme de termes énergétiques qui décrit les atomes et leurs interactions comme des balles et des ressorts. Plus précisément, ces termes peuvent se distinguer en deux groupes (Fig. 3) : (i) ceux associés à la description d'interactions entre atomes liés (par exemple, les étirements de liaisons - « stretching » -, variations d'angles de liaison - « bending » -, et torsions) ; et (ii) ceux associés aux interactions entre atomes non liés (e.g. interactions électrostatiques et de van der Waals).

De manière générale, la dynamique moléculaire permet l'étude de l'évolution temporelle d'un système de particules sous l'effet d'une agitation thermique, typiquement obtenue en assignant aux atomes une vitesse en moyenne telle que $\frac{1}{2}mv^2 = \frac{3}{2}kT$. De façon plus rigoureuse, cette évolution est établie via les lois de la dynamique classique de Newton. Pour résoudre ces équations, la trajectoire des particules est subdivisée en une série d'états discrets (associés à un pas d'intégration Δt) et la seconde loi de Newton permet d'obtenir diverses informations (positions et vitesses) à propos des « balles » sur lesquelles des forces sont exercées (Éq. 3).

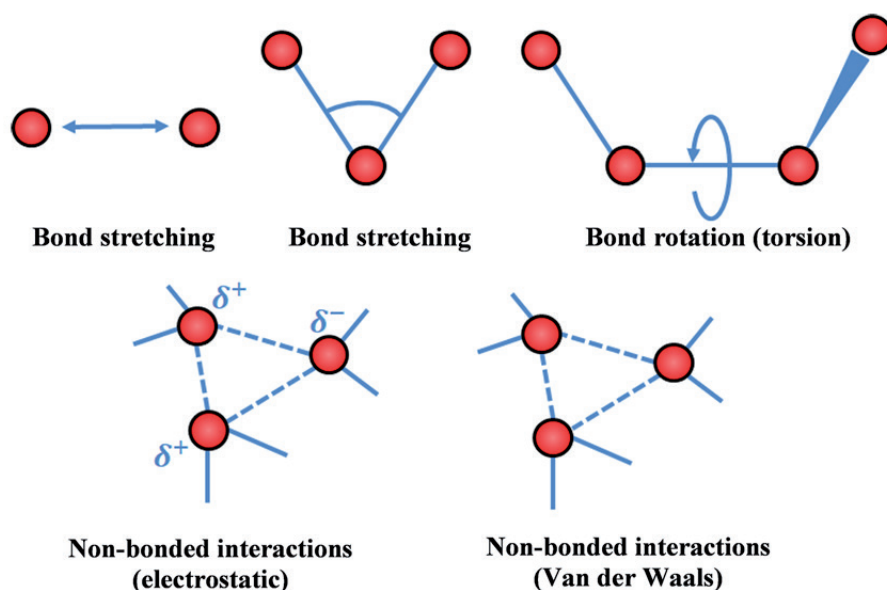


Figure 3 : Représentation schématique des termes énergétiques principaux d'un champ de force.

$$\begin{cases} \vec{F}_i = - \frac{dE(r_i \dots r_n)}{d\vec{r}_i(t)} \\ \vec{F}_i = m_i \frac{d^2\vec{r}_i(t)}{dt^2} \end{cases} \quad (\text{Éq.3})$$

La conductivité thermique de réseau qui doit être extraite des trajectoires est liée aux vibrations intermoléculaires, c'est-à-dire à la façon avec laquelle les molécules se déplacent les unes par rapport aux autres. Dans notre cas, la déduction de cette grandeur repose sur des simulations de dynamique moléculaire de non-équilibre. Le principe est le suivant : appliquer et alimenter un flux de chaleur J de manière à induire un gradient de température ∇T qui sera mesuré lorsque le système aura atteint un état stationnaire. Ainsi, la conductivité thermique est extraite à l'aide de la loi de Fourier :

$$\kappa_N = - \frac{J}{\nabla T} \quad (\text{Éq. 4})$$

A cette fin, la boîte de simulation est préalablement subdivisée en N fines couches selon la direction parallèle à celle suivant laquelle s'effectuera le transport thermique. Puis, l'algorithme de Müller-Plathe crée un flux de chaleur J en échangeant les vitesses entre l'atome le plus « chaud » de la couche 0 (c'est-à-dire celui avec la plus grande énergie cinétique) et le plus « froid » de la couche $N/2$ (avec la plus faible énergie cinétique), comme le montre la figure 4 [7].

