

## Séminaire P2M

Lundi 4 avril 2022 à 14h-salle Patrick Alnot

Pierric Lemoine

Institut des Sciences Chimiques de Rennes, UMR 6226,  
CNRS, Université de Rennes 1

### Cristallochimie de sulfures de cuivre thermoélectriques à structures complexes

L'étude des sulfures de cuivre a subi un regain d'intérêt considérable depuis quelques années suite à la mise en évidence de leur potentiel réel en tant que matériaux thermoélectriques et photovoltaïques performants pour la conversion de l'énergie, associé à l'absence d'éléments toxiques, chers ou stratégiques dans leurs compositions. Bien que certains de ces matériaux présentent intrinsèquement des propriétés intéressantes, l'optimisation de celles-ci, par le jeu de substitutions chimiques ou l'utilisation de paramètres de synthèse variés, requiert la compréhension des relations reliant la (micro)structure aux propriétés. Cette compréhension nécessite une connaissance approfondie de la cristallochimie de ces matériaux. Compte tenu de la complexité des structures cristallographiques qui peuvent être rencontrées dans ces systèmes, certaines études structurales sont réalisées en combinant des techniques de caractérisation complémentaires : diffraction des rayons X, diffraction des neutrons, microscopie électronique à transmission et spectroscopies. À ces caractérisations structurales, l'étude *in situ* de la réactivité chimique et des mécanismes associés est également entreprise. Cela permet de déterminer les conditions favorables à l'obtention d'échantillons monophasés pour l'étude des propriétés mais également de connaître la limite d'utilisation en température de ces matériaux thermoélectriques en vue de futures applications.

Dans cette présentation je discuterai tout d'abord de manière globale des relations structure-propriétés thermoélectriques des sulfures de cuivre inorganiques avant de me focaliser sur les résultats récents que nous avons obtenus avec mes collaborateurs sur les phases colusite  $\text{Cu}_{26}\text{T}_2\text{M}_6\text{S}_{32}$  (T = métal d, M = Ge, Sn, Sb) et germanite  $\text{Cu}_{22}\text{Fe}_8\text{Ge}_4\text{S}_{32}$ , d'une part, et sur de nouveaux composés ternaires dans le système Cu-Sn-S, d'autre part.