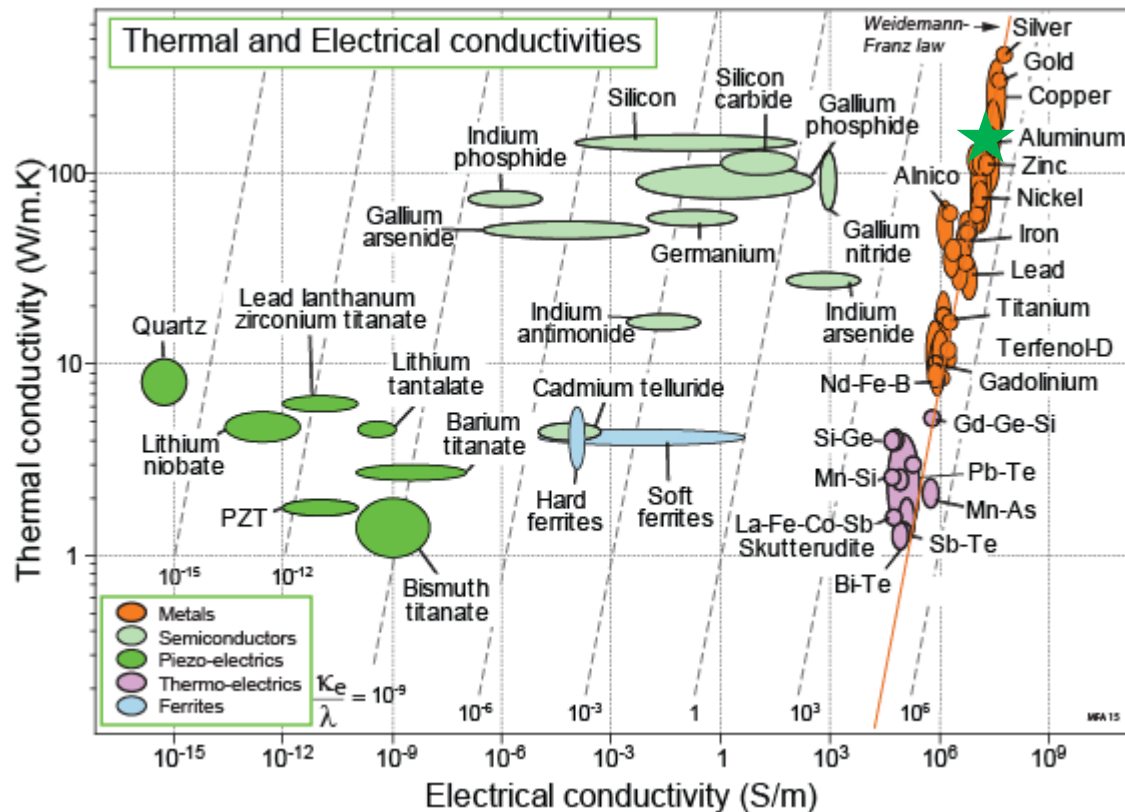


Conduction thermique dans les métaux

Loi de Weidemann-Franz $\frac{k}{\sigma T} = L$

Où $L = 2.44 \times 10^{-8} \text{ } \Omega\text{W/K}^2$ est la constante de Lorentz



Exercice (5 minutes)

Calculez la conductivité thermique d'un métal, en supposant :

$$\tau = 3 \cdot 10^{-14} \text{ s}$$

$$T = 300 \text{ K}$$

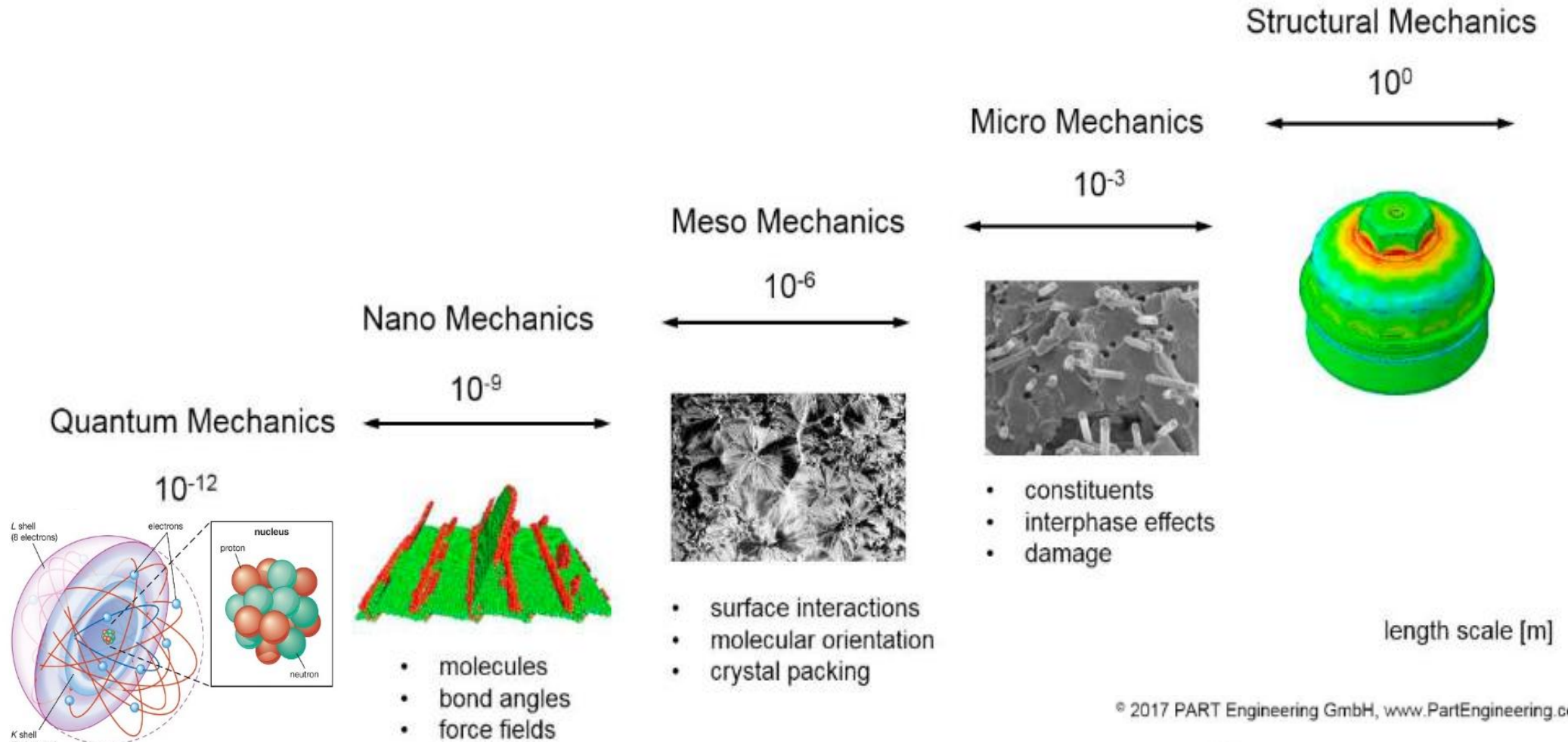
$$N = 2.5 \cdot 10^{22} \text{ cm}^{-3}$$

			Unité
Charge électron	e	$1.602 \cdot 10^{-19}$	C
Masse électron	m	$9.11 \cdot 10^{-31}$	kg

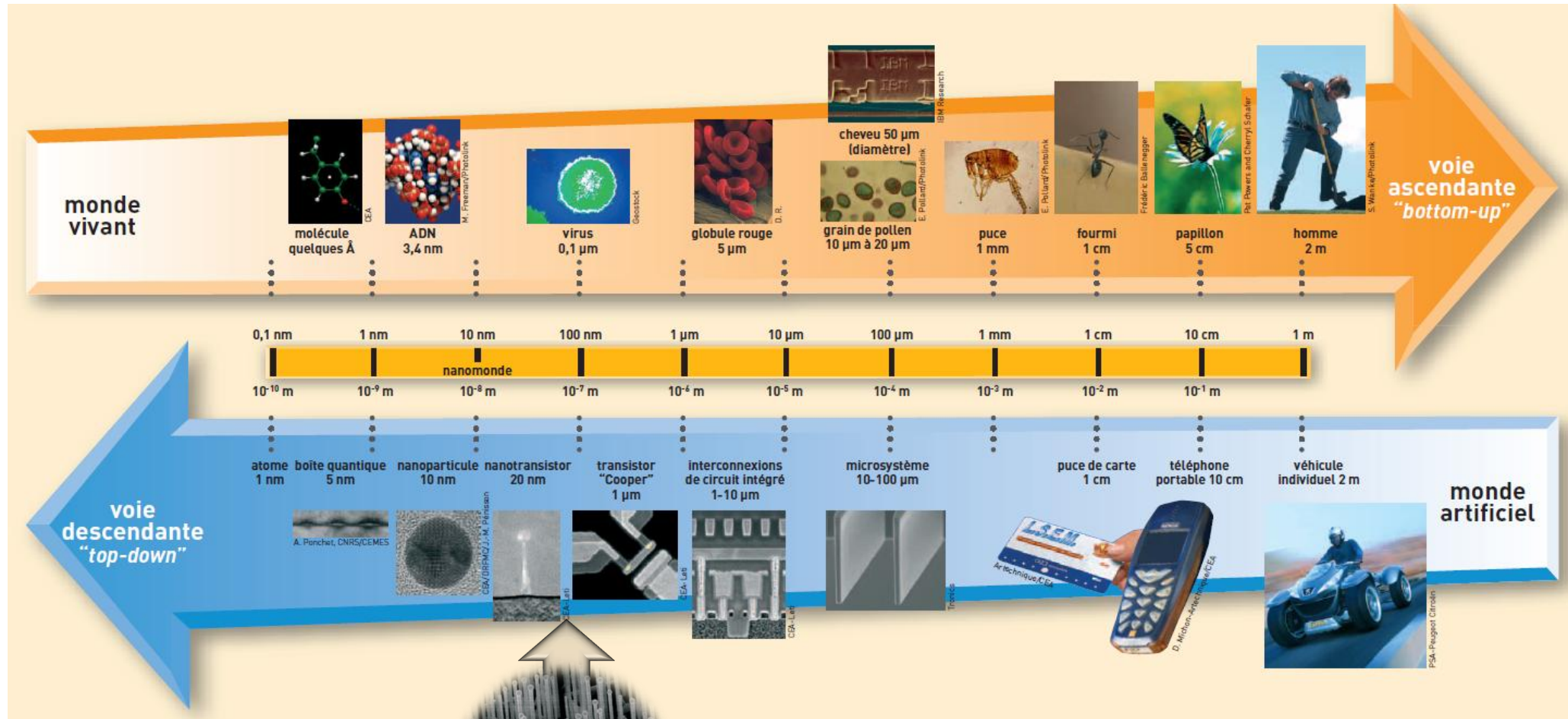
Les matériaux nano

- Rapport surface/volume et la dimensionnalité
- Absorption et émission de lumière de points quantiques
- Effet plasmonique dans les nanoparticules
- Conductivité électrique dans les nanofils
- Conductivité thermique du graphène

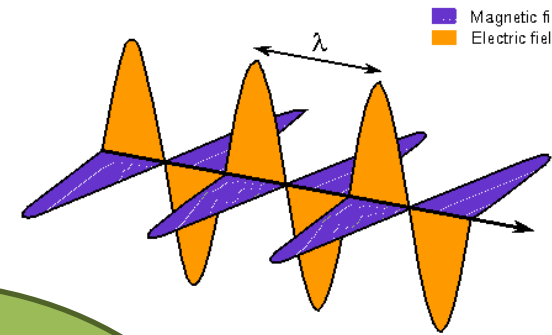
Les échelles du monde



Qu'est-ce qui définit nano?



Qu'est-ce qui définit nano?