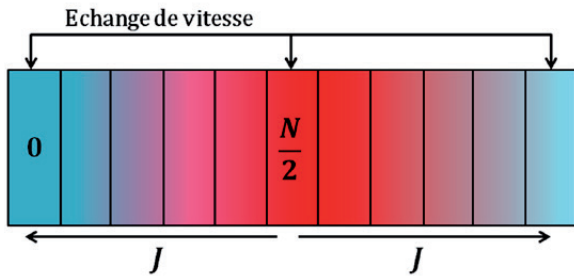


Figure 4 : Représentation schématique de l'algorithme de Müller-Plathe.

Le flux de chaleur généré est décrit par l'équation suivante :

$$J = \frac{1}{2At} \sum_{\text{transferts}} \left(\frac{1}{2}mv_{\text{chaud}}^2 - \frac{1}{2}mv_{\text{froid}}^2 \right) \quad (\text{Éq. 5})$$

Où A désigne la section efficace de la boîte (perpendiculaire au flux), t le temps de simulation et v la vitesse des particules. Puisque des conditions limites périodiques sont appliquées à la boîte de simulation, deux flux de chaleur s'écoulent depuis la couche centrale $N/2$ et selon des sens opposés. C'est la raison pour laquelle un facteur 2 apparaît au dénominateur de l'équation 5. Finalement, le gradient de température ∇T est établi à l'équilibre en mesurant la température moyenne de chacune des couches du système (Fig. 5). L'anisotropie du transport thermique peut être étudiée en appliquant cette méthodologie à chacune des directions de la boîte de simulation.

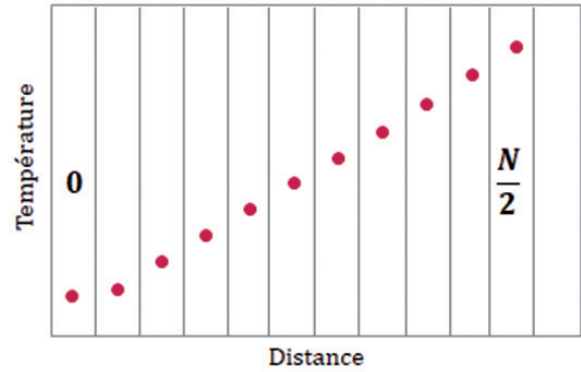


Figure 5 : Représentation schématique de la déduction du gradient de température ∇T

Il est à noter que la valeur de la conductivité thermique déduite via cette approche est fortement dépendante de la longueur L du système selon la direction de propagation de la chaleur. Or, les mesures expérimentales de la conductivité thermique s'effectuent au départ de films granulaires dont la dimension est largement supérieure au libre parcours moyen des phonons (de l'ordre de quelques centaines de nanomètres). Toutefois, il est possible de confronter les résultats des simulations aux mesures expérimentales (indépendantes de la dimension des grains) en faisant appel à une procédure d'extrapolation linéaire. Cette dernière consiste à calculer la conductivité thermique au sein d'une collection de boîtes de simulation de taille croissante selon la direction de propagation de la chaleur. Par la suite, une valeur de κ_N indépendante de la taille du système est déterminée en extrapolant linéairement la courbe schématique de la figure 6. Comme le montre cette figure, la conductivité thermique de réseau diminue avec

la taille du système ; ceci s'explique par le fait que nous introduisons de manière artificielle des processus de réflexion des phonons au niveau de la boîte de simulation, ce qui a pour effet de limiter le transport de chaleur et d'améliorer les performances thermoélectriques. Il est dès lors important d'extrapoler les résultats obtenus pour décrire une situation caractéristique du bulk des cristaux moléculaires.

