

Table des matières

REMERCIEMENTS	II
RESUME	III
ABSTRACT	IV
TABLE DES MATIERES	V
NOMENCLATURE	VI
INTRODUCTION	1
PARTIE 1 : CONTEXTE	4
1.1 PRODUCTION ET CONSOMMATION MONDIALE D'ELECTRICITE	5
1.2 CENTRALE SOLAIRE THERMODYNAMIQUE A CONCENTRATION	14
1.3 RECEPTEURS SOLAIRES POUR CENTRALE SOLAIRE A TOUR	23
1.4 CARBURE DE SILICIUM	29
1.5 CONCLUSION	35
PARTIE 2 : THEORIE ET MODELES NUMERIQUES	36
2.1 INTRODUCTION	37
2.2 LE RAYONNEMENT THERMIQUE	37
2.3 PROPRIETES RADIATIVES ET MODELE NUMERIQUE	42
2.4 LA DYNAMIQUE MOLECULAIRE	53
2.5 ÉVALUATION DE LA FONCTION DIELECTRIQUE IR PAR LA DMC	65
2.6 MODELE NODAL POUR LE CALCUL DU RENDEMENT DE CONVERSION SOLAIRE/THERMIQUE DE L'ABSORBEUR	68
PARTIE 3 : RESULTATS	74
3.1 CHOIX DES POTENTIELS INTERATOMIQUES	76
3.2 PROPRIETES THERMO-RADIATIVES DU SiC 3C	100
3.3 PROPRIETES THERMO-RADIATIVE DU SiC 6H	114
3.4 ÉTUDE DU TiC-SiC	123
3.5 PERFORMANCE DE LA CENTRALE SOLAIRE	145
CONCLUSIONS GENERALES ET PERSPECTIVES	156
PUBLICATIONS ET CONFERENCES	158
REFERENCES BIBLIOGRAPHIQUES :	159
LISTE DES FIGURES	I
LISTE DES TABLEAUX	IX
ANNEXE : DETERMINATION DE LA FONCTION DIELECTRIQUE PAR LA DYNAMIQUE MOLECULAIRE	XI

Nomenclature

GES	Gaz à effet de serre	1
CSTC	Centrale solaire thermodynamique à concentration	1
PV	Panneau photovoltaïque	1
CST	Centrale solaire à tour	2
SiC	Carbure de silicium	2
IEA	International Energy Agency	5
RTE	Réseau de transport d'électricité	6
ENR	Énergie renouvelable	8
DNI	Irradiation normale directe	10
FT	Fluide de travail	18
$\eta_{\frac{S}{T}}$	Rendement de conversion solaire/thermique	20
C	Concentration solaire	20
E_S	Éclairement solaire	20
τ_v	Transmissivité hémisphérique totale du vitrage	21
$\alpha_{hémis}$	Absorptivité hémisphérique totale	21
$\varepsilon_{hémis}$	Emissivité hémisphérique totale	21
H	Coefficient total de pertes	21
T_{rec}	Température du récepteur	21
T_{atm}	Température atmosphérique	21
T_{amb}	Température ambiante	21
$E(\lambda)$	Émissivité monochromatique	21
T_S	Température moyenne à la surface du soleil	21

Nomenclature		
L^0	Luminance monochromatique	22
TiC	Carbure de titane	28
DM	Dynamique moléculaire	37
$L(\lambda, T, \theta)$	Luminance spectrale directionnelle [$W \cdot m^{-3} \cdot sr^{-1}$]	39
$M(\lambda, T)$	Pouvoir émissif spectral hémisphérique [$W \cdot m^3$]	39
$E(\lambda, T, \theta)$	Émittance spectrale directionnelle	41
$\tilde{\epsilon}$	Fonction diélectrique complexe	42
P	Polarisation	42
$\tilde{\chi}$	Susceptibilité diélectrique complexe	42
$M(\omega)$	Moment dipolaire	43
q_e	Charge de l'électron [C]	43
n_e	Densité électronique [cm^{-3}]	44
m_{eff}^*	Masse effective des charges	44
ω_p	Fréquence du plasmon [THz]	44
γ	Coefficient d'amortissement du plasmon	44
ω_{TO} ou TO	Fréquence du mode transversal optique [THz]	45
ω_{LO} ou LO	Fréquence du mode longitudinal optique [THz]	45
ϵ_∞	Constante diélectrique haute fréquence [$F \cdot m^{-1}$]	45
Γ	Coefficient d'amortissement du phonon [THz]	45
$\tilde{n}$	Indice de réfraction complexe [-]	46
n	Indice de réfraction (partie réelle de l'indice de réfraction complexe) [-]	46
k	Indice d'extinction (partie imaginaire de l'indice de réfraction complexe) [-]	46
R	Coefficient de réflexion [-]	44.

