

Soutenance de thèse

Jeudi 29 novembre

14h00

Amphi I, CentraleSupélec
Plateau du Moulon
Bâtiment Eiffel
3, rue Joliot-Curie
91192 Gif-sur-Yvette cedex

Brice DAVIER

“Étude théorique des propriétés thermoélectriques de nanostructures”

Jury members :

Jérôme SAINT-MARTIN, Maître de Conférence, Université Paris Sud (C2N), Directeur de thèse
Sebastian VOLZ, Directeur de Recherche, LIMMS/CNRS-IIS, Co-directeur de thèse
Samy MERABIA, Chargé de Recherche, CNRS, ILM, Rapporteur
Mathieu LUISIER, Associate Professor, ETH Zurich, Rapporteur
Jelena SJAKSTE, Chargé de Recherche, LSI, Palaiseau, Examineur
David LACROIX, Professeur, Université de Lorraine, CNRS, LEMTA, Examineur
Jay AMRIT, Maître de Conférence, Paris Sud, Orsay - LIMSI-CNRS, Invité

Abstract :

Les générateurs thermoélectriques convertissent directement l'énergie thermique en énergie électrique. Ils pourraient devenir de plus en plus utiles à des fins de récupération d'énergie et font l'objet de recherches actives. Cependant, les meilleurs matériaux thermoélectriques sont rares et polluants.

Le Silicium et le Germanium seraient des matériaux intéressants si leur efficacité thermoélectrique était améliorée. Pour ce faire, la nanostructuration est une voie possible, par exemple en introduisant des faces rugueuses ou de nouvelles interfaces semi-transparentes.

Récemment, des nanofils polyphasés (composés d'une alternance de phases cubiques et hexagonales de Si et Ge) ont été fabriqués, mais la caractérisation expérimentale de nanostructures aussi complexes comprenant des matériaux exotiques peut être difficile.

Dans cette thèse, nous étudions en détail le transport thermique dans des nanostructures avec des simulations numériques. Une méthode Monte Carlo originale a été développée, avec une description "full band" des matériaux. Elle inclut des modèles pour les faces rugueuses et les interfaces entre matériaux. Des simulations de Dynamique Moléculaire sont également effectuées pour caractériser les propriétés des interfaces.

Nous confirmons que les phases hexagonales de Si et Ge ont une conductivité thermique inférieure à celle des phases cubiques correspondantes. Le modèle "full band" montre que le flux thermique est fortement anisotrope. Des modèles semi-analytiques habituels n'ont pas pu reproduire la conductivité thermique des nanostructures simulées avec des faces rugueuses.

De plus, ces faces ont tendance à concentrer le flux de chaleur dans la direction principale de la nanostructure. Enfin, certaines interfaces polyphasées peuvent avoir une conductance thermique presque aussi faible que les interfaces Si/Ge, et pourrait ainsi améliorer significativement l'efficacité thermoélectrique des nanofils polyphasés.

La méthode Monte Carlo présentée peut facilement être utilisée pour étudier une large gamme de matériaux, et elle est capable de modéliser des nanostructures arbitrairement complexes.

A l'avenir, les simulations en Dynamique Moléculaire seront utilisées pour paramétrer un modèle plus réaliste d'interfaces.

Mots clefs: thermoelectricité, simulation, Monte Carlo, Dynamique Moleculaire, transport thermique