Propriétés électroniques

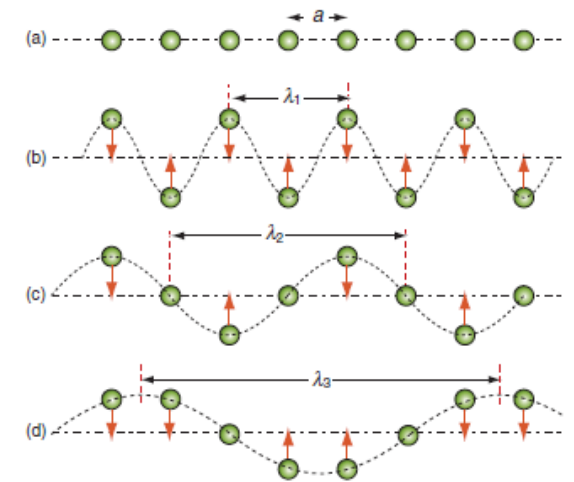
Libre parcours moyen des e^- et h^+ :
de 0.5 nm à quelque μm

Etats de surface

Propriétés optiques

Longueur d'onde:
De quelque 10 nm à quelque μm

Etats de surface

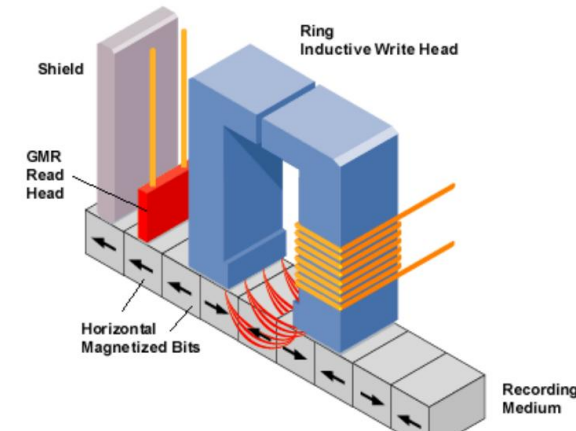
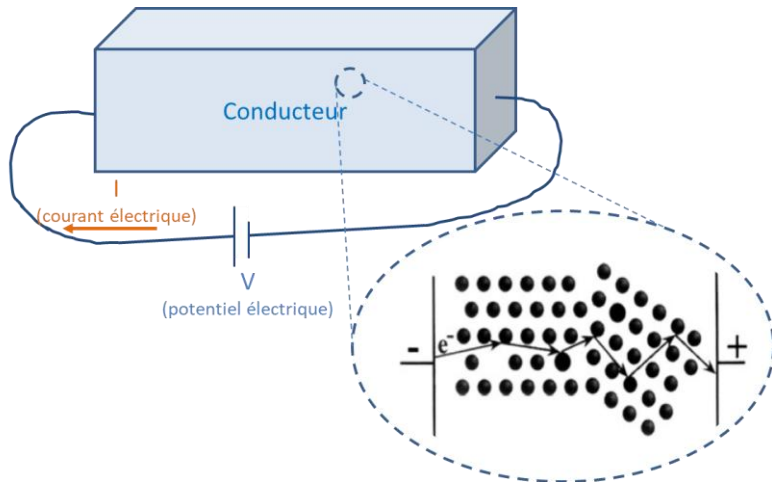


Propriétés thermiques

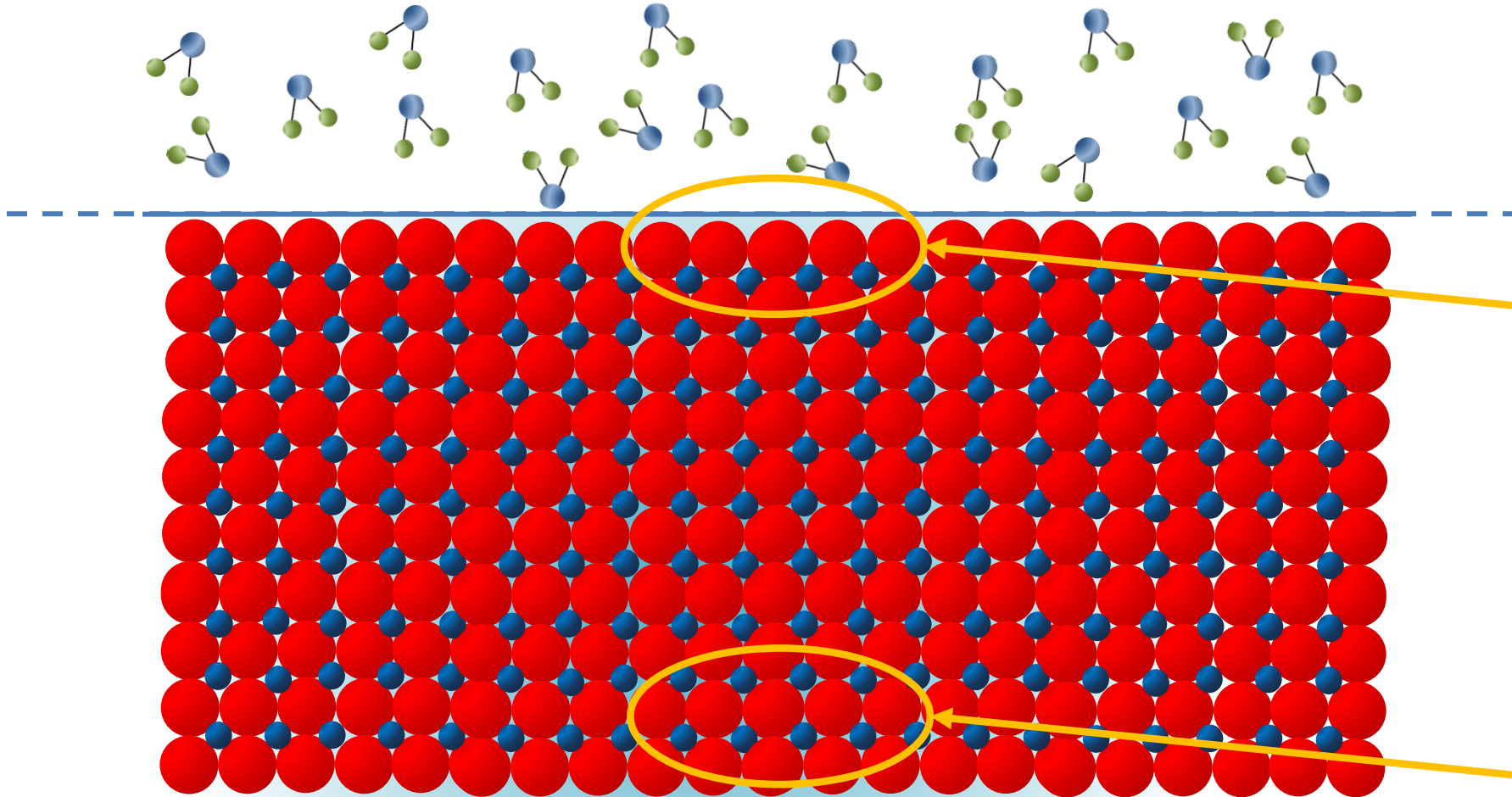
Longueur d'onde
caractéristique des phonons :
10-100 nm

Propriétés magnétiques

Épaisseur de la zone de
démagnétisation en surface
 $q \approx 10 \text{ nm}$



Pourquoi s'intéresser à la surface?



Surface/Interface

- Interruption de la périodicité 3D
- Liaisons chimiques incomplètes
- Environnement variable

Bulk / Volume

- Périodicité 3D
- Liaisons chimiques complètes
- Environnement bien défini

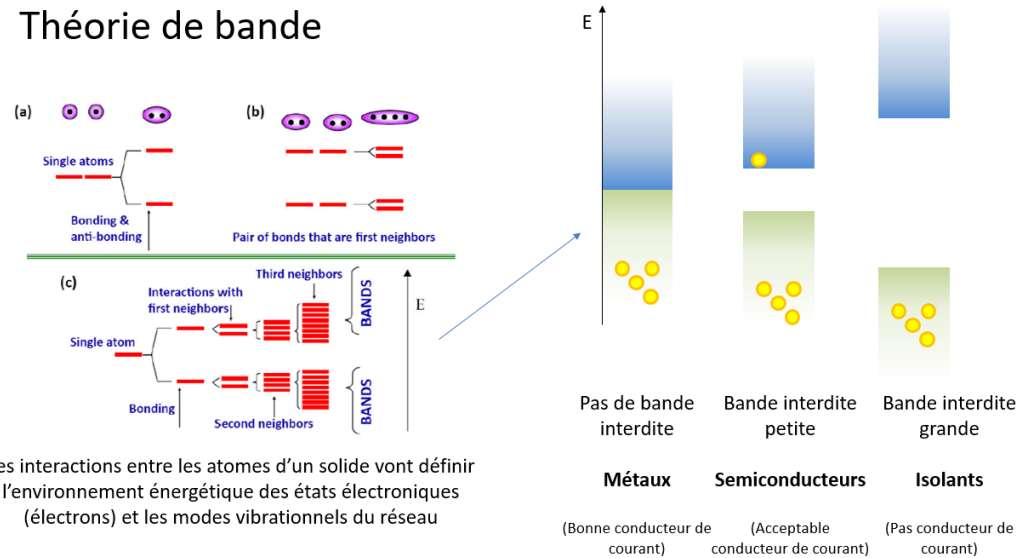
Changement près de surface

Distorsion des cristaux

		primitif	bases-centré	centré	faces-centré
triclinique					
monoclinique		$\beta \neq 90^\circ$ $a \neq c$	$\beta \neq 90^\circ$ $a \neq c$		
orthorhombique		$a \neq b \neq c$	$a \neq b \neq c$	$a \neq b \neq c$	$a \neq b \neq c$
tétragonal		$a \neq c$		$a \neq c$	
hexagonal	rhombohédral	$\alpha \neq 90^\circ$			
	hexagonal	$\gamma = 120^\circ$			
cubique		$a = b = c$		$a = b = c$	$a = b = c$

Variation des niveau énergétique

Théorie de bande



Surface/Interface

- Interruption de la périodicité 3D
- Liaisons chimiques incomplètes
- Environnement variable

Bulk / Volume

- Périodicité 3D
- Liaisons chimiques complètes
- Environnement bien défini

Changement près de surface

Pouvez-vous trouver un exemple de phénomène lié à ces différences entre surface et volume ?