		Nomenclature
ρ	Réflexivité [-]	48
τ	Transmissivité [-]	49
α	Absorptivité [-]	49
ε	Émissivité [-]	49
$T_{réelle}$	Température réelle [K]	63
T_{DM}	Température de simulation [K]	63
$D(\omega)$ ou DOS	Densité d'état phononique (Anglo-Saxon: Density of states)	63
ε_0	Permittivité du vide [$F.m^{-1}$]	65
V	Volume du système	65

Introduction

Le réchauffement climatique et le dérèglement météorologique sont devenus les sujets phares des discussions internationales actuelles. Nous avons recensé ces dernières années de nombreux cataclysmes météorologiques qui sont d'après les spécialistes associés au réchauffement climatique causé par l'augmentation de la teneur en gaz à effet de serre (GES) dans l'atmosphère. Les activités humaines en sont la principale cause. En effet, les grands secteurs d'activités humaines utilisent des ressources polluantes pour fonctionner. On peut citer par exemple le secteur industriel ou encore le secteur énergétique qui utilise majoritairement des énergies fossiles telles que le charbon ou le gaz naturel. Or ces deux ressources libèrent une immense quantité de GES dans l'atmosphère.

Les solutions qui permettraient de réduire l'impact humain sur l'environnement seraient d'une part de réduire notre consommation énergétique et d'autre part d'utiliser massivement des ressources vertes dites renouvelables pour notre production d'énergie. En cela, l'énergie solaire est l'une des ressources renouvelables disponible en grande quantité sur toute la surface terrestre. Cette dernière peut avoir différentes applications : la production de chaleur, la photosynthèse ou encore la production d'électricité. Il existe deux types de technologies permettant de convertir l'énergie solaire en électricité. La première est la technologie des panneaux photovoltaïques (PV) et la deuxième repose sur la technologie des centrales solaires thermodynamiques à concentration (CSTC). Cette dernière présente cependant un avantage non négligeable par rapport à la première qui se situe au niveau du stockage de l'énergie. En effet, les dispositifs s'appuyant sur des énergies renouvelables souffrent de leur dépendance à l'intermittence de la ressource énergétique. Le soleil par exemple n'est pas disponible sur une journée entière de 24 h. Il est donc impossible de produire de l'électricité pendant une certaine période de la journée d'où la nécessité d'avoir un système de stockage de l'énergie permettant de répondre à la demande en énergie à tout moment.

La technologie des CSTC permet à la différence de la technologie des panneaux PV de stocker une grande quantité d'énergie et de la relancer sur le réseau pendant les périodes d'absence du soleil. Cet atout et la possibilité de produire aussi des biocarburants (type hydrogène) font des CSTC une technologie prometteuse. Les principaux défauts de cette technologie se situent au niveau de son rendement et de son fort coût d'investissement. C'est la raison pour laquelle, de nombreuses études sont menées afin d'améliorer le rendement de ces installations.

Dans les CSTC, les rayons solaires sont d'abord concentrés via un champ de miroirs hautement réfléchissants nommés héliostats vers une cellule réceptrice élaborée à partir de matériaux optiquement absorbants. L'énergie radiative incidente est absorbée par la cellule réceptrice puis convertie en chaleur afin de permettre dans un second temps d'élever la température d'un fluide caloporteur circulant dans celle-ci et ainsi initier un cycle thermodynamique. Ce cycle thermodynamique convertira la chaleur en travail et l'alternateur couplé à une turbine convertira le travail en énergie électrique. Comme évoqué précédemment, les limitations des CSTC résident dans ses faibles rendements de conversion solaire/électricité par rapport à son coût

d'investissement élevé. Il est donc primordial d'améliorer les rendements globaux des CSTC afin de les rendre attractifs sur le marché. On recense quatre grandes familles de centrales solaires thermodynamiques à concentration qui seront exposées dans la section 1.2.2. La technologie des centrales solaires à tour (CST) est celle qui propose le plus fort potentiel d'amélioration à travers les différents éléments qui les constituent.

Plusieurs études sont consacrées aux différents éléments de ces centrales. On peut citer par exemple les travaux menés sur l'agencement et la forme des miroirs dans l'ouvrage de Kreith & Goswami (Kreith et Goswami 2007) ou encore les travaux menés par Kribus et ses collaborateurs (Kribus et al. 2001) sur l'initiation d'un cycle thermodynamique à haute température. Les travaux de Kribus et ses collaborateurs vont de pair avec les travaux menés sur les récepteurs solaires fonctionnant à des températures élevées, c'est-à-dire pour des températures au-delà de 1000°C . Les hautes températures nécessitent l'utilisation de matériaux pouvant résister à des contraintes thermiques et mécaniques. Seuls quelques matériaux peuvent répondre à ces conditions extrêmes de fonctionnement dont le carbure de silicium (SiC).

Les récepteurs solaires à base de SiC sont des candidats de choix pour une application à haute température car ce matériau présente une bonne résistance à la corrosion, une bonne tenue mécanique, de bonnes propriétés thermiques mais surtout une bonne absorptivité dans le domaine du visible. L'inconvénient du SiC réside dans le fait que son émissivité dans l'infrarouge est élevée et cela le rend moins intéressant sur l'aspect sélectivité spectrale. En effet, pour optimiser le rendement global d'une CSTC au travers de son absorbeur, celui-ci doit être constitué d'un matériau présentant à la fois une absorptivité élevée dans le domaine du visible pour maximiser l'énergie radiative disponible mais également une faible émissivité dans le domaine de l'infrarouge pour minimiser les pertes thermiques par rayonnement.

