

Méta-matériaux en silicium aléatoirement structuré pour la gestion et la conversion de rayonnement thermique

Directrice : Elodie Richalot ; Encadrant.e.s : Maha Ben Rhouma, Armande
Hervé, Elyes Nefzaoui
Laboratoire ESYCOM / ED MSTIC

Contexte

Le changement climatique est sans aucun doute l'un des défis majeurs de l'histoire de l'humanité et le défi du XXI^e siècle. Il est la conséquence d'une utilisation massive de combustibles fossiles à base de carbone au cours des deux derniers siècles. Le secteur de l'énergie est donc au cœur de ce problème et une grande partie de la solution. D'une part, environ 90 % de l'utilisation mondiale d'énergie implique la production et la manipulation de chaleur. D'autre part, l'efficacité énergétique en général, et la récupération d'énergie en particulier comme moyen d'accroître l'efficacité énergétique, ainsi que l'utilisation d'énergie bas carbone, sont deux voies essentielles vers la décarbonisation. À cette fin, il existe plusieurs technologies de récupération de l'énergie thermique, telles que la thermoélectricité, le solaire thermique, le thermophotovoltaïque ou encore le refroidissement passif. Beaucoup de ces technologies souffrent encore de faibles rendements et leur amélioration nécessite la conception et la fabrication de nouveaux matériaux avec des propriétés thermiques et de transport d'énergie optimisées pour chaque application afin d'aller au-delà de ce qui peut être réalisé en utilisant des matériaux naturels conventionnels.

Le rayonnement thermique est l'un des trois modes de transfert de chaleur. Il permet l'émission et le transfert d'énergie entre objets à des températures finies sous forme et par l'intermédiaire d'ondes électromagnétiques. Le rayonnement thermique de corps quelconques est généralement isotrope, large bande et non polarisé. Il est cependant possible de créer des matériaux ou des objets, appelés méta-matériaux, possédant des propriétés sélectives angulairement ou spectralement non atteintes par les matériaux naturels. Cela en fait de bons candidats pour de multiples applications de conversion ou de récupération d'énergie thermique telles que le thermophotovoltaïque (TPV) ou le refroidissement radiatif passif [1]–[3].

Des chercheurs du laboratoire ESYCOM mènent depuis plusieurs années des travaux de recherche sur une classe particulière de ces métamatériaux constitués de silicium aléatoirement structuré en surface à l'échelle sub-micrométrique et nommé Black Silicon (BSi) en raison de sa forte absorptivité de le domaine du visible. Quatre thèses ont déjà été menées au sein du laboratoire afin de comprendre la formation de ce matériau [4]–[6], l'effet de différents paramètres structuraux et de composition sur les propriétés radiatives [7], [8] et d'explorer son utilisation pour l'émission de rayonnement thermique [9] ou encore pour la récupération d'énergie solaire [10]. Ces travaux s'inscrivent dans les thèmes de recherche du laboratoire micro-énergie et propagation en milieux complexes.

Nous avons récemment montré que l'ajustement des propriétés structurales et du dopage permet d'augmenter l'émissivité de ce matériau et d'étendre sa gamme spectrale à forte émissivité dans le moyen infrarouge [7]. Nous avons également montré que ce matériau peut être utilisé avec succès pour des applications de récupération d'énergie solaire nécessitant une forte émissivité / absorptivité dans la gamme spectrale utile du rayonnement solaire [10]. Ces réalisations récentes laissent entrevoir un fort potentiel d'utilisation du BSi dans d'autres applications telles que le TPV ou le refroidissement radiatif à condition de pouvoir restreindre sa gamme spectrale de forte émissivité en fonction de l'application visée : aux courtes longueurs d'onde (jusqu'à 2 voire 3 micromètres) pour être utilisé comme émetteur TPV ou bien à la fenêtre de transparence atmosphérique (entre 8 et 13

micromètres) si l'on souhaite l'utiliser pour le refroidissement radiatif diurne. Nous avons d'ailleurs récemment montré qu'en l'état actuel des choses, le BSi est un très bon matériau pour le refroidissement radiatif nocturne [11].

Sujet de la thèse et travail demandé

Nous nous intéresserons donc dans le cadre de cette thèse à une catégorie particulière de méta-matériaux à base de silicium aléatoirement micro et nano-structuré, à savoir le Black Silicon (BSi), étudié au laboratoire depuis une quinzaine d'années.

Contrôler finement la gamme spectrale de forte émissivité de ce matériau (BSi) en fonction de l'application (TPV ou refroidissement radiatif) est le principal objectif de cette thèse. Cela passera par des simulations électromagnétiques, la fabrication d'échantillons et leur caractérisation à température ambiante et haute température.

Dans un premier temps, il s'agira d'explorer et de simuler numériquement différentes configurations pouvant répondre aux problématiques et à la sélectivité désirée, en considérant notamment l'association de différents méta-matériaux : multi-couches, réseaux de surface, association de différents matériaux possédant des propriétés spectrales intéressantes du type Black Silicon/Graphène ainsi que différentes combinaisons des catégories précédentes afin d'ajuster leur propriétés radiatives (émissivité, réflectivité).