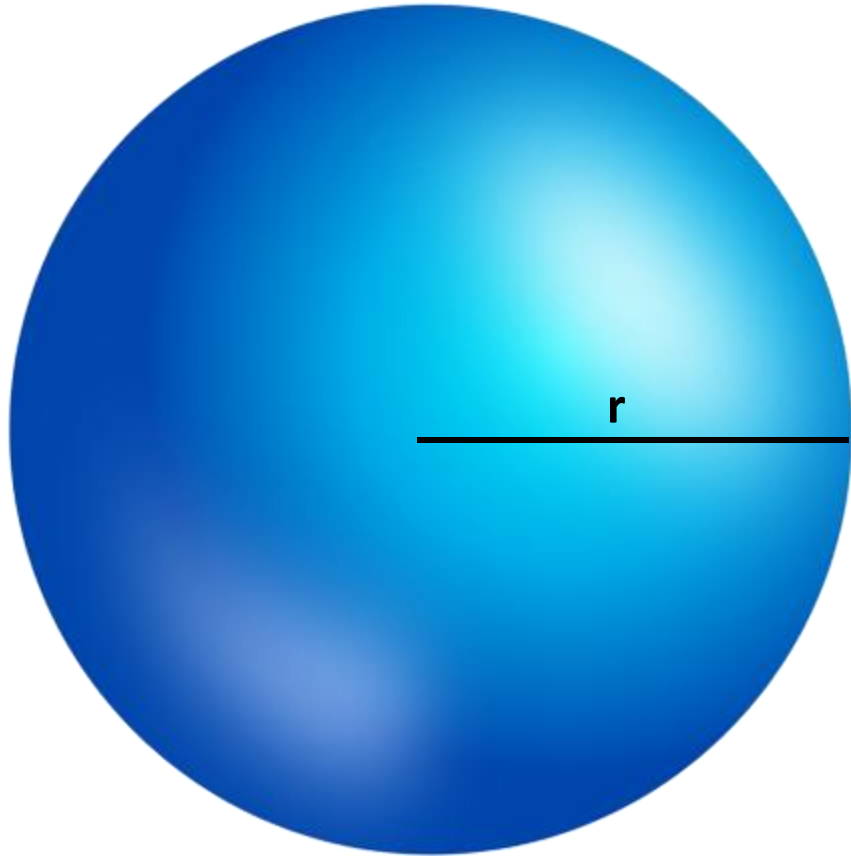
Surface/Interface

- Interruption de la périodicité 3D
- Liaisons chimiques incomplètes
- Environnement variable

Bulk / Volume

- Périodicité 3D
- Liaisons chimiques complètes
- Environnement bien défini

Rapport surface/volume



Pour une sphère:

$$V = \frac{4}{3}\pi r^3$$

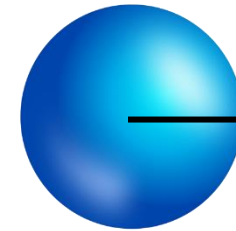
$$S = 4\pi r^2$$

Donc:

$$\frac{S}{V} = \frac{3}{r} \propto \frac{1}{r}$$

Lorsque la dimension caractéristique devient plus petite, le rapport entre la surface et le volume devient plus grand

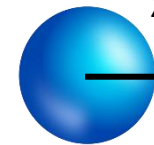
● x 4'200



r = ~ 10 atomes

○ 1'250 atomes

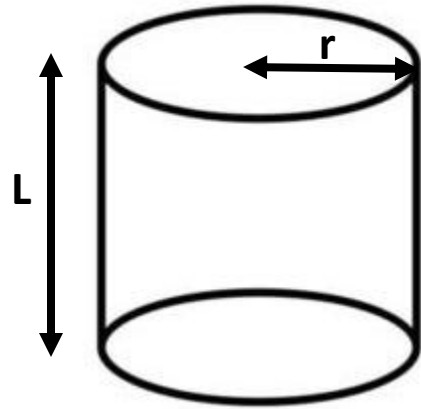
x 8



r = ~ 5 atomes

○ 2'500 atomes

Rapport surface/volume et géométrie



$L \gg r$

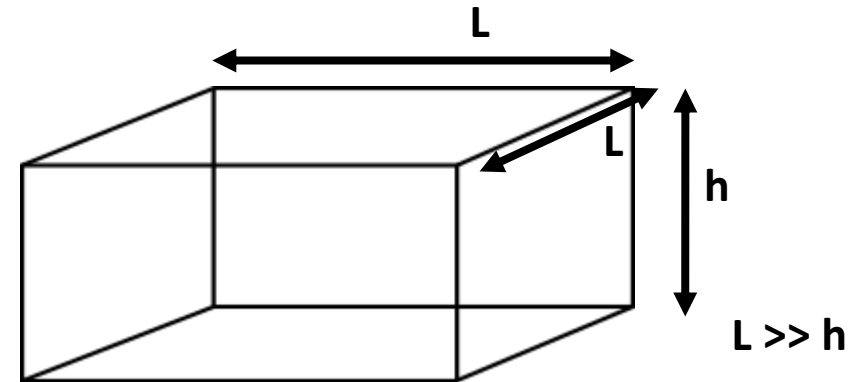
Pour un cylindre:

$$V = \pi L r^2$$

$$S = 2\pi r * (r + L)$$

Donc:

$$\frac{S}{V} = \frac{2(r + L)}{rL} \sim \frac{2}{r} \propto \frac{1}{r}$$



$L \gg h$

Pour une tranche fine:

$$V = hL^2$$

$$S = 4hL + 2L^2$$

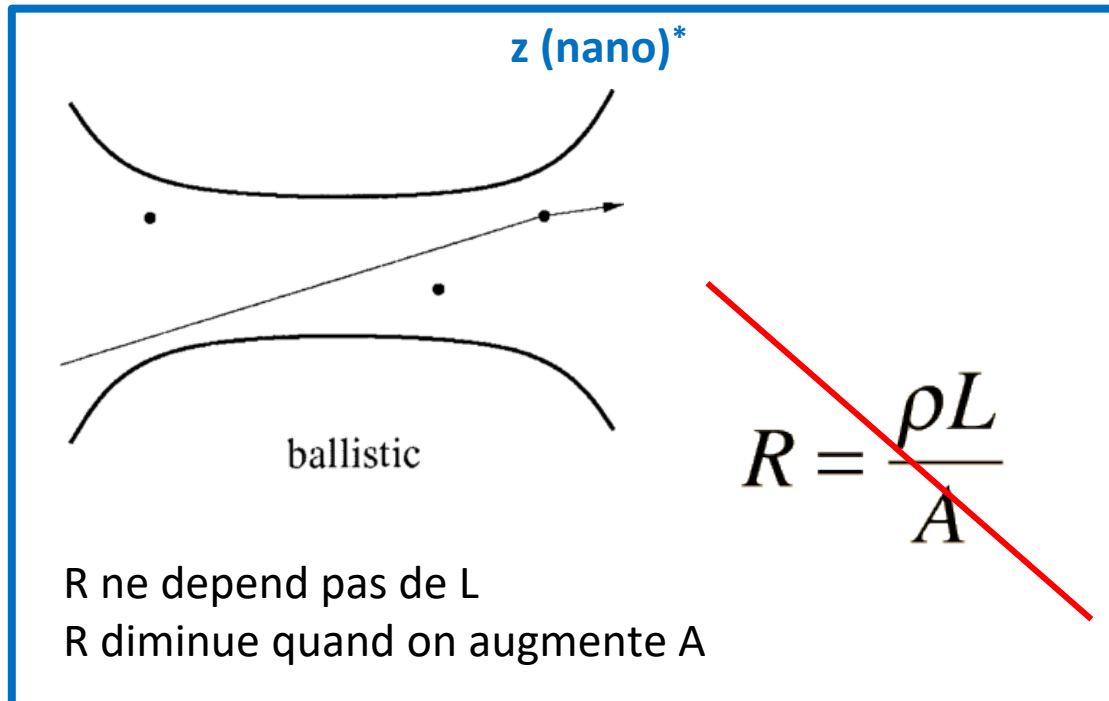
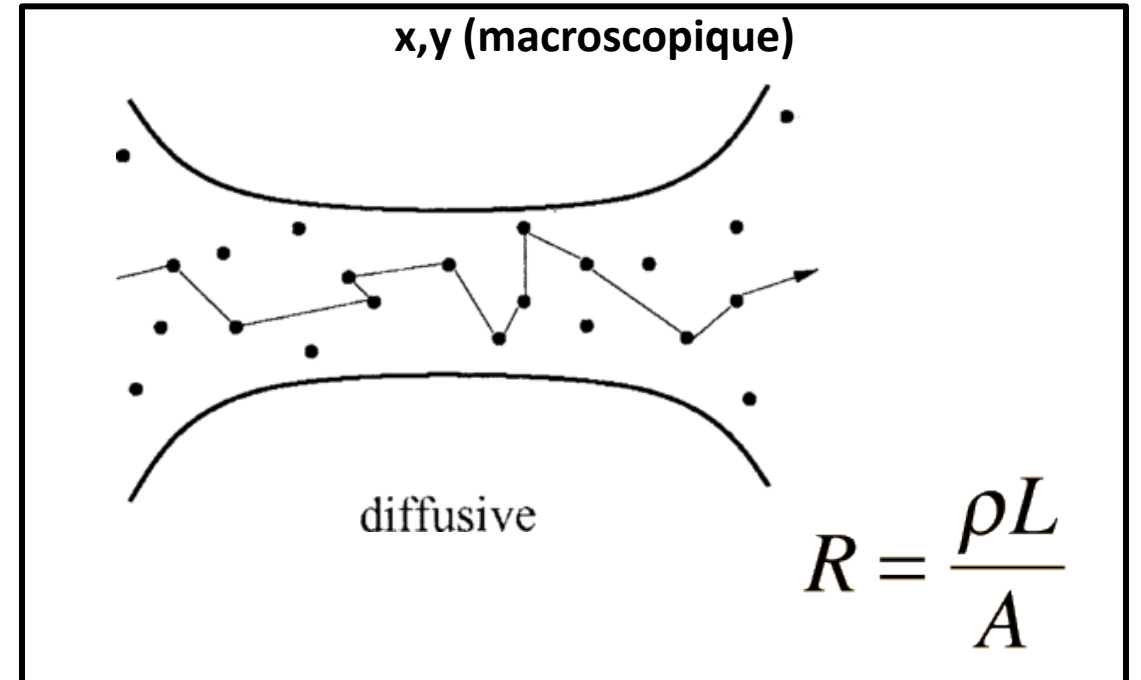
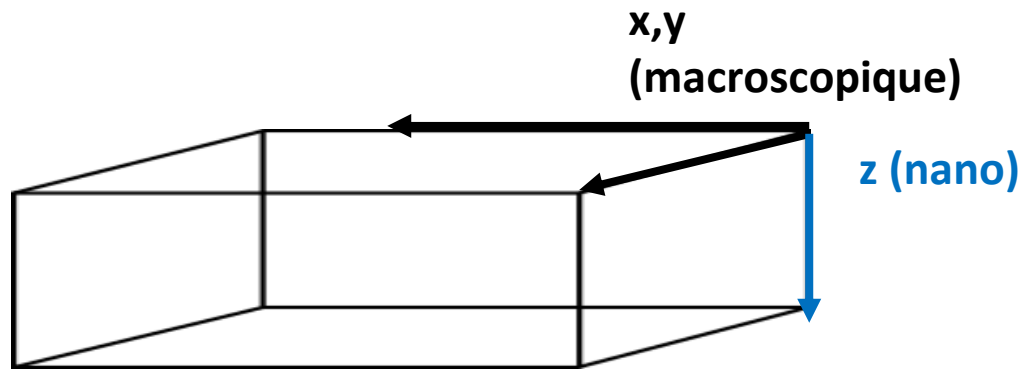
Donc:

$$\frac{S}{V} = \frac{2(2h + L)}{hL} \sim \frac{2}{h} \propto \frac{1}{h}$$

La géométrie de l'objet n'a pas un impact significatif sur le rapport surface/volume, mais elle a une grande influence sur la périodicité des cristaux dans certaines directions et donc sur les propriétés fonctionnelles.