C'est dans ce cadre que s'inscrit cette thèse puisque nous aurons pour objectif d'optimiser la production d'électricité des CSTC via l'amélioration du rendement de conversion solaire/thermique des absorbeurs solaires. Cela nécessitera de maintenir une absorptivité élevée dans le visible tandis que nous viserons à minimiser l'émissivité dans l'infrarouge. L'approche expérimentale présentant un coût non négligeable liée à l'achat de matériaux et aux mesures expérimentales, nous avons opté pour une approche purement numérique. Bien évidemment, les résultats issus de nos simulations seront confrontés aux mesures expérimentales pour validation dans la mesure du possible. Ce manuscrit s'organisera selon la structure suivante :

La première partie vise à souligner le contexte énergétique mondial afin de justifier le choix de l'énergie solaire pour la production d'électricité. Les grandes familles de technologies de conversion solaire/électrique et leur fonctionnement y seront également développées. C'est la raison pour laquelle nous aborderons les différents éléments composant les CST et leur fonctionnement. Nous ferons ensuite l'état de l'art des propriétés radiatives des matériaux utilisés et développés pour les récepteurs. Nous finirons enfin par opter pour le SiC pour la conception d'absorbeurs solaires et justifierons ce choix.

La deuxième partie décrira la théorie et les différents modèles numériques utilisés dans cette thèse. Après un bref rappel sur des notions fondamentales de rayonnement thermique, nous aborderons le calcul de la fonction diélectrique. Cette grandeur complexe est celle qui pilote les propriétés radiatives des matériaux. Elle met en jeu des mécanismes physiques différents que nous développerons dans le domaine du visible et de l'infrarouge. Nous montrerons comment évaluer les propriétés radiatives

du SiC, du moins son émissivité dans l'infrarouge, par le biais de simulations par Dynamique Moléculaire. Cette technique de simulation à l'échelle nanométrique repose sur le choix d'un potentiel d'interaction atomique robuste et suffisamment précis pour tenir compte de la description réelle de tous les mécanismes physiques impactant sur le calcul de la fonction diélectrique.

Dans la troisième partie nous présenterons les résultats issus de nos simulations par DM. Nous évaluerons l'effet du dopage et de la température sur les propriétés thermo-radiatives du SiC. Les grandeurs évaluées, absorptivité dans le visible et émissivité dans l'infrarouge, serviront de paramètres d'entrée pour la modélisation du fonctionnement de la centrale solaire thermodynamique à tour dans son ensemble. Ce sera l'occasion de montrer l'influence du dopage sur le rendement de conversion solaire/thermique d'un absorbeur en SiC et par la suite sur le rendement global d'une centrale solaire thermodynamique à tour.

Partie 1 : Contexte

1.1	PRODUCTION ET CONSOMMATION MONDIALE D'ELECTRICITE	5
1.1.1	Évolution de la demande mondiale	5
1.1.2	Technologies de conversions et ressources	6
1.1.2.1	Ressources primaires et technologies	6
1.1.2.2	Ressources renouvelables et technologies	8
1.1.3	L'énergie solaire pour la production d'électricité	9
1.1.3.1	Le solaire photovoltaïque	11
1.1.3.2	Le solaire thermodynamique	12
1.1.3.3	Comparaison des deux technologies	12
1.2	CENTRALE SOLAIRE THERMODYNAMIQUE A CONCENTRATION	14
1.2.1	Principe de fonctionnement	14
1.2.2	Classification des technologies	15
1.2.2.1	Technologie des centrales à tour	15
1.2.2.2	Technologie à miroirs de Fresnel	15
1.2.2.3	Technologie à miroirs paraboliques	15
1.2.2.4	Technologie à miroirs cylindro-paraboliques	16
1.2.3	Centrale solaire à tour pour la production à grande échelle	18
1.2.4	Bilan d'énergie d'une centrale solaire à tour	19
1.3	RECEPTEURS SOLAIRES POUR CENTRALE SOLAIRE A TOUR	23
1.3.1	Récepteur à éclairage indirect	24
1.3.2	Récepteur à éclairage direct	25
1.3.2.1	Récepteurs volumiques poreux	25
1.3.2.2	Récepteurs volumiques à particules	26
1.3.3	Matériaux absorbeurs	27
1.4	CARBURE DE SILICIUM	29
1.4.1	Polytype et structure cristallographique	29
1.4.2	Propriétés physiques du SiC	33
1.4.3	Dopage du SiC	34
1.5	CONCLUSION	35

1.1 Production et consommation mondiale d'électricité

La part de l'électricité dans la consommation d'énergie mondiale ne cesse de prendre de l'ampleur à cause des enjeux environnementaux. Cette augmentation est la conséquence de deux phénomènes. Le premier est lié au désir mondial de réduire la pollution induite par l'utilisation de ressources primaires dans les secteurs de l'industrie, du bâtiment et du transport. Le second est lié à l'amélioration des rendements des systèmes de production d'électricité à partir de ressources renouvelables ce qui les rend de plus en plus compétitifs.

1.1.1 Évolution de la demande mondiale

Connaissant l'importance de l'énergie électrique, nous pouvons à partir des différents scénarios politiques, évaluer la tendance de l'évolution de la demande en électricité. Si on se réfère au rapport de l'IEA (International Energy Agency 2019) la demande mondiale d'électricité augmente de 2.1% par an depuis 2018 et devrait se poursuivre jusqu'en 2040.

Les causes de la croissance de la demande sont différentes selon les types de pays concernés. Pour les pays ayant une économie avancée, la demande est surtout liée à la croissance de la numérisation des services et à l'électrification des ménages. Dans les pays avec une économie en développement, la demande en électricité est due à l'expansion de la production industrielle et à la croissance du secteur des services.

