

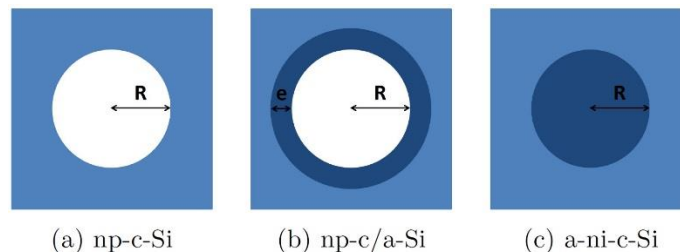
Conductivité Thermique de nano-pores et nano-inclusions du Silicium par Dynamique Moléculaire

M. Verdier^{1,2}, K. Termentzidis^{1,2}, D.Lacroix^{1,2}

¹ Université de Lorraine, LEMTA, UMR 7563, Vandœuvre-lès-Nancy, F-54500, France

² CNRS, LEMTA, UMR 7563, Vandœuvre-lès-Nancy, F-54500, France

Le Silicium (Si) nano-poreux présente un intérêt en tant que matériau pour la thermoélectricité car sa nano-structuration conduit généralement à une conductivité thermique faible tandis que la conductivité électrique est préservée. Il en résulte une figure de mérite potentiellement élevée. Toutefois, en raison de la très petite taille des pores, l'élaboration expérimentale de structures nano-poreuses n'est pas toujours bien maîtrisée avec les moyens technologiques actuellement disponibles. Elle s'accompagne souvent d'une amorphisation de la structure cristalline du Silicium dans la zone proche du pore. L'effet de cette couche amorphe sur les propriétés thermiques est mal connu. C'est pourquoi, à l'aide de la dynamique moléculaire, nous avons simulé le comportement du Silicium et en avons extrait la conductivité thermique pour plusieurs configurations (voir figure) : Si nano-poreux (a), Si nano-poreux présentant une coquille de Si amorphe d'épaisseur variable autour du pore (b) et Si cristallin contenant des inclusions de Si amorphe (c).



Représentation des systèmes modélisés.

Code couleur : blanc = vide, bleu foncé = Si amorphe, bleu clair = Si cristallin

La méthode EMD (Equilibrium Molecular Dynamics) et le potentiel de Stillinger-Weber ont été sélectionnés pour calculer la conductivité thermique. Afin de retrouver les propriétés d'un matériau macroscopique, des conditions périodiques sont appliquées sur chaque frontière de la boîte de simulation cubique de dimension $L = 5,43 \text{ nm}$. Les pores et inclusions modélisés sont tous de forme sphérique, leur diamètre est compris entre $0,5$ et $6,5 \text{ nm}$. Nos résultats montrent que l'amorphisation du Silicium autour des pores est un facteur supplémentaire limitant la conductivité. De plus, la comparaison entre les systèmes (a) et (c) semble indiquer que les inclusions de Si amorphe peuvent jouer le même rôle que les pores dans la réduction de la conductivité. Un paramètre clé unissant les trois configurations sous une même loi vient confirmer cette hypothèse.