En fonction du nombre de dimensions réduites, les nanomatériaux peuvent être classés en 0D, 1D et 2D (par opposition à 3D, qui correspond au volume)

Example: Transport balistique des charges



* On peut observer un transport balistique lorsque le libre parcours moyen des charges est supérieur à la dimension physique

Les points/boites quantiques (quasi-0D)

Exemple:

Absorption et émission de lumière

Le Prix Nobel de Chimie 2023 a été décerné à Mounji G. Bawendi, Louis E. Brus et Aleksey Yekimov « pour la découverte et la synthèse des points quantiques »



Ill. Niklas Elmehed © Nobel Prize Outreach
Mounji G. Bawendi



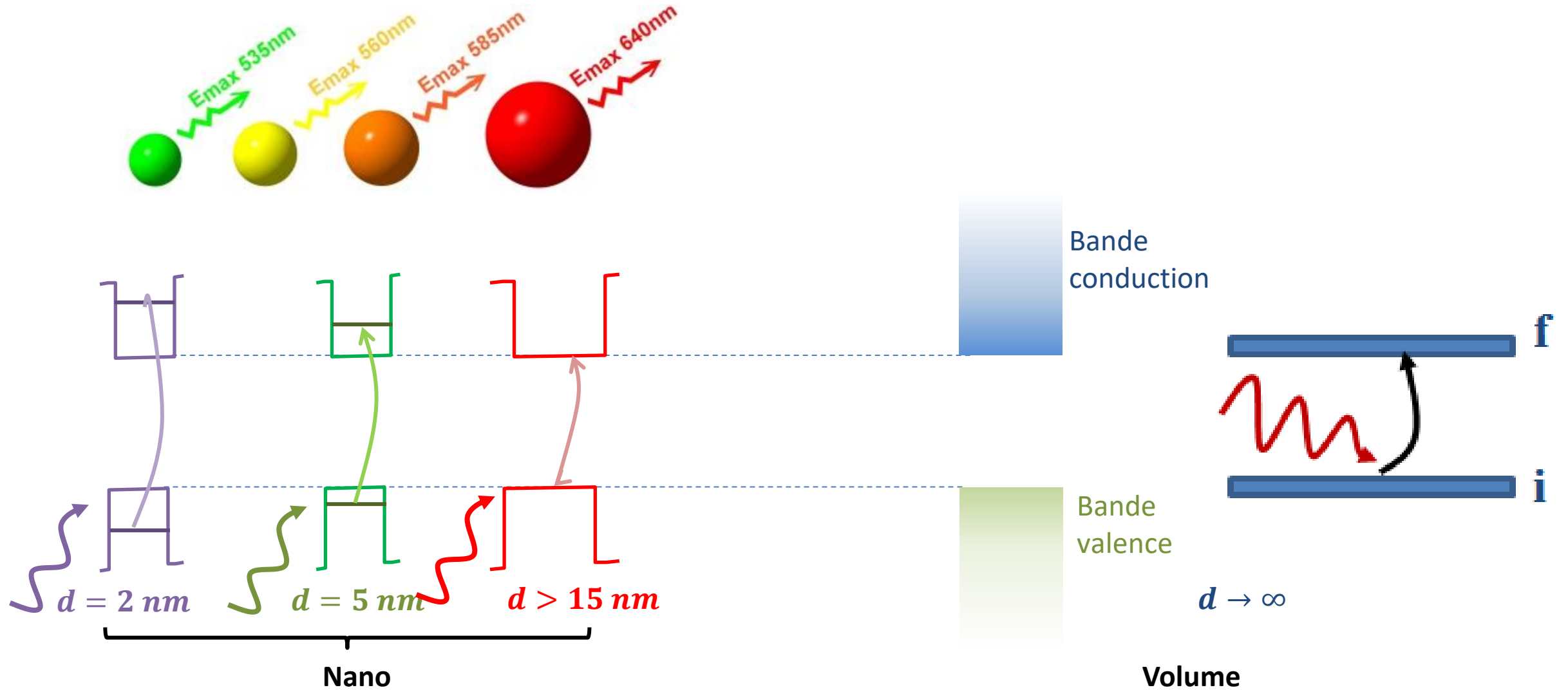
Ill. Niklas Elmehed © Nobel Prize Outreach
Louis E. Brus



Ill. Niklas Elmehed © Nobel Prize Outreach
Aleksey Yekimov

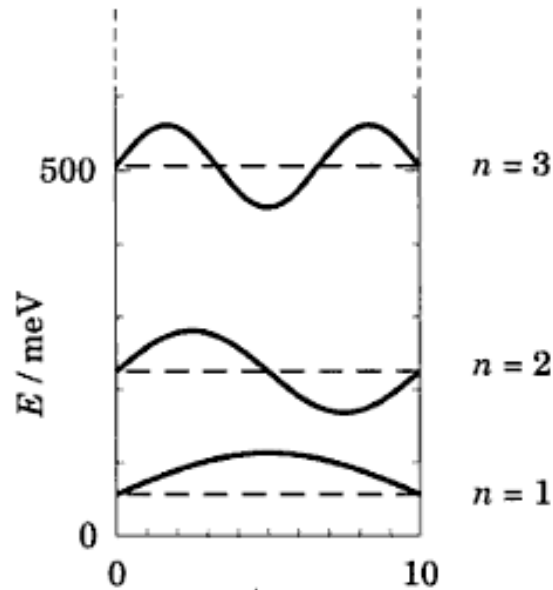


Exemple d'un semiconducteur: CdSe



Source: Bawendi group @ MIT

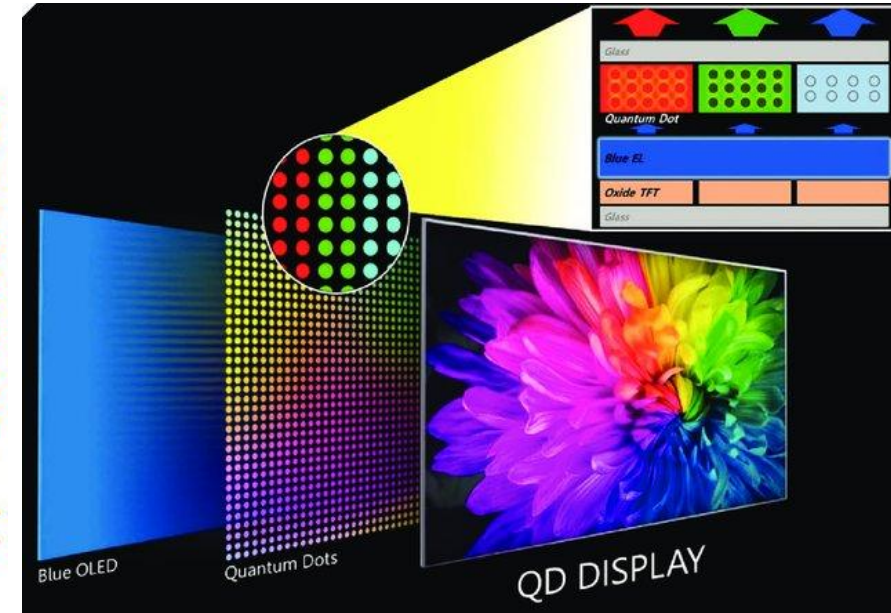
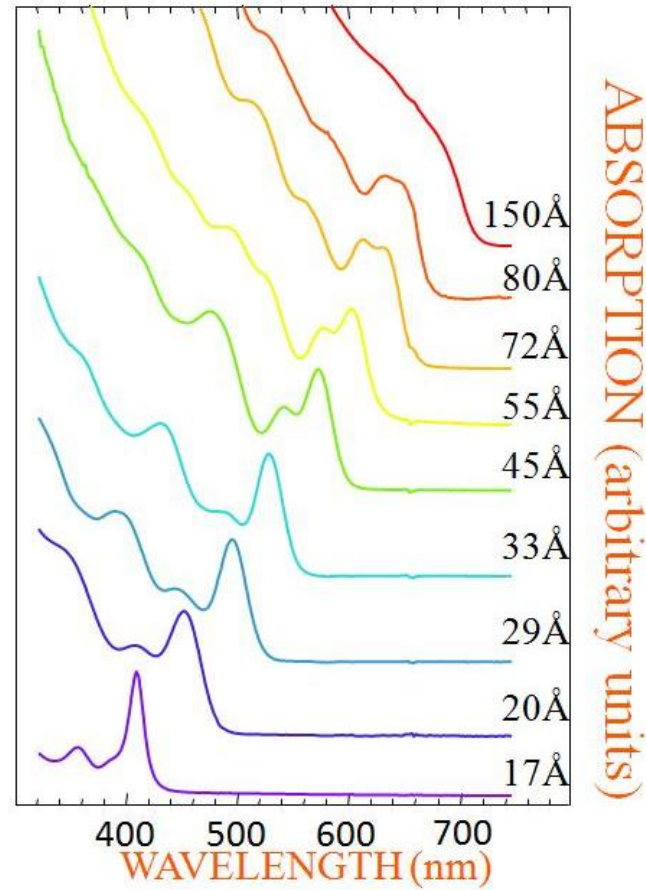
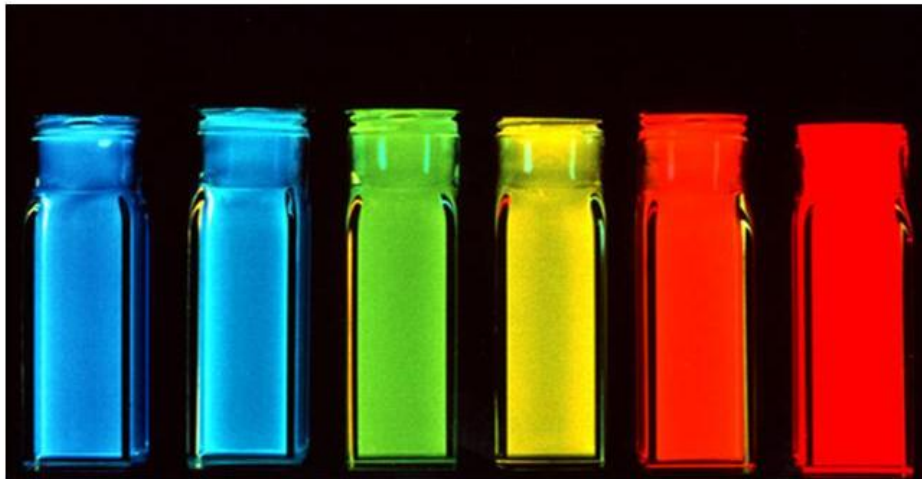
Modèle particle-in-a-box



$$\phi_n(x) = A_n \sin \frac{n\pi x}{a}, \quad \varepsilon_n = \varepsilon_0(k_n) = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2ma^2}.$$

Absorption et émission dépendent de la taille

2 nm $\xrightarrow{\text{CdSe}}$ 8 nm

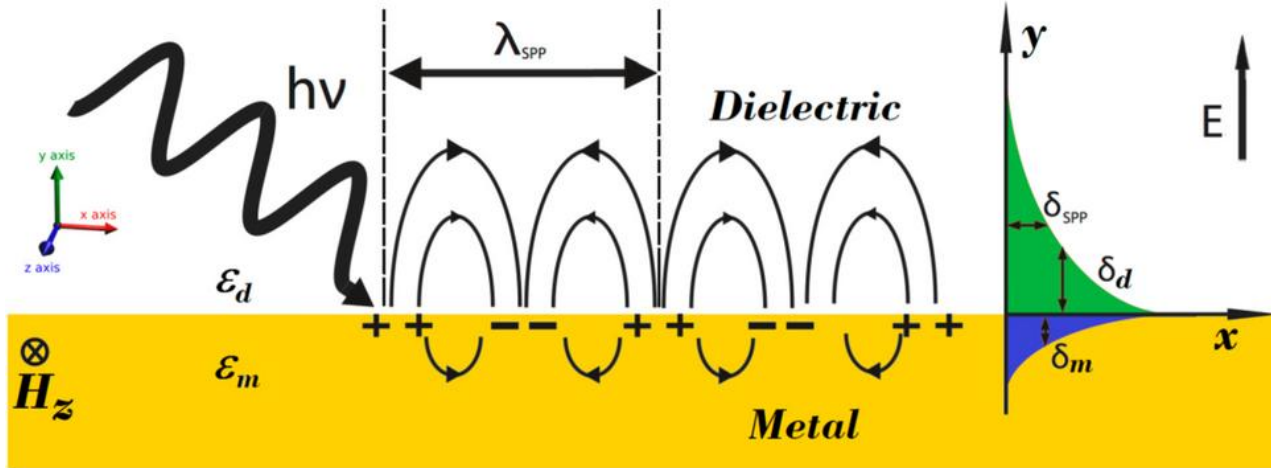


Plus de control
Plus efficace

Les nanoparticules (quasi-0D)