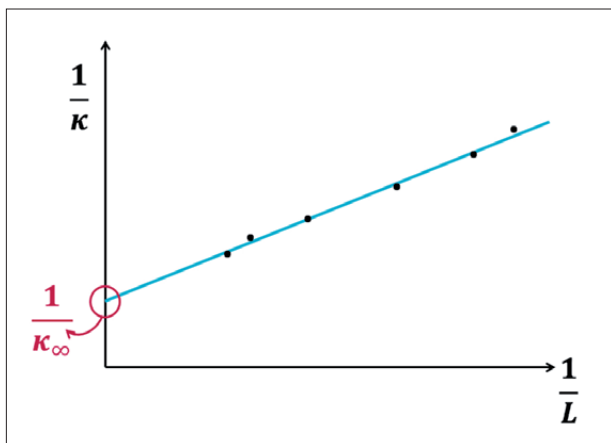


Figure 6 : Représentation schématique de la procédure d'extrapolation linéaire permettant de déterminer une conductivité thermique indépendante de la taille du système.

4. Comparaison du transport thermoélectrique entre différents semiconducteurs organiques

Les oligoacènes, benzothiénobenzothiophènes ainsi que leurs dérivés sont des composés particulièrement prometteurs dans le domaine thermoélectrique puisqu'ils sont caractérisés par de hautes valeurs de mobilité des porteurs de charges ($\mu = 1.7 \times 10^2 \text{ cm}^2/\text{V.s}$ pour le 2,7didodécyl[1]-benzothiéno[3,2-b][1]benzothiophène, $\mu = 5.5 \text{ cm}^2/\text{V.s}$ pour le pentacène et $\mu \sim 1 \text{ cm}^2/\text{V.s}$ pour le TIPS-pentacène). De plus, le pentacène et le TIPS-pentacène se distinguent par des valeurs de coefficient de Seebeck particulièrement honorables (3×10^{-4} et 10^{-3} V/K , respectivement) en comparaison à celle du tellure de bismuth ($2.4 \times 10^{-4} \text{ V/K}$) [9,10,11,12,13].

4.1. Pentacène

Le pentacène est un hydrocarbure aromatique polycyclique qui est composé de cinq cycles benzéniques fusionnés formant une structure planaire. Ce composé cristallise selon plusieurs formes

polymorphiques. Celle qui est la plus attractive pour des applications électroniques (comme des transistors à effet de champ) et qui a été considérée dans ce travail correspond à une cellule unitaire triclinique contenant deux molécules disposées en une conformation « herringbone » dans le plan ab et qui s'empilent en couches selon l'axe c (Fig.7). Les valeurs de conductivité thermique extrapolées à l'infini selon les directions a , b et c ainsi que les mobilités de porteurs de charges μ_h correspondantes sont renseignées dans le tableau 1 [14].

	Transport électrique	Transport thermique
	μ_h [$\text{cm}^2/\text{V.s}$]	κ_N [$\text{W}/\text{m.K}$]
a	8.64	0.15
b	6.18	0.11
c	0.35	0.15

Tableau 1 : Comparaison des performances électriques et thermiques au sein d'un cristal de pentacène selon les trois directions de l'espace.

La conductivité thermique de réseau est exprimée en $\text{W}/\text{m.K}$ et les mobilités des porteurs de charges μ_h en $\text{cm}^2/\text{V.s}$.

En ce qui concerne la diffusion thermique, ces résultats sont cohérents avec les données expérimentales rapportées dans la littérature qui font état de valeurs de l'ordre de $10^{-1} \text{ W}/\text{m.K}$. A l'échelle moléculaire, c'est l'intensité du couplage électronique entre les orbitales HOMO des molécules voisines qui définit la mobilité μ_h selon la direction envisagée. Généralement, la communication électronique est plus faible selon la direction d'empilement des couches qu'au sein du plan ab . Ainsi, il s'avère que le transport de la chaleur au sein de cristaux de pentacène est nettement moins anisotrope (3D) que le transport de charges (2D) étant donné que les valeurs de conductivité thermique extrapolées à l'infini selon les directions a , b et c sont du même ordre de grandeur [15].