Les résultats obtenus sur le Black Silicon pendant les thèses de Sreyash Sarkar (soutenue en décembre 2022) et de Lan Gao (soutenue en février 2023) seront un point de départ et d'appui pour cette nouvelle thèse. La première portait sur les propriétés radiatives du Black Silicon dans l'infrarouge alors que la seconde s'est focalisée sur son utilisation pour la récupération d'énergie solaire. Des développements supplémentaires sont indispensables pour l'adapter à des applications telles que le refroidissement radiatif ou encore la conversion thermo-photovoltaïque.

Ces simulations/modélisations se feront en se basant sur les équations de Maxwell qui rendent parfaitement compte de la physique en jeu dans les différents dispositifs visés dans la thèse. Nous utiliserons dans un premier temps les méthodes dites « modales » telles que la FMM (Fourier Modal Method) et la FMM-ASR (FMM équipée du concept « Adaptive Spatial Resolution ») [12,13,14], pour lesquelles l'équipe encadrante possède déjà une expertise [15]. Ces méthodes sont reconnues comme les outils numériques les plus efficaces et performants pour modéliser des nano-structures périodiques lamellaires qui composent souvent les métamatériaux. Pour modéliser des réseaux présentant une géométrie relativement complexe (non lamellaire), ces méthodes peuvent être exploitées en procédant à un découpage en tranches de la structure, c'est la "staircase approximation". Une autre piste intéressante est d'utiliser la méthode dite "de Chandezon" (Méthode-C) qui consiste à résoudre les équations de Maxwell dans un système de coordonnées adaptées à la surface diffractante. Son intérêt réside dans l'écriture simple et naturelle des conditions aux limites.

Dans le cas des structures sub-longueur d'onde, des modèles théoriques approchés peuvent être développés en utilisant la méthode des milieux effectifs couplée à l'utilisation de la méthode de la matrice de transfert (matrice T) ou de diffusion (matrice S) en adaptant la « staircase approximation » ; cette approche a déjà été développée et utilisée au sein de l'équipe [7]. Ces modèles peuvent être complétés par des simulations basées sur la méthode des éléments finis pour tenir compte plus précisément du caractère désordonné de la structuration des matériaux considérés [16].

Les métamatériaux à fort potentiel pourront ensuite être optimisés par l'utilisation de techniques d'apprentissage automatique (réseaux de neurones artificiels, apprentissage par renforcement, etc.) en fonction de l'application visée couplées aux méthodes de calcul électromagnétiques mentionnées ci-dessus.

Les meilleures structures candidates seront ensuite fabriquées dans les salles blanches de ESIEE Paris en s'appuyant sur l'expertise accumulée sur le sujet depuis une quinzaine d'années. Leurs propriétés radiatives seront caractérisées sur le banc de spectroscopie et microscopie infrarouge à transformée de Fourier (FTIR) récemment développé au sein des plateformes de caractérisation en micro-énergie du laboratoire basées à ESIEE Paris. Des développements sont en cours pour étendre ces moyens de caractérisation au-delà de la température ambiante vers les hautes températures. Ces développements nouveaux permettront de caractériser les métamatériaux étudiés à haute température ce qui est particulièrement pertinent pour des applications de récupération d'énergie thermique telles que le TPV.

Cette thèse bénéficiera de collaborations déjà établies du laboratoire ESYCOM avec d'autres laboratoires en France (Institut Pprime de Poitiers) ou des collaborations naissantes (CEMHTI à Orléans), notamment sur la caractérisation à haute température des propriétés électromagnétiques

(permittivité diélectrique) des matériaux micro et nano-structurés. Elle permettra également de renforcer les contributions du laboratoire à l'activité de la communauté nationale des nanomatériaux pour l'énergie à travers le GDR NAME (NANOmaterials for Energy) et du groupe projet CNRS TREE (Thermal Radiation to Electric Energy conversion). Le doctorant bénéficiera par conséquent d'un environnement dynamique avec de nombreuses possibilités de collaboration.

Profil recherché

Le/la candidat(e) devra avoir un profil de physicien(ne) et des connaissances en électromagnétisme et optique et/ou thermodynamique, énergétique et transferts thermiques. Des connaissances en langage Matlab, en méthodes de caractérisation expérimentale, ainsi qu'une expérience en simulation numérique avec des logiciels du type COMSOL multiphysics / Ansys / HFSS seront un plus. Il (elle) doit être motivé(e) pour mener des travaux à la fois théoriques et expérimentaux (instrumentation, mesure, conception et analyse). Une bonne maîtrise de l'anglais écrit/parlé est indispensable, ainsi qu'une bonne aptitude au travail en équipe dans un environnement international. Une attention particulière sera accordée à la maturité et l'autonomie du (de la) candidat(e) et à sa curiosité scientifique.