Le tableau 1-1 montre que depuis l'an 2000, les bâtiments et l'industrie sont les secteurs qui consomment le plus d'électricité. Les demandes ont quasiment doublé en 18 ans. Par ailleurs, les estimations pour 2030 et 2040 indiquent que la demande provenant de ces deux secteurs ne cessera d'augmenter.

Tableau 1-1 : Demande d'électricité mondiale par secteur et estimations [TWh] (International Energy Agency 2019)

Secteur	2000	2018	Estimations	
			2030	2040
Industrie	5406	9346	11857	13540
Bâtiment	6738	11755	15198	18892
Transport	218	377	1025	2012
Total	13152	23031	29939	36453

1.1.2 Technologies de conversions et ressources

Plusieurs technologies permettent la conversion de ressources premières en électricité. Les ressources utilisées sont généralement classées en deux familles :

- Les ressources primaires, ou encore ressources non renouvelables (charbon, gaz naturel, pétrole et uranium enrichi).
- Les ressources vertes, ou encore ressources renouvelables (eau, vent, soleil, océan, chaleur terrestre, et biomasse)

Les technologies de conversion peuvent être classées selon leur niveau de pollution atmosphérique. Dans ce type de classement, les systèmes de conversion sont caractérisés selon leur niveau de libération de gaz à effet de serre (GES). On parle alors de système carboné ou décarboné (carbone en référence au dioxyde de carbone CO₂). De ce fait l'énergie nucléaire n'est pas un système carboné, car son empreinte en carbone est nul en fonctionnement. Cependant du fait de l'utilisation d'uranium (ressource épuisable à l'échelle de l'homme sur Terre) comme matière première pour la production d'électricité, nous avons classé les centrales nucléaires parmi les technologies non-renouvelables.

1.1.2.1 Ressources primaires et technologies

La conversion de ressources non renouvelables en électricité se fait généralement grâce à des technologies utilisant des cycles thermodynamiques. C'est le cas des centrales thermiques. Dans ces installations, la combustion de matières premières permet de générer de la chaleur afin de vaporiser un fluide caloporteur tel que l'eau. Le fluide caloporteur sous forme de vapeur permettra lors de sa circulation dans une turbine couplée à un alternateur de produire de l'électricité. Les matières premières utilisées dans ces installations sont les suivantes :

- Le pétrole dans les centrales à fuel ([figure 1-1-a](#)).
- L'uranium enrichi dans les centrales nucléaires ([figure 1-1-b](#)).
- Le charbon dans les centrales à charbon ([figure 1-1-c](#)).
- Le gaz naturel dans les centrales à gaz ([figure 1-1-d](#)).

Les systèmes utilisant le pétrole, le charbon ou le gaz naturel comme ressource sont regroupées sous l'appellation de thermique à flamme, du fait de la génération de flamme via une processus de combustion. Le nucléaire est considéré comme à part car dans ce type de système, la chaleur est produite par la fission des atomes d'uranium. Il n'y a donc pas de génération de flamme et donc pas de libération de GES.

Les politiques énergétiques actuelles visent à réduire la libération des GES qui sont la cause principale du réchauffement climatique. Pour ce faire, de nouvelles mesures sont prises afin de réduire de manière significative le recours à des systèmes de production d'électricité utilisant des ressources primaires. Bien évidemment, le cas des centrales nucléaires reste un sujet à controverse et leur utilisation va dépendre de la politique énergétique et économique suivie dans le pays concerné. La France est un parfait exemple d'un pays dont la politique énergétique est axée sur la production d'électricité via le nucléaire. Selon les rapports de 2019 et de 2020 du RTE (Réseau de Transport d'Électricité 2019, 2020) la majeure partie de la production d'électricité de France provient du nucléaire soit environ 71.6% de la production de 2018 ([figure 1-2-a](#)). En comparant la répartition des modes de production de l'électricité mondiale

avec celle de la France ([figure 1-2-b](#)), on constate que la situation énergétique mondiale diverge de celle de la France. Contrairement à la France, la production d'électricité mondiale est majoritairement issue des systèmes de thermique à flamme.