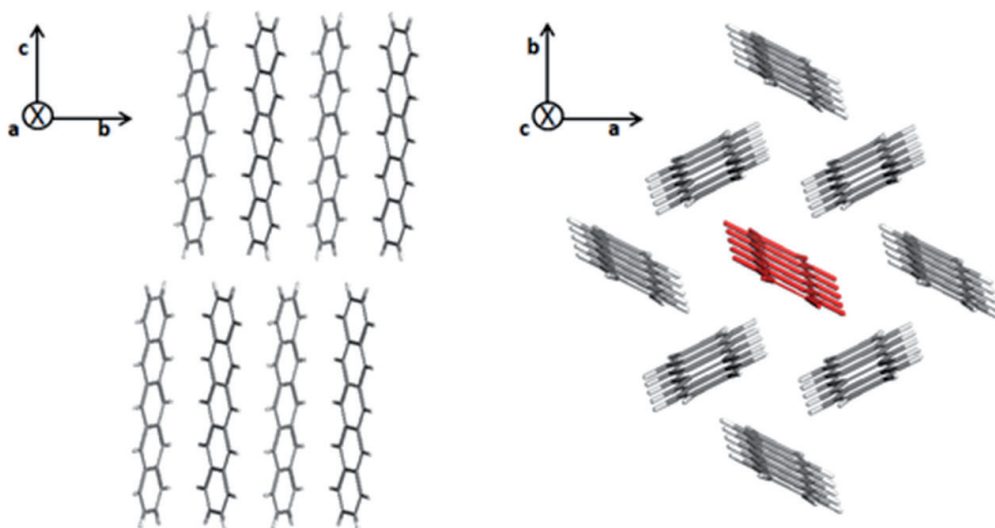


Figure 7 : Vues de côté et du dessus de l'empilement herringbone d'un cristal à base de molécules de pentacène

4.2. TIPS-pentacène

La solubilité du pentacène dans des solvants organiques peut être améliorée en le substituant par un groupement triisopropylsilyléthynyle de part et d'autre du cycle central. Le composé obtenu correspond au TIPS-pentacène. L'encombrement stérique généré par ces groupements modifie l'orientation des plans conjugués, se présentant de manière quasi-parallèle les uns par rapport aux autres. *A priori*, l'introduction de ces groupements TIPS devrait induire des modifications importantes du transport thermoélectrique en comparaison à ce qui est observé pour le pentacène [16].

Une analyse des résultats rapportés dans le tableau 2 indique en effet que la présence de groupements triisopropylsilyléthynyles rend

	Transport électrique	Transport thermique
	μ_h [$cm^2/V.s$]	κ_N [$W/m.K$]
<i>a</i>	1.31	0.120
<i>b</i>	0.05	0.086
<i>c</i>	0.0003	0.099

Tableau 2 : Comparaison des performances électriques et thermiques au sein d'un cristal de TIPS-pentacène selon les trois directions de l'espace. La conductivité thermique de réseau κ_N est exprimée en W/m.K et les mobilités des porteurs de charge μ_h en $cm^2/V.s$.

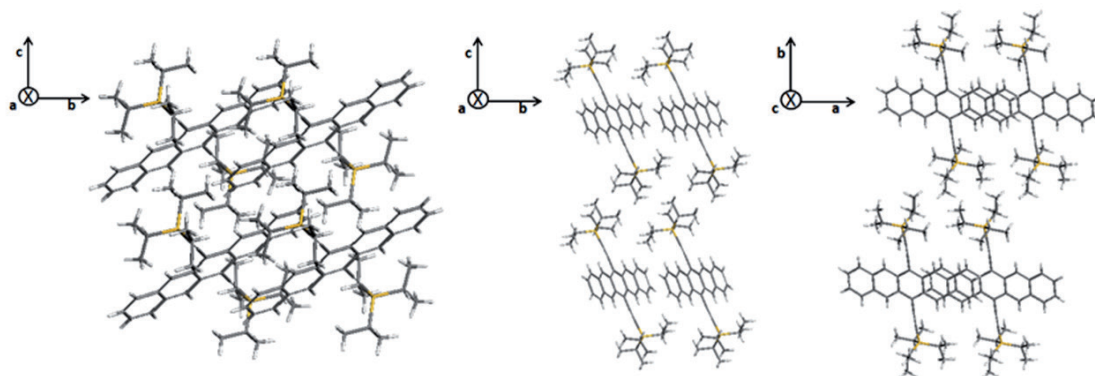


Figure 8 : Vues depuis différents plans d'un système à base de TIPS-pentacène.

complètement défavorable le transport de charges électriques le long des directions b et c et mais conduit à nouveau à des valeurs de conductivité thermique similaires selon les trois directions.

