



Objectifs / Résultats

Le projet THERMAESCAPE propose d'exalter les propriétés thermoélectriques des matériaux grâce à une rupture de comportement physique à l'échelle nanométrique dans les nanostructures.

Il a pour objectif la réalisation de dispositifs thermoélectriques obtenus par nanostructuration de matériaux, en vue d'augmenter le rendement de conversion d'énergie par rapport aux dispositifs existants. Cette performance rend compatible l'utilisation de ces dispositifs pour l'électronique nomade (automobile, vêtements intelligents, implants cérébraux, pacemakers...) ainsi que pour le refroidissement des composants électroniques, paramètre déterminant pour le développement futur de ces composants.

Ainsi, différentes nanostructures, telles des superréseaux ou nanoagrégats, ont été développées sous différentes géométries. Des caractérisations de contraintes ont permis d'optimiser la qualité des matériaux, et les premières mesures de propriétés thermiques ont permis de justifier l'intérêt croissant des nanostructures. Enfin, une étude de modélisation a permis de simuler les meilleures options géométriques afin d'introduire ces matériaux dans des dispositifs de la façon la plus performante.

Développement de matériaux nanostructurés

• Croissance de nanostructures en superréseaux Si/SiGe

L'utilisation de superréseaux (structure 2D) pour la thermoélectricité permet une diffusion des phonons aux interfaces des couches, si l'épaisseur des couches est plus petite que le libre parcours moyen des phonons.

- croissance réalisée par méthode CVD (Dépôt Chimique en phase Vapeur) avec dopage in-situ ;
- réalisation de superréseaux de différentes natures cristallines (mono ou polycristallines, voir Fig 1) ;
- élaboration de nanostructures de différentes périodes (voir Fig 2) afin d'observer l'influence de l'épaisseur des monocouches et du nombre d'interfaces sur le libre parcours moyen des phonons, et donc leur diffusion.

• Croissance de nanoagrégats de Ge

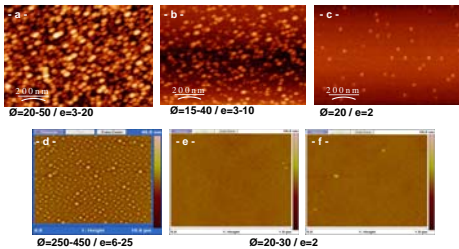


Fig 3 - Images AFM (Microscope à Force Atomique) de nanoagrégats de Ge déposés sur substrat Si à 750°C (a, b, c) et 1000°C (d, e, f).

• Croissance de superréseaux de quantum dots

Une fois la réalisation de quantum dots maîtrisée en surface, l'objectif consiste à effectuer leur croissance dans le volume, c'est-à-dire à effectuer un empilement de couches de quantum dots dans une matrice de Si ou SiGe. Cette nouvelle nanostructuration est appelée superréseaux de quantum dots (QDSL : Quantum Dots SuperLattices). Il s'agit d'un superréseau optimisé permettant de diffuser une plus grande gamme de phonons : en effet, dans un matériau classique, seuls les phonons de faible longueur d'onde sont diffusés par les impuretés ; l'ajout de nanoagrégats permet de diffuser de plus les phonons de grande longueur d'onde, et donc de diminuer plus significativement la conductivité thermique.

- réalisation de superréseaux de quantum dots de différentes natures cristallines (mono ou polycristallines) afin d'étudier la différence de leurs performances ;
- croissance de superréseaux polycristallins (voir Fig 4) de quantum dots de germanium dans une matrice SiGe déposés sur substrat Si par méthode CVD ;
- croissance de superréseaux monocristallins (voir Fig 5) de quantum dots de germanium dans une matrice Si déposés sur substrat Si par méthode CVD ;
- contrôle de la densité et de la taille des nanoagrégats (\varnothing_{poly} : 20 à 250 nm / e_{poly} : 5 à 30 nm et \varnothing_{mono} : 30 à 40 nm / e_{mono} : 0.5 à 3 nm) par imagerie MET et corrélation avec les analyses AFM ;
- élaboration de QDSL de différentes périodes.