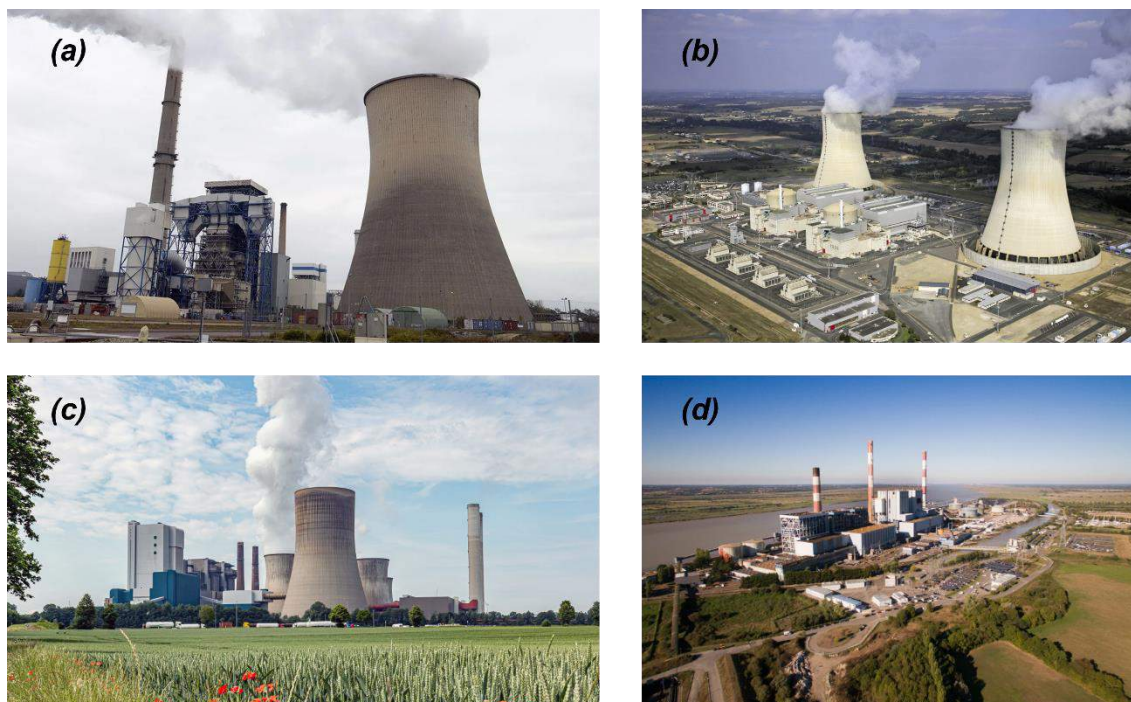


Figure 1-1 : Exemple de centrales thermiques utilisant des ressources non renouvelables. Centrales à gaz de Saint Avold, France (a). Centrale nucléaire de Civaux, France (b). Centrale à charbon du Havre, France (c). Troisième tranche de la centrale à fuel de Cordemais (d).

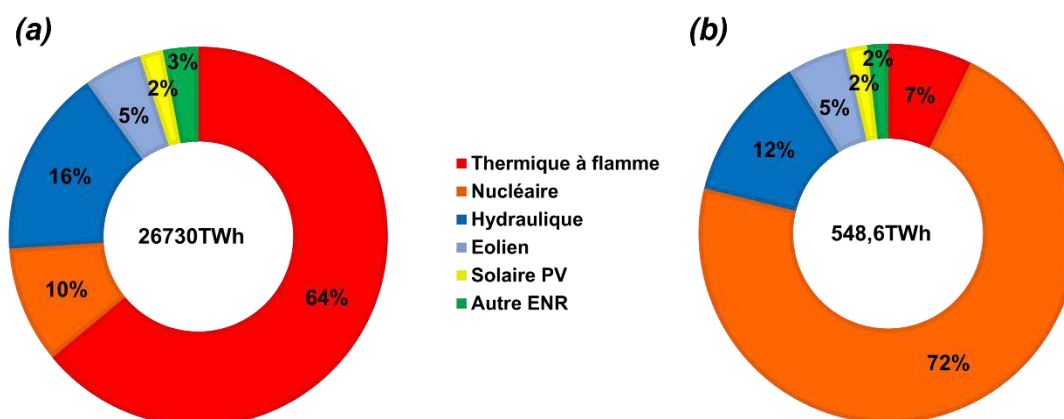


Figure 1-2 : Répartition des modes de production d'électricité en 2018. (a) Répartition mondiale (International Energy Agency 2019). (b) Répartition en France (Réseau de Transport d'Électricité 2019).

L'utilisation de technologie de conversion d'énergie renouvelable semble être la seule solution liée au problème de l'augmentation de la demande d'électricité mondiale, ainsi qu'au changement climatique causé par l'augmentation de la teneur en GES dans notre atmosphère.

1.1.2.2 Ressources renouvelables et technologies

Il existe de nombreuses technologies permettant de convertir les énergies renouvelables (ENR) en électricité :

- Les centrales thermiques fonctionnant sur de la géothermie de haute température ([figure 1-3-a](#)).
- Les centrales hydrauliques convertissant l'énergie cinétique des courants d'eau en énergie mécanique, puis en électricité via une turbine ([figure 1-3-b](#)).
- Les installations éoliennes (onshore ou offshore) convertissant l'énergie cinétique du vent en énergie mécanique, puis en électricité via un alternateur ([figure 1-3-c](#)).
- Les turbines thermiques à gaz fonctionnant sur la combustion de biomasse issue du recyclage (composte) de matériaux biologiques de types déchets ménagers ou agricoles pour générer de l'électricité ([figure 1-3-d](#)).
- Les centrales solaires utilisant l'énergie solaire pour produire de l'électricité. Les technologies utilisant cette ressource seront détaillées dans la section 1.1.3.



Figure 1-3 : Exemple de technologies de conversion de ressources renouvelables en électricité. Centrale géothermique - Bouillante en Guadeloupe, France (a). Centrale hydraulique - Grand'Maison (1800MW) en Isère, France (b). Parc éolien - Fruges (140MW) au Pas de Calais, France (c). Centrale de cogénération de bois - Smurfit Kappa Biganos (140MW) en Gironde, France (d).