4.3. 2,7-BTBT

Le dérivé du benzothiénobenzothiophène étudié dans le cadre de ce travail possède une structure cristalline en tout point comparable à celle du pentacène, à ceci près qu'il se présente sous la forme d'une cellule unitaire quasi-orthorhombique. Les dérivés de BTBT se distinguent par la présence de longues chaînes alkyles attachées aux extrémités du cœur conjugué.

	Transport électrique	Transport thermique
	μ_h [cm ² /V.s]	κ_N [W/m.K]
a	3.31	0.078
b	0.90	0.075
c	Pas disponible	0.18

Tableau 3 : Comparaison des performances électriques et thermiques au sein d'un cristal de 2,7-BTBT selon les trois directions de l'espace. La conductivité thermique de réseau κ_N est exprimée en W/m.K et les mobilités des porteurs de charge μ_h en cm²/V.s.

Il est à noter que le transport de charges électriques selon la direction c n'a pas été repris au

sein du tableau 3 puisque la présence de longues chaînes alkyles limite de façon considérable le transport de charges. A nouveau, l'examen des valeurs de conductivité thermique extrapolées à l'infini dans le plan ab font état d'un transport de la chaleur moins anisotrope ($\kappa_N^a / \kappa_N^b \sim 1.04$ que celui des charges électriques ($\mu_h^a / \mu_h^b \sim 3.67$).

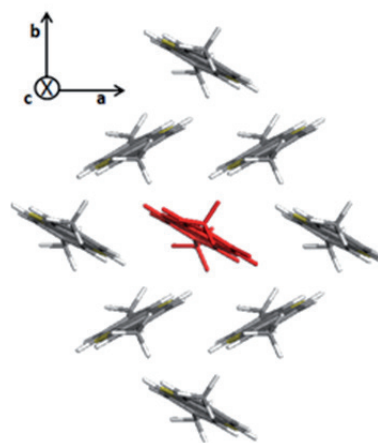


Figure 9 : Vues du dessus de l'empilement herringbone d'un système à base de 2,7-BTBT.

5. Conclusions

Dans cette étude, la conductivité thermique de réseau κ_N de cristaux à base de pentacène, de TIPS-pentacène et de 2,7-BTBT a été estimée par le biais de dynamique moléculaire de non-équilibre (algorithme de Müller-Plathe). L'ensemble des valeurs de κ_N extrapolées à l'infini selon les trois axes cristallographiques des cristaux sont reprises dans le tableau 4. Ces dernières sont cohérentes avec les mesures expérimentales déjà rapportées dans la litté-

	κ_N^a [W/m.K]	κ_N^b [W/m.K]	κ_N^c [W/m.K]
Pentacène	0.15	0.11	0.15
TIPS-pentacène	0.120	0.086	0.099
2,7-BTBT	0.078	0.075	0.18

Tableau 4 : Comparaison des performances thermiques au sein d'un cristal de pentacène, de TIPS-pentacène et de 2,7-BTBT selon les trois directions de l'espace. La conductivité thermique de réseau est exprimée en W/m.K.

ture. Dans le cas du 2,7-BTBT, il apparaît que la présence d'un groupement volumineux substituant les cœurs conjugués tend à diminuer leur amplitude de vibrations et, par conséquent, la diffusion thermique dans le plan « herringbone ». Ainsi, le cristal de 2,7-BTBT est caractérisé : (i) par un transport thermique favorable selon la direction des chaînes alkyles ; et (ii) par un transfert de charges électriques efficaces dans le plan *ab*. De ce fait, ce caractère orthogonal pourrait être mis à profit au sein de dispositifs thermoélectriques où la chaleur serait évacuée le long de la direction perpendiculaire au déplacement des porteurs de charge.