Exemple:
Effet plasmonique

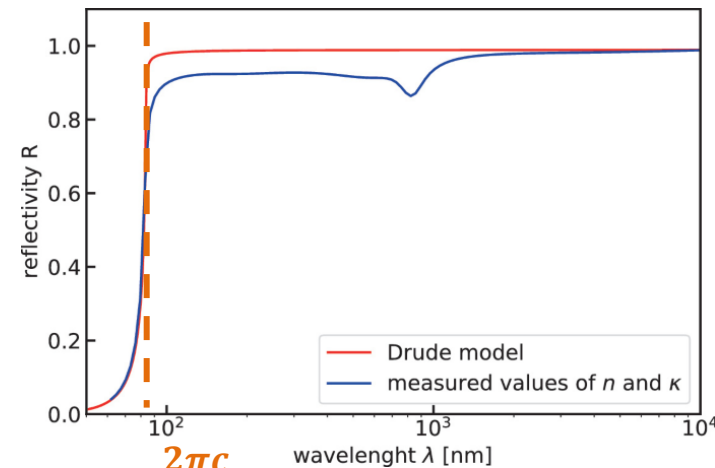
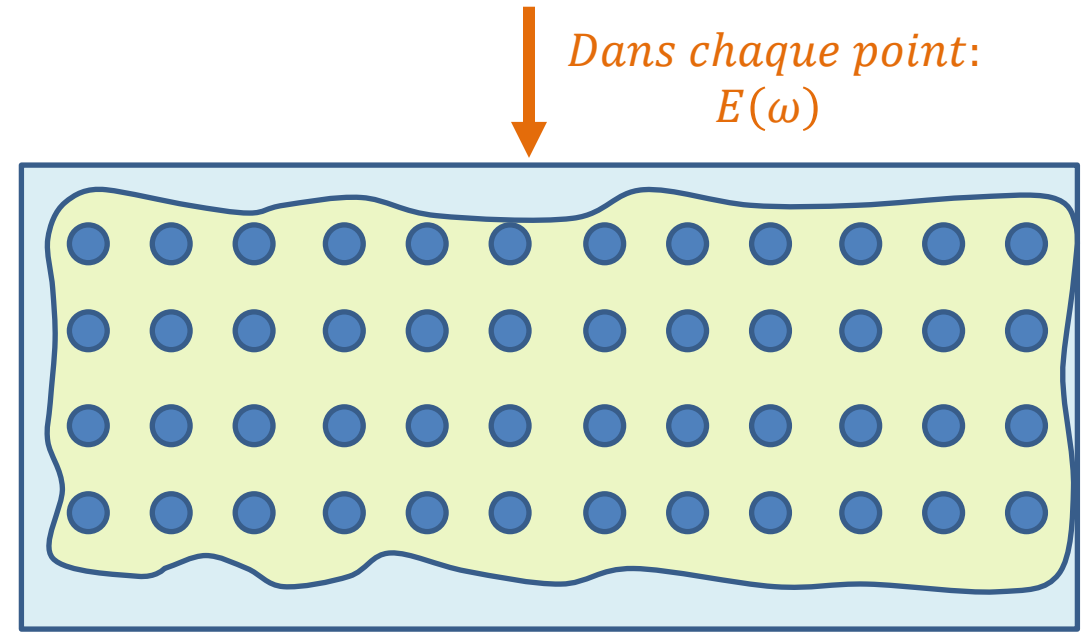
Plasmon de surface



Le **plasmon de surface** est une onde électromagnétique guidée à la surface entre un métal et un diélectrique.

Le plasmon de surface étant un mode guidé, se propageant le long d'une interface plane (profondeur autour de 25 nm).

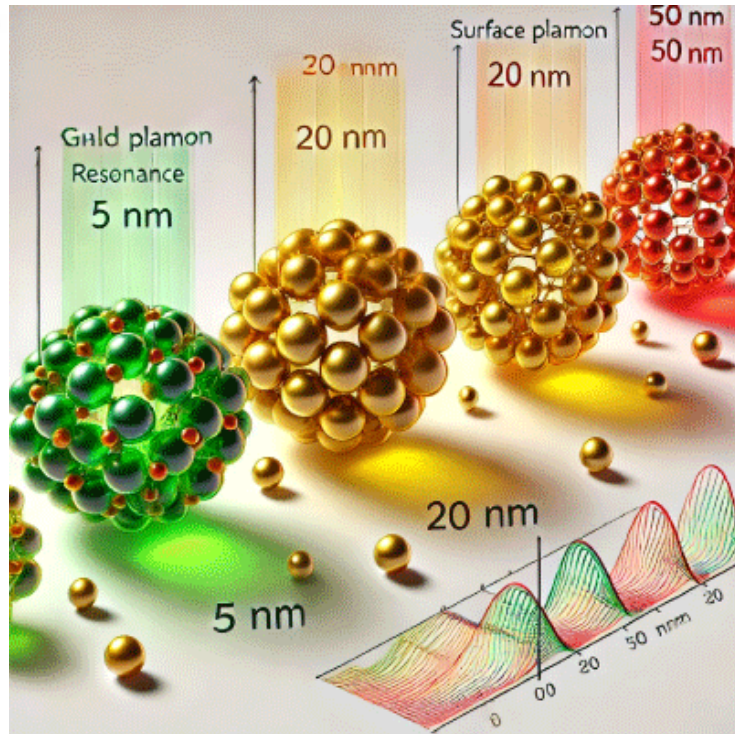
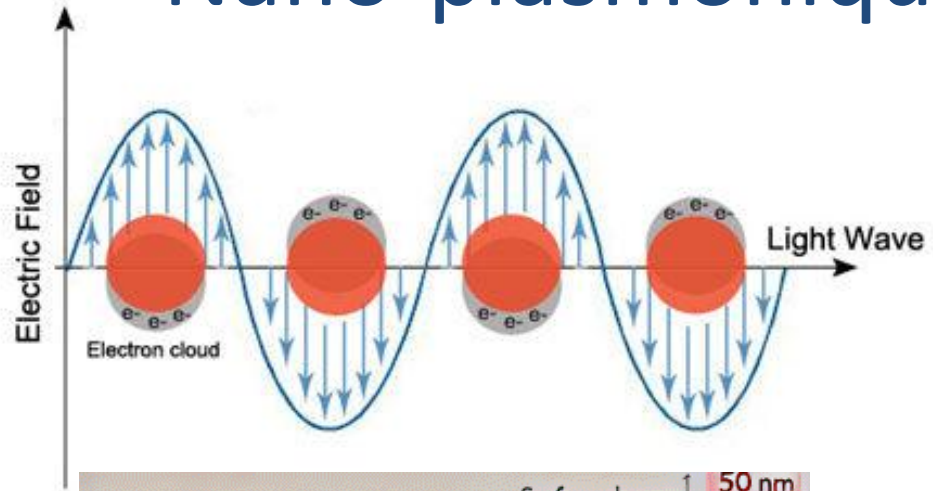
Une des caractéristiques les plus importantes du plasmon de surface est que c'est un mode localisé à l'interface.



$$\lambda_p = \frac{2\pi c}{\omega_p}$$

$$\text{ou } \omega_p = \sqrt{\frac{Ne^2}{m\epsilon_0}}$$

Nano-plasmonique



$$\omega_p = \sqrt{\frac{Ne^2}{m\epsilon_0}}$$

(a)



(b)

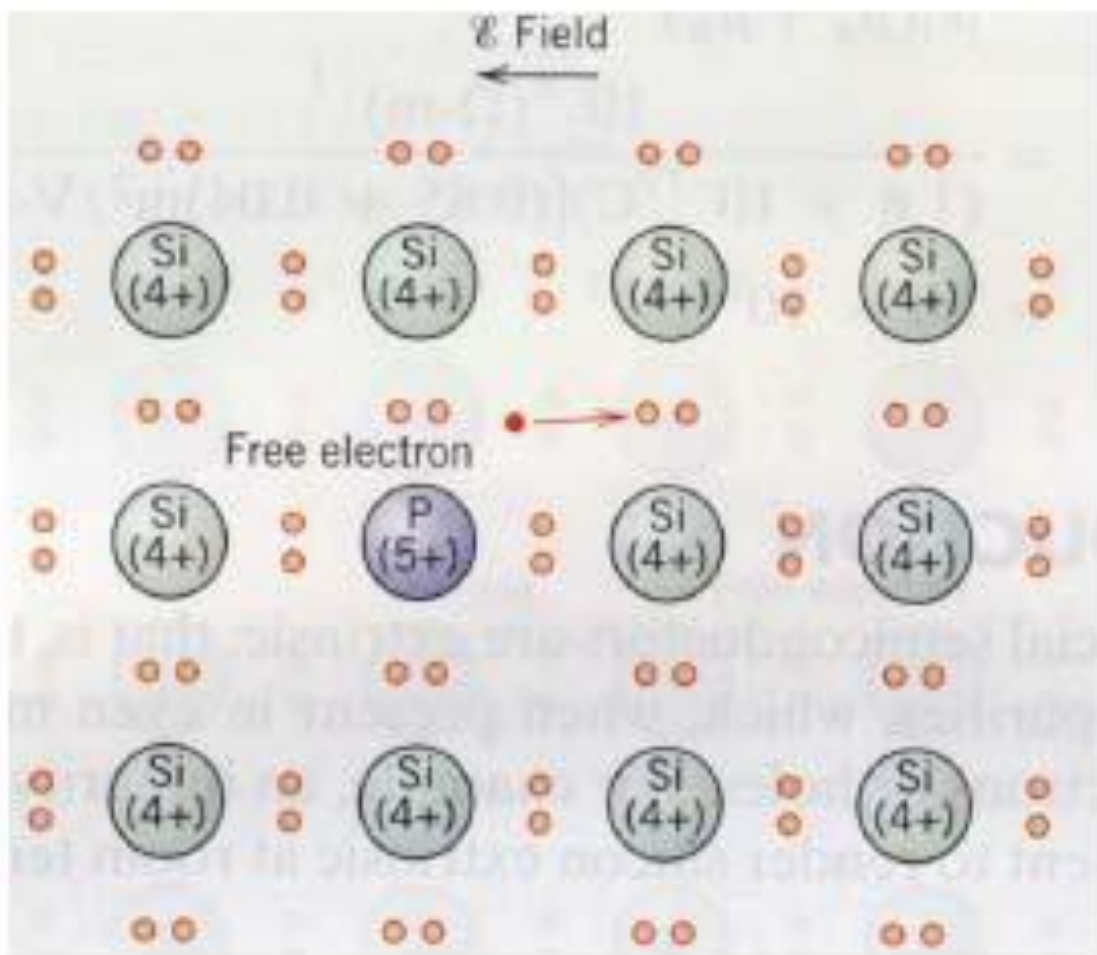


Les nanofils (quasi-1D)

Exemple:

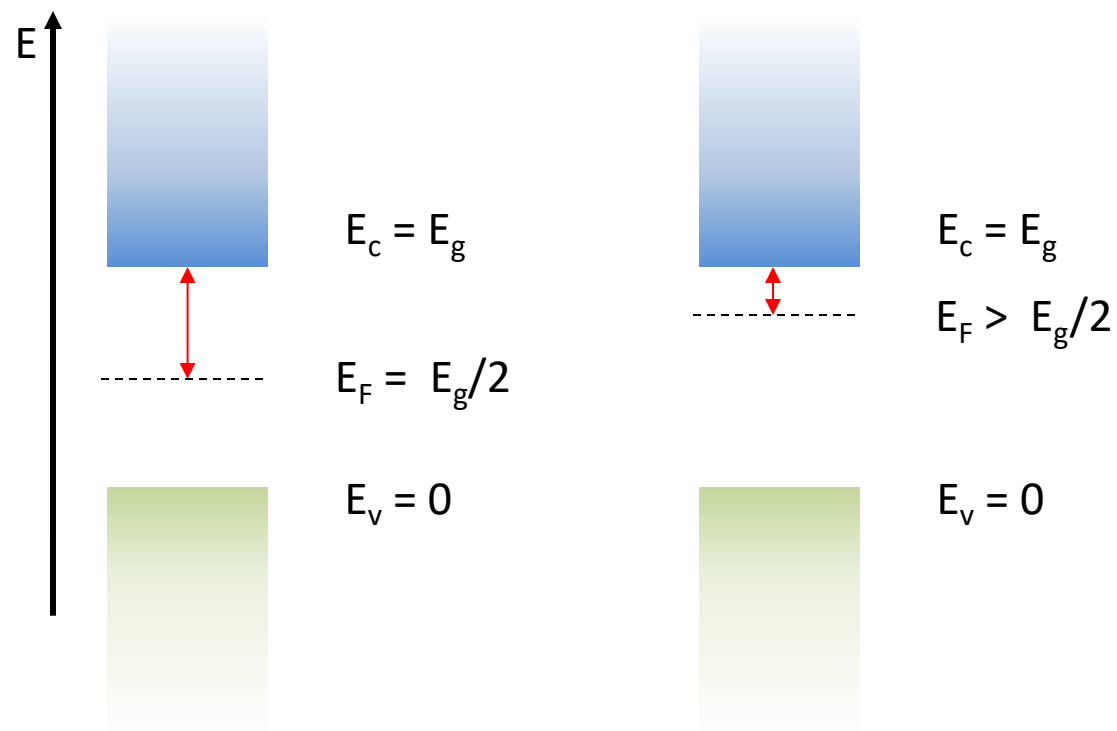
Conductivité électriques dans le nanofils