D'après le rapport de l'agence internationale de l'énergie (IEA) 2019 (International Energy Agency 2019), la part des ENR à l'horizon 2040 représentera 44% de la production mondiale ([figure 1-4-a](#)). Toujours d'après le même rapport, en suivant une politique axée vers le développement durable, celles-ci représenteront alors 67% de la production mondiale ([figure 1-4-b](#)). Les enjeux liés à ces estimations sont à la fois sociaux, économiques, écologiques et technologiques. L'aspect socio-écologique se traduit par la pollution et le changement climatique lié à l'augmentation de la teneur en GES dans l'atmosphère. L'aspect économique est lié à la raréfaction des ressources non renouvelables causant une augmentation de leurs prix. D'un point de vue technico-économique, il est important de développer des systèmes de conversion

d'ENR qui soient compétitifs en matière de coût d'investissement et de production en comparaison avec les systèmes utilisant des ressources non renouvelables.

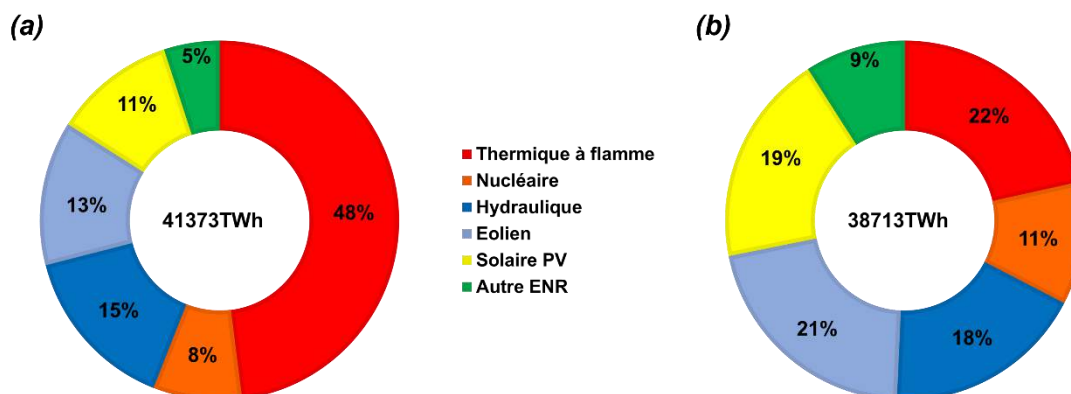


Figure 1-4 : Estimations de la répartition des modes de production d'électricité à l'horizon 2040. Estimations selon la politique énergétique actuelle (a). Estimations selon une politique axée sur le développement durable (b). (International Energy Agency 2019)

En comparant les résultats évalués en 2018 (figure 1-2-a) et les estimations à l'horizon 2040 selon les deux politiques citées (figure 1-4), on note que la part du solaire PV est amenée à prendre le plus d'ampleur au cours du temps. Ces estimations se justifient d'une part par les avancées technologiques de ce système de production, d'autre part par le grand potentiel de l'énergie solaire à la surface de la Terre.

1.1.3 L'énergie solaire pour la production d'électricité

Si la ressource solaire présente un grand potentiel, nous pouvons nous interroger sur les points qui limitent la production d'électricité via celle-ci. Pour répondre à cette question, nous allons tout d'abord faire un point sur la distribution de l'énergie solaire sur la surface de la Terre. Ensuite, nous rappellerons les différentes technologies utilisées pour convertir l'énergie solaire en électricité. Enfin, nous expliquerons la raison pour laquelle la technologie des CSTC (centrale solaire thermodynamique à concentration) semble être la plus adaptée à la production d'électricité à grande échelle.

Le soleil est considéré comme un corps noir avec une température de surface apparente T_s estimée à $5800K$ qui émet un rayonnement diffus dans tout le système solaire. Ce corps céleste présente une masse d'environ $2 \cdot 10^{30} Kg$ dans une proportion d'environ 75% d'hydrogène et 25% d'hélium. Des réactions de fusion nucléaire au sein du noyau permettent la transformation de l'hydrogène en hélium libérant ainsi une grande quantité d'énergie radiative. Cette énergie est estimée à $63 MW \cdot m^{-2}$ à sa surface (Fernández-García et al. 2010). Le flux d'énergie solaire reçue sur la Terre par unité de surface perpendiculaire aux rayons est réduit à $1368 W \cdot m^{-2}$ à cause de la distance séparant la Terre du soleil. Cette densité de flux radiatif est définie comme étant la constante solaire ou encore DNI (Direct Normal Irradiation). L'atténuation du DNI sous l'influence de l'atmosphère terrestre donne une valeur de densité maximum mesurée au sol égale à $1000 W \cdot m^{-2}$ lorsque le soleil est à son zénith et que le temps est clair. En dépit de cela, la quantité d'énergie solaire emmagasinée sur Terre en 2

heures suffirait à satisfaire les besoins énergétiques annuels de l'humanité évalués à $18,78 \text{ TW}_{an}$ en 2018 (International Energy Agency 2020).

La [figure 1-5](#) montre que le DNI n'est pas uniformément réparti sur la surface de la Terre. Il s'agit ici d'une représentation moyenne de la fraction du rayonnement solaire qui atteint directement le sol.