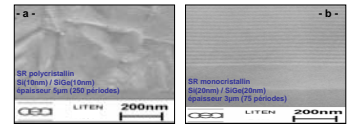


Fig 1 - Images MEB (Microscope Electronique à Balayage) de superréseaux mono (a) et polycristallins (b).

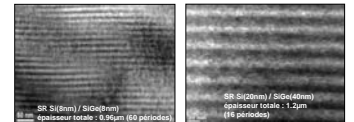


Fig 2 - Images MET (Microscope Electronique à Transmission) de superréseaux de différentes périodes.

L'introduction de "quantum dots" (structure 0D) dans des superréseaux permet l'augmentation du facteur de mérite ZT grâce à une augmentation de la mobilité des porteurs et du coefficient Seebeck¹ et à une diminution de la conductivité thermique du réseau due à une diffusion supplémentaire des phonons acoustiques et à un confinement quantique des porteurs².

- croissance de nanoagrégats de germanium déposés sur substrat Si par méthode CVD ;
- procédés de croissance à différentes températures (de 600°C à 1000°C) ;
- contrôle de la densité et de la taille des nanoagrégats (\varnothing de 15 à 700 nm et e de 2 à 90 nm) par mesures AFM (voir Fig 3).

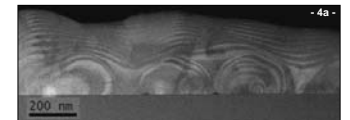


Fig 4 - Images MET (a-b-c) de superréseaux polycristallins mettant en évidence l'alternance de couches SiGe et de quantum dots de Ge.

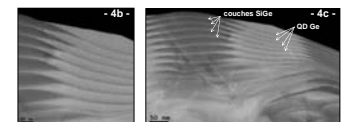


Fig 5 - Images MET (a-b) de superréseaux monocristallins mettant en évidence l'alternance de couches Si et de quantum dots de Ge avec corrélation des analyses AFM (c).

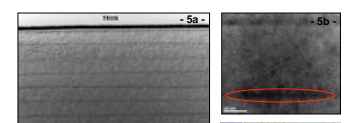


Fig 6 - Représentation schématique du système et définition des paramètres utilisés pour la modélisation.

Équations de base :

$$P_{cond} + P_{Seeb} + P_{Joule} + P_{rad} = P_{diff}$$

$$\lambda(\tau)(T_1 - T_2)(\tau)A_c + NST_c(\tau)I + \frac{1}{2}R_{th}I^2 = (T_1(\tau) - T_2(\tau))hA_{th}$$

$$I = \frac{S(T_1 - T_2)(\tau) \times \tau}{4 \times FN^2}$$

$$Q_{gen} = \frac{S^2(T_1 - T_2)(\tau) \times \tau}{4 \times A_{th} \times F}$$

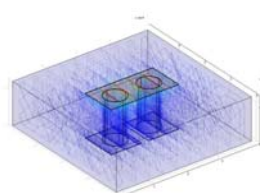


Fig 7 - Utilisation du logiciel de modélisation Comsol Multiphysics pour valider les optimisations de design des modules.

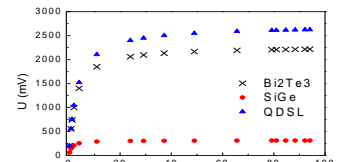


Fig 8 - Évolution de la tension U et de la densité de puissance Qgen récupérées en fonction du taux de remplissage du module, pour différents matériaux, mettant en évidence l'intérêt des QDSL.

Modélisation technologique

L'objectif consiste à répondre de la manière la plus précise possible à un cahier des charges proposé par un industriel, en développant un modèle tenant compte simultanément des effets électriques et thermiques, et définissant une géométrie de modules la plus performante possible (voir Fig 6). Dans cette optique, un nouveau paramètre τ a été défini : le taux de matériaux thermoélectriques (TMR : Thermoelectric Materials Ratio). De plus, les résultats obtenus par simulation sont corrélés avec des études de modélisation effectuées à partir du logiciel Comsol Multiphysics (voir Fig 7). Les simulations montrent bien l'influence du nouveau paramètre TMR, notamment sur les performances électriques des modules (voir Fig 8), et soulignent l'intérêt des matériaux nanostructurés tels que les QDSL : les densités de puissance estimées permettent l'alimentation de différents types de capteurs (température, pression...).