Energie de Fermi dans le semiconducteurs dopés



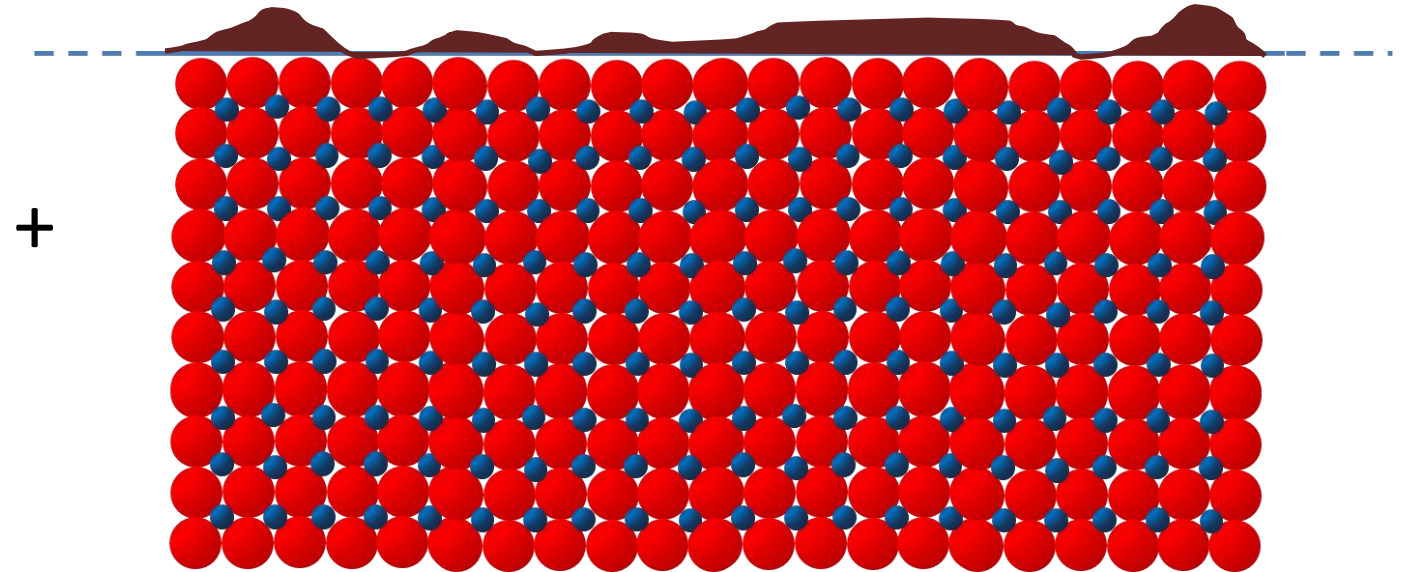
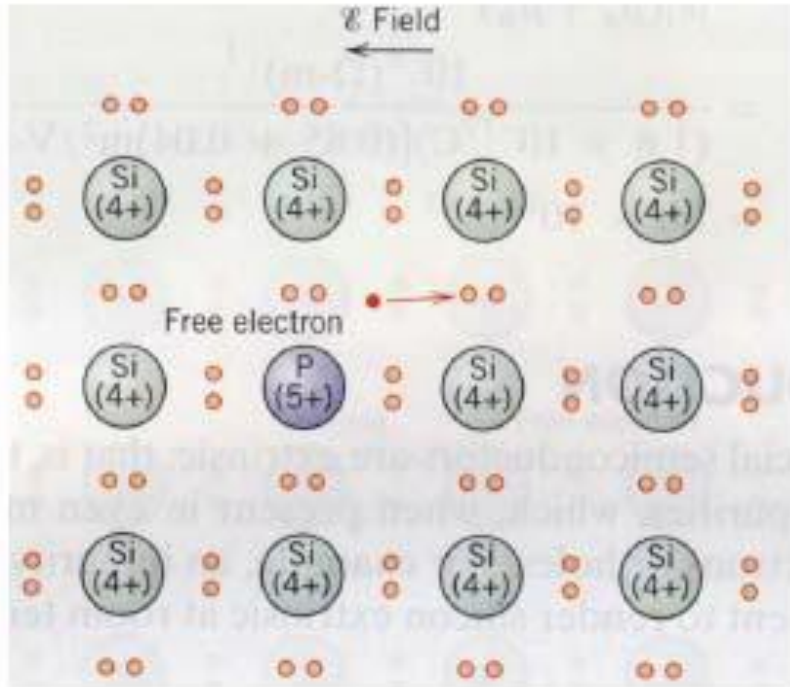
Semiconducteur intrinsèque

Semiconducteur dopé (n)



L'énergie de Fermi dans un semiconducteur est une mesure du potentielle chimique et est liée à la concentration des porteurs de charge

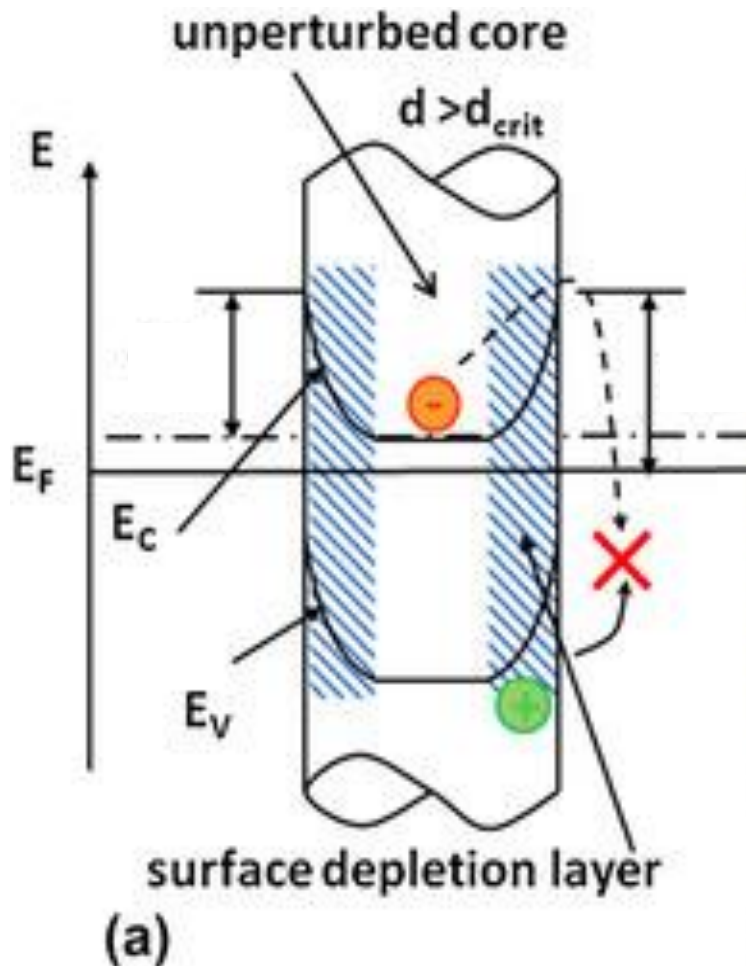
Effet de surface dans le semiconducteur dopé



Près de la surface, deux effets se produisent : l'énergie d'ionisation du dopant est plus élevée, et les charges libres peuvent être désactivées par les défauts

La concentration de porteurs de charge est différente entre le volume et la surface.
Cela revient à dire que la différence entre l'énergie de Fermi et la bande de conduction près de la surface est plus élevée que dans le volume