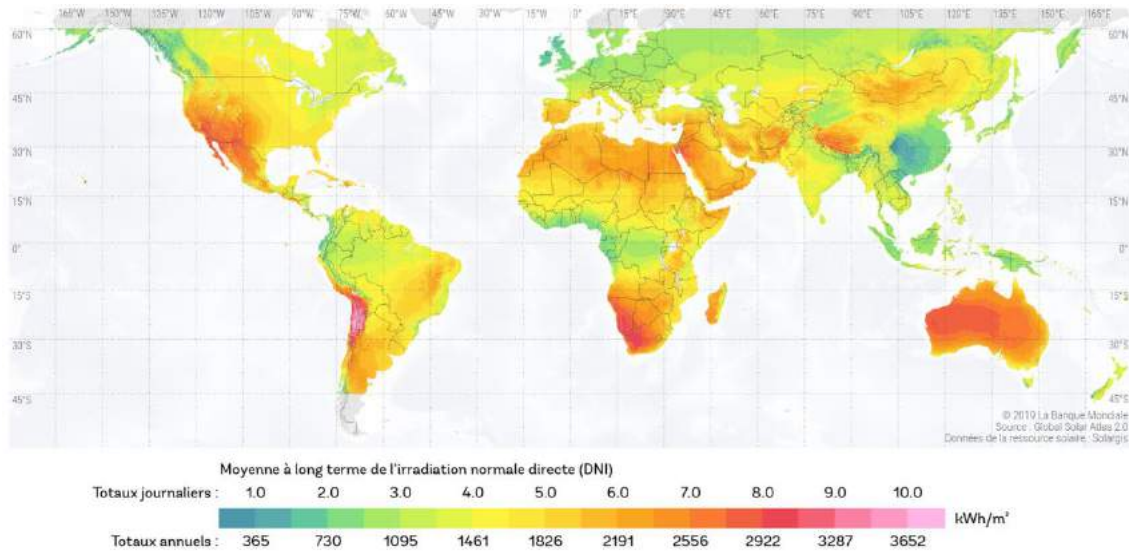


Figure 1-5 : Carte mondiale de l'irradiation normale directe en $\text{KW} \cdot \text{m}^{-2}$ (Global Solar Atlas 2019).

Le spectre du rayonnement solaire est reparti essentiellement en trois zones ([figure 1-6](#)) : le rayonnement ultraviolet (UV), le rayonnement visible, et le rayonnement infrarouge (IR). La part énergétique de ces trois zones valent respectivement 10%, 40% et 50%.

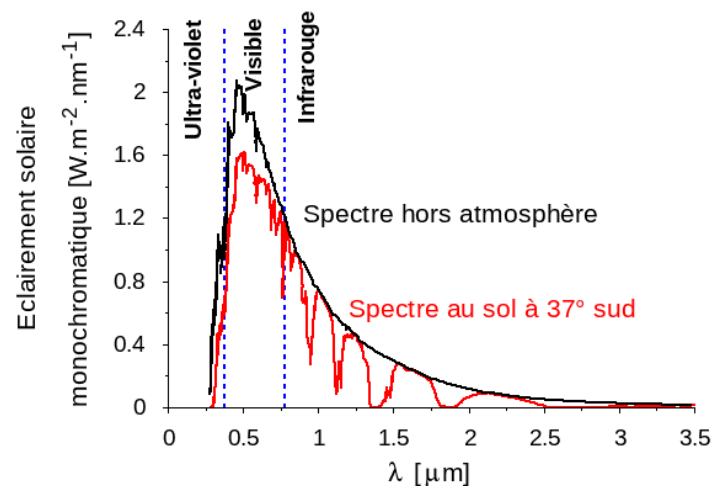


Figure 1-6 : Eclairement solaire monochromatique hors atmosphère (noire), et au sol à 37° sud (rouge) (ASTM International 1998).

Différentes technologies permettent de convertir le rayonnement solaire sous des formes diverses selon l'usage que l'on veut en faire. Nous pouvons citer par exemple :

- La conversion photovoltaïque (PV) pour la production d'électricité.
- La photosynthèse pour la génération de biomasse et biocarburant.

- La photocatalyse pour le traitement de l'air ou de l'eau.

Le rayonnement solaire peut aussi être converti en chaleur par le biais de gaz, de liquides ou encore de solides. C'est le domaine du solaire thermique dont les températures vont de 400 à 1500K. L'énergie thermique ainsi produite peut être mise à profit pour :

- Le chauffage sanitaire ou industriel.
- Le séchage de matériaux.
- Le chauffage de bâtiments.
- La production d'électricité via des cycles thermodynamiques.

Nous retiendrons de cette partie qu'il existe deux méthodes permettant de produire de l'électricité à partir de l'énergie solaire : le solaire PV et le solaire thermodynamique à concentration.

1.1.3.1 Le solaire photovoltaïque

Dans le cas de cette technologie, l'énergie solaire est convertie directement en électricité à partir de matériaux dits semiconducteurs dopés. Les cellules PV sont constituées d'une ou plusieurs jonctions de matériaux dopé « p » (déficit d'électrons) et dopé « n » (excédant d'électrons). Dans ces dispositifs, l'énergie du photon absorbé par le matériau va permettre de créer une nouvelle paire d'électron-trou à la condition que cette énergie soit supérieure ou égale au « gap » de la bande interdite du matériau. Le champ électrique présent au niveau de la jonction p-n permet ensuite de séparer les différentes charges et de les diriger vers des collecteurs métalliques créant ainsi un courant électrique continue ([figure 1-7-a](#)).

Un panneau PV est composé de plusieurs parties ([figure 1-7-b](#)). La partie supérieure du panneau (face soleil) est constituée d'un verre trempé permettant de protéger le panneau des chocs, des rayons UV et de l'humidité. La cellule (partie interne du panneau) est recouverte d'une membrane en EVA (résine chimique très adhésive) qui assure une protection de la cellule contre l'humidité et l'oxydation. La partie inférieure (face non ensoleillée) est constituée de matériaux en polymère (type Tedlar) qui protège le panneau des UV, des gradients de température et des réactions chimiques pouvant avoir lieu.