6. Méthodologie

L'ensemble des simulations décrites dans ce travail ont été réalisées au départ du champ de force Dreiding pour lequel les termes entre atomes liés ont été reparamétrés sur base de calculs de chimie quantique [17]. Tout d'abord, les boîtes de simulation ont subi une optimisation de géométrie à volume constant, suivie d'une dynamique d'équilibration NVT ($T = 298\text{ K}$) de 1 ns avec un pas de temps $\Delta t = 0.2\text{ fs}$. Cette étape est suivie d'une première dynamique de mise hors-équilibre NVE (1 ns) au cours de laquelle l'atome le plus froid de la couche centrale ($N/2$) et l'atome le plus chaud de la couche externe (0) sont échangés à l'aide de l'algorithme de Müller-Plathe implémenté dans le programme LAMMPS [6,7,8]. Finalement, la conductivité thermique de réseau est extraite d'une plus longue trajectoire de dynamique NVE (4 ns). Le système a été subdivisé en 20 couches où les vitesses entre atomes sont échangées toutes les 250 fs . Au cours de ces simulations, la température du système est contrôlée tous les 500 pas de temps . Cette procédure a été par la suite appliquée à une série de boîtes de simulation de dimension croissante selon la direction d'intérêt afin d'y déduire la conductivité thermique de réseau via une procédure d'extrapolation linéaire.

Remerciements

Les ressources informatiques utilisées dans ce travail ont été fournies par le Consortium des Equipements de Calcul Intensif (CECI) financé par le FRS-FNRS (Grant 2.5020.11). A.V., D. B., et J. C. sont chercheurs du FNRS. A.V. remercie la Société Royale de Chimie pour l'octroi du prix SRC.

Références

- [1] C. Godart, « Matériaux à effets thermoélectriques », *Techniques de l'ingénieur*, **2015**, n1500.
- [2] J-L Bobin, E. Huffer et al., « L'énergie de demain : Techniques, environnement, économie », édition EDP sciences, 2005.
- [3] G-H. Kim et al., "Engineered doping of organic semiconductors for enhanced thermoelectric efficiency", *Nat. Mater.* **12**, 7119, **2013**.
- [4] H. J. Goldsmid et al., "Recent Trends in Thermoelectric Materials, Semiconductors and Semimetals", Vol 69, Ch. 1 (Academic **2000**).
- [5] J. Perron, « Matériaux thermoélectriques polymères », *Techniques de l'ingénieur*, **2014**, k721.
- [6] S.L. Mayo et al., "DREIDING: A Generic Force Field for Molecular Simulations", *J. Phys. Chem.*, **94**, 1990.
- [7] F. Müller-Plathe et F. Reith, "Cause and effect reversed in non-equilibrium molecular dynamics: an easy route to transport coefficients", *Comput. Theor. Polym. Sci.*, **9**, 203, **1999**.
- [8] <http://lammps.sandia.gov/doc/Manual.html>
- [9] Y. Tsutsui, G. Schweicher, et al., "Unraveling Unprecedented Charge Carrier Mobility through Structure Property Relationship of Four Isomers of Didodecyl [1] benzothieno[3,2- b][1]benzothiophene", *Adv. Mater.*, **28**, **2016**.
- [10] H. Klauk, M. Halik et al., "High-mobility polymer gate dielectric pentacene thin film transistors", *J. Appl. Phys.* **92**, 5259, **2002**.
- [11] S.K. Park et T. N. Jackson, "High mobility solution processed 6,13 bis(triisopropylsilyl)ethynyl pentacene organic thin film transistors", *Appl. Phys. Lett.* **91**, 063514, **2007**.
- [12] K. P. Pernstich et al., "Field-effect-modulated Seebeck coefficient in organic semiconductors", *Nat. Mater.*, **7**, 28 (**2008**).
- [13] T. Inohara et al., "Large Thermoelectric Power Factor at Low Temperatures in OneDimensional Telluride Ta_2SiTe_4 ", *Appl. Phys. Lett.* **110**, 183901, **2017**. [14] S. Schiefer et al., "Determination of the Crystal Structure of Substrate-Induced Pentacene Polymorphs in Fiber Structured Thin Films", *J. Am. Chem. Soc.*, **129**, **2007**.
- [15] N. Kim, "Thermal transport properties of thin films of small molecule organic semiconductors", *Appl. Phys. Lett.* **87**, 241908, **2005**.
- [16] Z. Stewart, "Organic Thin-Film Transistors and TIPS-Pentacene", uknowledge.uky.edu, **2013**.
- [17] Y. Tsutsui, G. Schweicher, et al., "Unraveling Unprecedented Charge Carrier Mobility through Structure Property Relationship of Four Isomers of Didodecyl [1] benzothieno[3,2- b][1]benzothiophene", *Adv. Mater.*, **28**, **2016**.