Conductivité électrique en fonction de la taille radiale

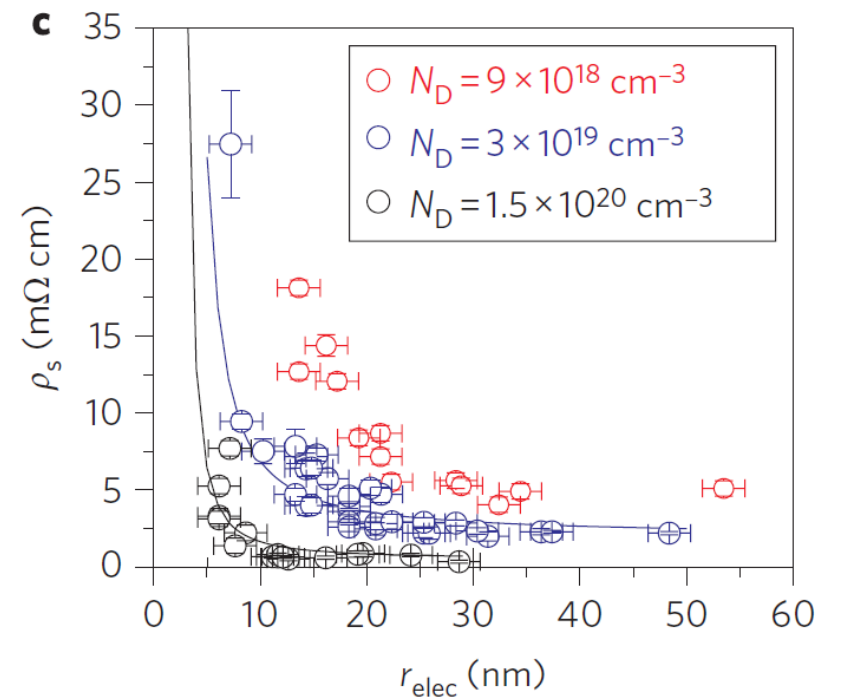
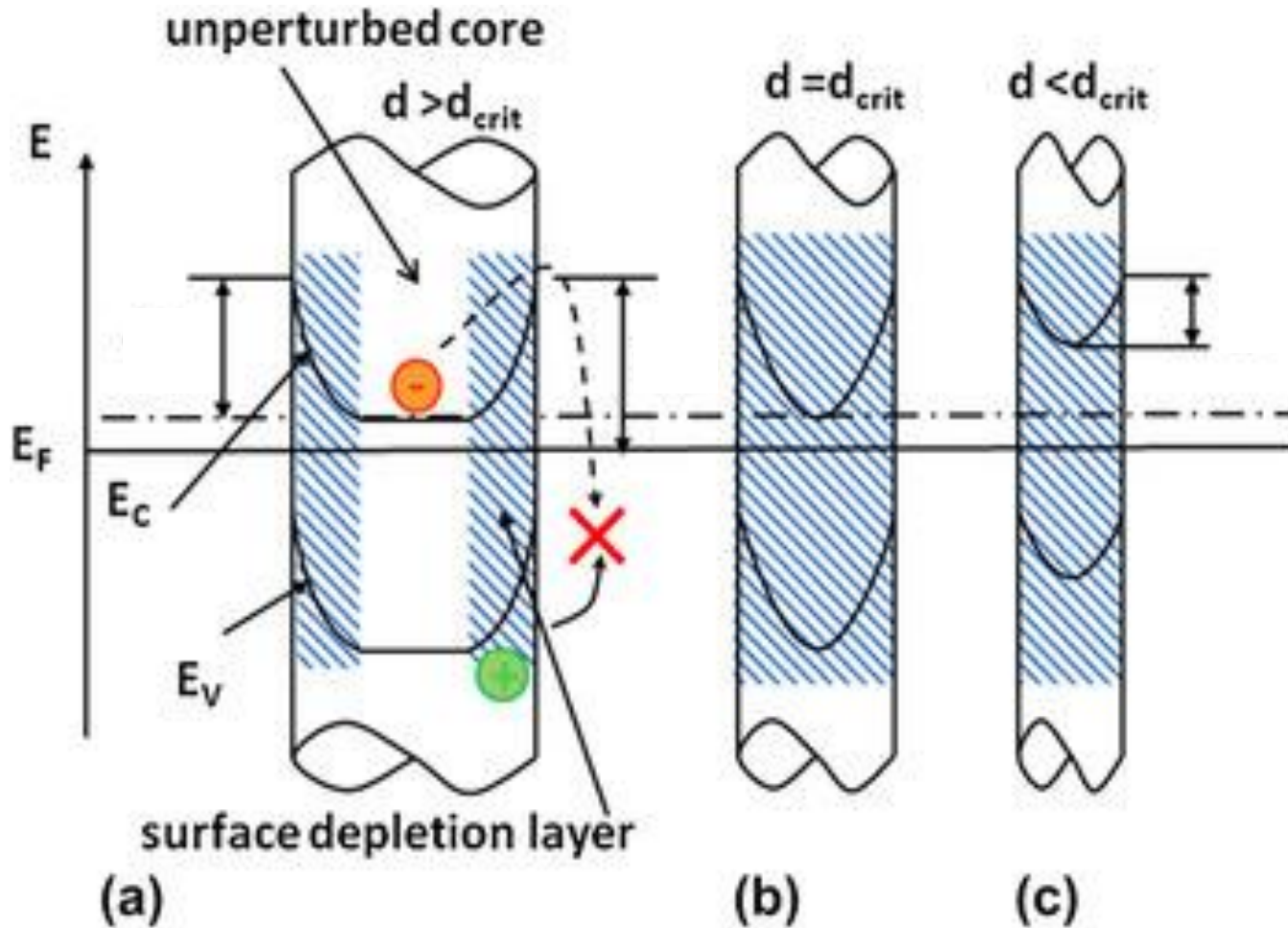
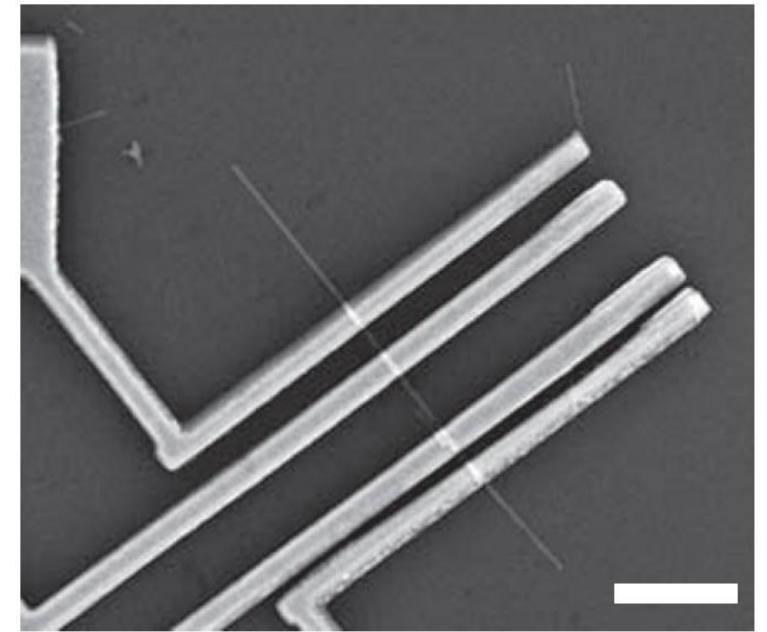


La combinaison des effets de surface et de la dimensionnalité a un impact significatif sur la conductivité électrique.

Selon la taille radiale du nanofil, il est possible que la section transversale effective pour la conduction des électrons soit considérablement réduite par rapport à la section transversale physique.

En dessous d'une certaine taille critique, le nanofil devient effectivement intrinsèque.

Conductivité électrique en fonction de la taille radiale

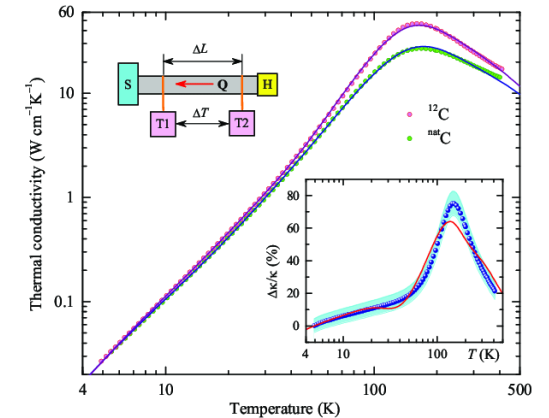
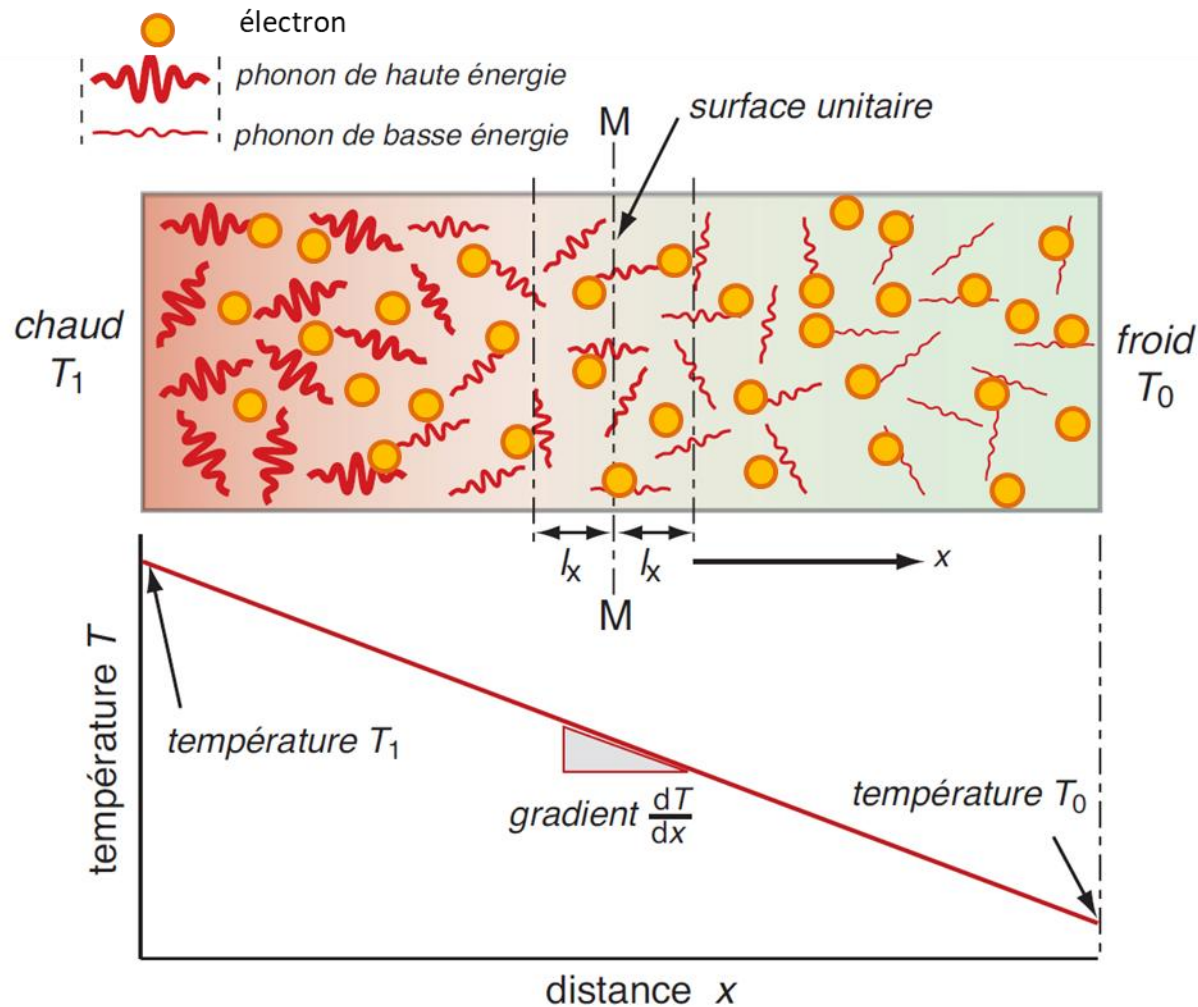


Les matériaux 2D

Exemple:

Conductivité thermique du graphène

Conductivité thermique du diamant



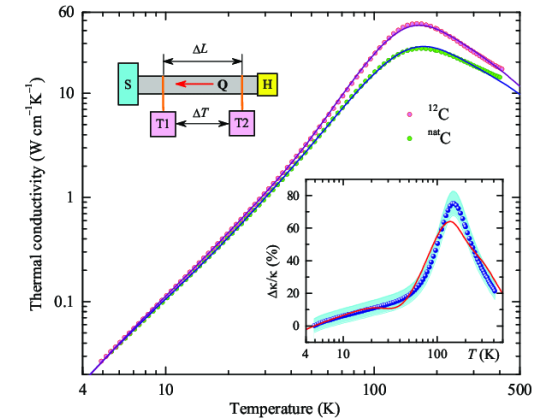
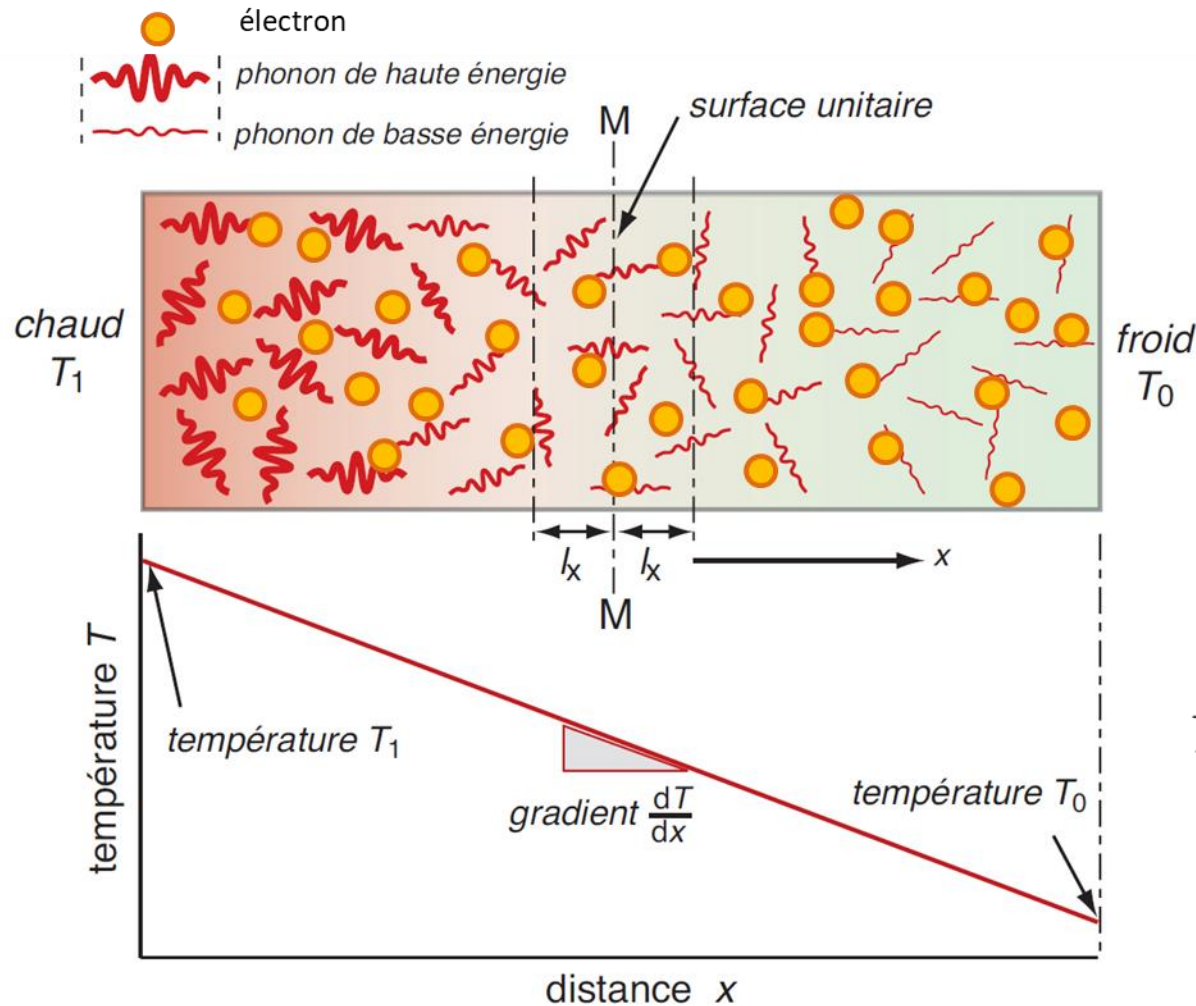
$$k_{300K}^{\text{Diamond}} = \sim 2000 \frac{W}{m \cdot K}$$