Contacts

Direction de la thèse :

Elodie RICHALOT <elodie.richalot-taisne@univ-eiffel.fr>

Encadrement :

Maha BEN RHOUMA <maha.ben-rhouma@univ-eiffel.fr>, Armande HERVE <armande.herve@esiee.fr>, Elyes NEFZAOUI <elyes.nefzaoui@esiee.fr>

Références

- [1] A. P. Raman, M. A. Anoma, L. Zhu, E. Rephaeli, et S. Fan, « Passive radiative cooling below ambient air temperature under direct sunlight », *Nature*, vol. 515, n° 7528, p. 540-544, nov. 2014, doi: 10.1038/nature13883.
- [2] G. Perrakis, A. C. Tasolamprou, G. Kenanakis, E. N. Economou, S. Tzortzakis, et M. Kafesaki, « Combined nano and micro structuring for enhanced radiative cooling and efficiency of photovoltaic cells », *Sci. Rep.*, vol. 11, n° 1, Art. n° 1, juin 2021, doi: 10.1038/s41598-021-91061-1.
- [3] A. Datas et R. Vaillon, « Chapter 11 - Thermophotovoltaic energy conversion », in *Ultra-High Temperature Thermal Energy Storage, Transfer and Conversion*, A. Datas, Éd. Woodhead Publishing, 2021, p. 285-308. doi: 10.1016/B978-0-12-819955-8.00011-9.
- [4] K. N. Nguyen *et al.*, « Black silicon with sub-percent reflectivity: Influence of the 3D texturization geometry », in *2011 16th International Solid-State Sensors, Actuators and Microsystems Conference*, juin 2011, p. 354-357. doi: 10.1109/TRANSDUCERS.2011.5969470.
- [5] K. N. Nguyen *et al.*, « Study of black silicon obtained by cryogenic plasma etching: approach to achieve the hot spot of a thermoelectric energy harvester », *Microsyst. Technol.*, vol. 18, n° 11, p. 1807-1814, mars 2012, doi: 10.1007/s00542-012-1486-0.
- [6] D. Abi Saab, P. Basset, M. J. Pierotti, M. L. Trawick, et D. E. Angelescu, « Static and Dynamic Aspects of Black Silicon Formation », *Phys. Rev. Lett.*, vol. 113, n° 26, p. 265502, déc. 2014, doi: 10.1103/PhysRevLett.113.265502.
- [7] S. Sarkar *et al.*, « Black Silicon Revisited as an Ultrabroadband Perfect Infrared Absorber over 20 μm Wavelength Range », *Adv. Photonics Res.*, p. 2200223, 2022.
- [8] S. Sarkar, E. Nefzaoui, G. Hamaoui, F. Marty, P. Basset, et T. Bourouina, « Wideband mid infrared absorber using surface doped black silicon », *Appl. Phys. Lett.*, vol. 121, n° 23, p. 231703, déc. 2022, doi: 10.1063/5.0117289.
- [9] S. Sarkar *et al.*, « NIR and MIR Absorption of Ultra-Black Silicon (UBS) Application To High Emissivity, All-Silicon, Light Source », *2019 IEEE 32nd International Conference on Micro Electro Mechanical Systems (NEMS)*, 2019, pp. 860-862, doi : 10.1109/MEMSYS.2019.8870641.
- [10] L. Gao *et al.*, « Two-dimensional metamaterials as meta-foams for optimized surface-enhanced solar steam generation », *Sol. Energy Mater. Sol. Cells*, vol. 243, p. 111793, 2022.
- [11] A. Hervé *et al.*, « Nighttime radiative cooling using black silicon », présenté à C'Nano 2023

(soumis), mars 2023.

- [12] M. G. Moharam and T. K. Gaylord. "Rigorous coupled-wave analysis of planar grating diffraction". J. Opt. Soc. Am., 71(7) :811–818, Jul 1981.
- [13] G. Granet and B. Guizal." Efficient implementation of the coupled-wave method for metallic lamellar gratings in Tm polarization". J. Opt. Soc. Am. A, 13(5) :1019–1023, May 1996
- [14] B. Guizal, H. Yala, and D. Felbacq. Reformulation of the eigenvalue problem in the fourier modal method with spatial adaptive resolution. Opt. Lett., 34(18):2790– 2792, Sep 2009
- [15] M. Ben Rhouma," Graphene based 1D photonic crystals via the Fourier Modal Method", Superlattices and Microstructures, Vol. 111, pp : 466-474, November (2017).
- [16] D. Abi-Saab, S. Mostarshedi, P. Basset, S. Protat, D. Angelescu, E. Richalot, "Effect of black silicon disordered structures distribution on its wideband reduced reflectance", Mater. Res. Express 1 (2014) 045045.

***Le laboratoire ESYCOM** s'inscrit dans les domaines de l'ingénierie des systèmes de communication, des capteurs et des microsystèmes pour la ville, l'environnement et la personne.*

Les thèmes abordés sont plus spécifiquement :

- *les antennes et propagation en milieux complexes, les composants photoniques - micro-ondes ;*
- *les microsystèmes pour l'analyse de l'environnement et la dépollution, pour la santé et l'interface avec le vivant ;*
- *les micro-dispositifs de récupération d'énergie ambiante mécanique, thermique ou électromagnétique.*