$$k = k_l + \text{X}$$

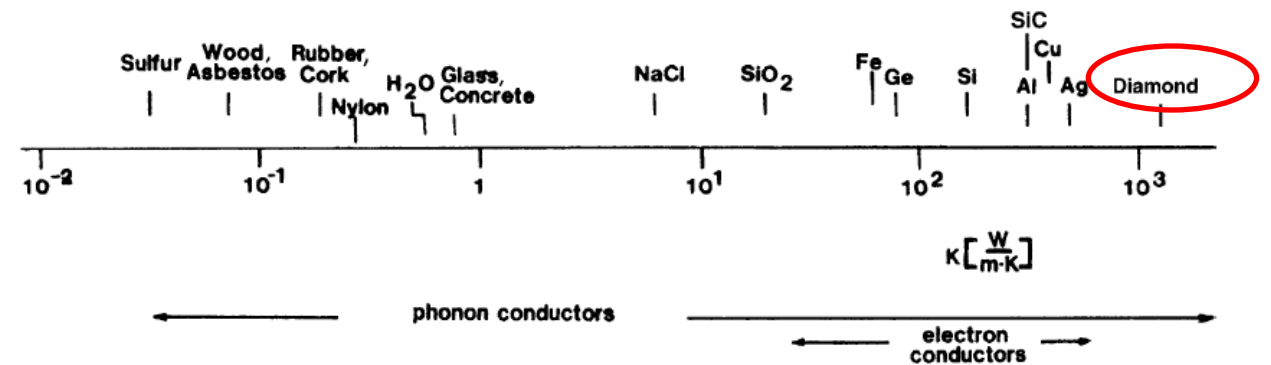
Contribution vibrationnelle Contribution électronique

Detailed description: This block shows the equation $k = k_l + \text{X}$. An arrow points from the text 'Contribution vibrationnelle' to k_l . Another arrow points from the text 'Contribution électronique' to the red 'X' symbol, which is crossed out with a large red 'X', indicating that the electronic contribution is negligible or zero in diamond.

Conductivité thermique du diamant



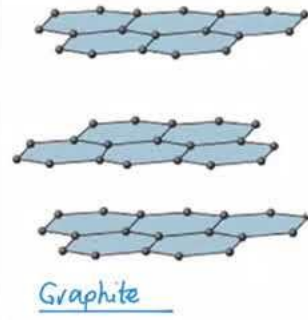
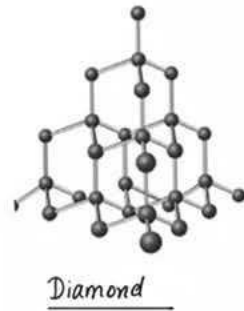
$$k_{300K}^{Diamond} = \sim 2000 \frac{W}{m \cdot K}$$



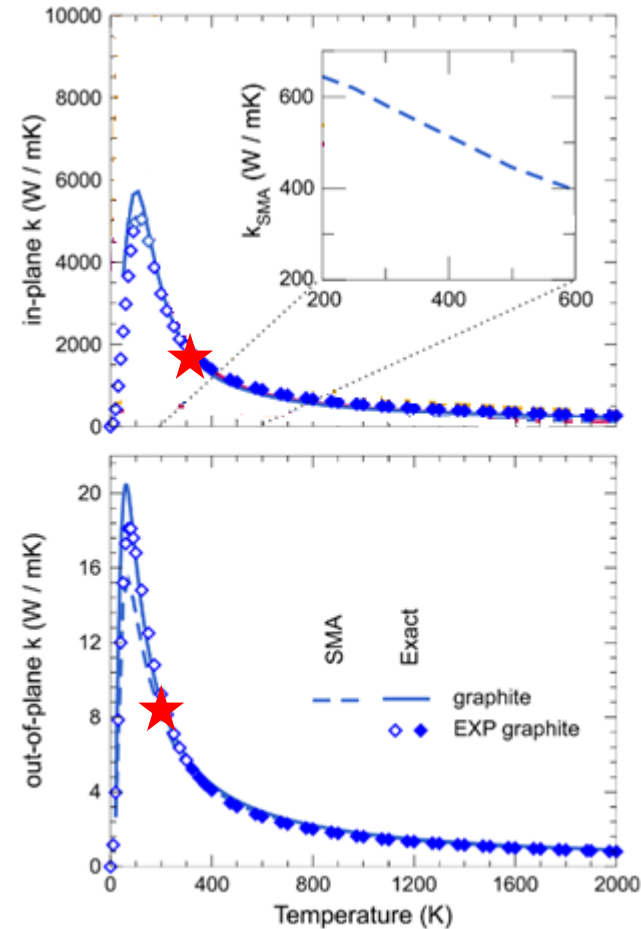
Conductivité thermique de la graphite



Graphite



- Bonne conductivité électrique
- Liaison chimiques (sp^2) plus fort que le diamant (sp^3)



Dans le plan

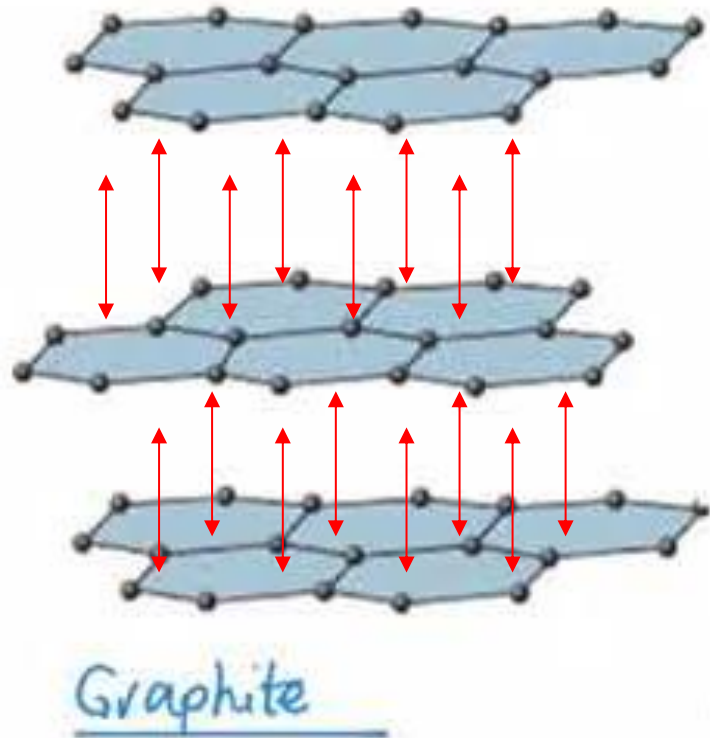
$$k_{300K}^{Graphite} = \sim 2000 \frac{W}{m * K}$$

À travers les plans

$$k_{300K}^{Graphite} = \sim 10 \frac{W}{m * K}$$

Pourquoi il y a un si grande différences entre les deux?

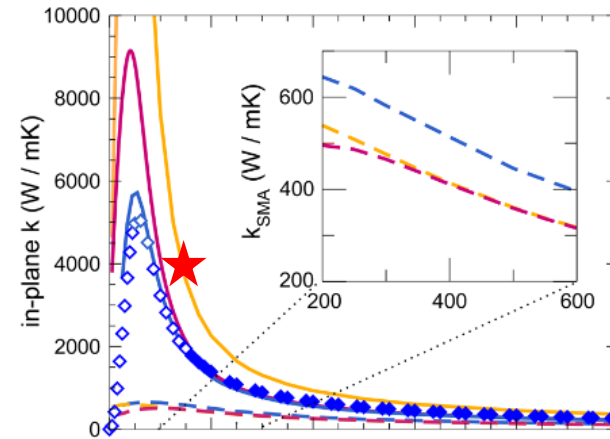
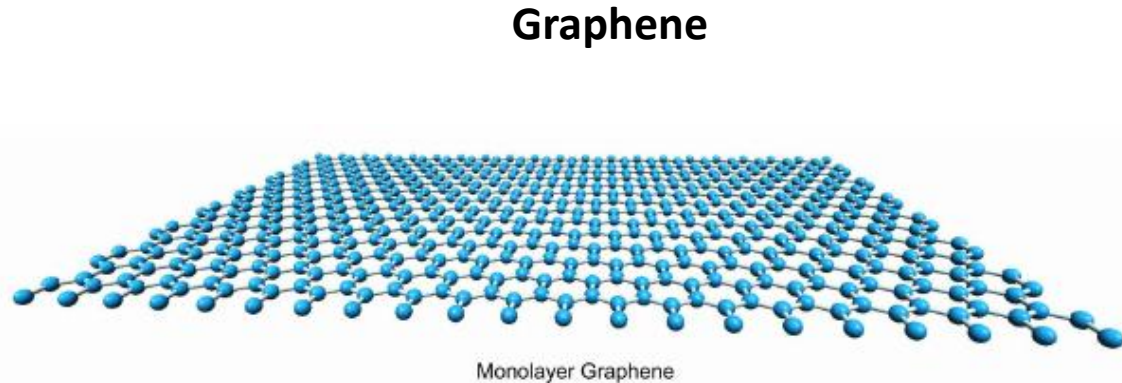
Interactions de Van-der-Waals entre les couches



Les interactions de Van der Waals perturbent la propagation des ondes dans chaque monocouche.

De plus, dans le graphite naturel, il existe des impuretés entre les couches qui agissent comme des centres de diffusion.

Conductivité thermique du graphène



$$k_{300K}^{Graphene} = \sim 4000 \frac{W}{m * K}$$

- Conductivité électrique très élevée → Mobilité électronique du graphène: $200'000 \frac{cm^2}{V*s}$
(Cuivre $\sim 50 \frac{cm^2}{V*s}$)
- Liaison chimiques (sp^2) plus fort que le diamant (sp^3)
- Difficile de l'isoler (pour longtemps) →

The Nobel Prize in Physics 2010

The Nobel Prize in Physics 2010 was awarded jointly to Andre Geim and Konstantin Novoselov "for groundbreaking experiments regarding the two-dimensional material graphene"