L'utilisation d'un dispositif PV est devenue monnaie courante grâce à la grande maîtrise de la technologie des cellules PV mais également grâce à son utilisation flexible, modulable et mobile. Ces technologies ont cependant des limites qui empêchent l'investissement dans des projets de grande envergure. La première limite est liée au faible rendement de ces dispositifs (en moyenne compris entre 15 et 25% pour les cellules commercialisées). Les faibles rendements entraînent en effet une augmentation du temps de retour sur investissement. La deuxième limite est liée au stockage de l'énergie électrique produite au moyen de batteries dont l'efficacité est conditionnée par les cycles de charge/décharge et dont la durée de vie varie avec leur capacité de stockage, les conditions météorologiques ...

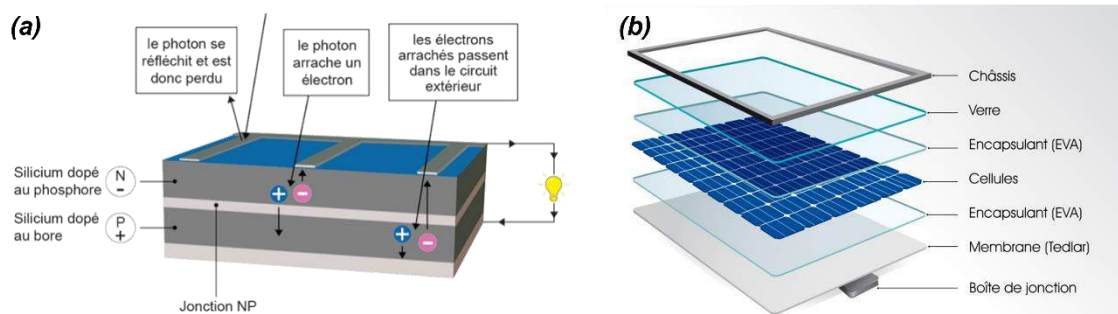


Figure 1-7 : Schéma de principe d'une cellule PV (a). Composition d'un panneau PV classique (b). (JADE Technologie s. d.)

1.1.3.2 Le solaire thermodynamique

Les installations de centrales solaires thermodynamiques convertissent le rayonnement solaire en chaleur afin de faire fonctionner des cycles thermodynamiques et ainsi produire de l'électricité. La décomposition de la procédure de production d'électricité en plusieurs étapes permet de rajouter un système de stockage thermique dans l'installation. Ce type de stockage bien maîtrisé et mature, donne un grand avantage aux CSTC par rapport aux installations PV. Les CSTC permettent également de produire de la chaleur industrielle ou de l'hydrogène (Vant-Hull 2008). Le principe de fonctionnement sera détaillé dans la section.

1.1.3.3 Comparaison des deux technologies

Dans les parties précédentes, nous avons brièvement montré les limites des panneaux PV. Ces limites sont essentiellement liées à leurs faibles rendements ainsi qu'à la difficulté de stocker l'énergie électrique sur des installations de grande envergure.

Le rapport d'étude réalisé par le World Bank Groupe sortie en 2021 (World Bank Group 2021) a chiffré le coût en dollar américain (US) du KWh produit par les deux technologies (PV et CSTC) associant un système de stockage. La [figure 1-8](#) montre que l'électricité produite par les CSTC est moins coûteuse que celle produite par les panneaux PV. On note aussi que les installations PV ayant une durée de vie de plus de 15 ans sont plus rentables que celles ayant une durée de vie de 10ans. La différence de coût entre les installations PV et les CSTC est essentiellement due à la capacité des modules de stockage utilisés. Les installations PV utilisent des batteries pour stocker l'énergie électrique, ces dernières peuvent dans le meilleur des cas décharger 10MW pendant quelques heures (batteries à flux ou batteries au sulfure de sodium). Les installations CSTC utilisent des réservoirs pour stocker l'énergie sous forme de chaleur. Ces modules peuvent décharger jusqu'à 1 GW pendant plusieurs heures (système de stockage de sel fondu ou stockage d'énergie sous forme d'air comprimé).

Néanmoins le coût d'investissement des installations des CSTC est plus important que celui des installations PV. Quelques chiffres d'investissements des installations de production d'électricité aux États-Unis d'Amérique (International Energy Agency 2018) :

- Installation CSTC : $3908 \frac{\$}{KW}$
- Installation PV : $2169 \frac{\$}{KW}$
- Installation éolienne : $1576 \frac{\$}{KW}$
- Installation éolienne offshore : $4648 \frac{\$}{KW}$
- Installation à flamme (standard) : $1040 \frac{\$}{KW}$
- Installation à flamme (avancée) : $640 \frac{\$}{KW}$

Ces chiffres indiquent que le coût d'investissement des CSTC est 2.5 fois plus élevées que celui des installations éoliennes onshore et quasiment deux fois plus élevé que celui des installations PV. La comparaison avec les systèmes de production avancée utilisant les ressources non renouvelables montre que le coût d'investissement des CSTC est 6 fois plus important. Ces comparaisons montrent qu'il est important d'optimiser les performances des CSTC pour les rendre compétitives.

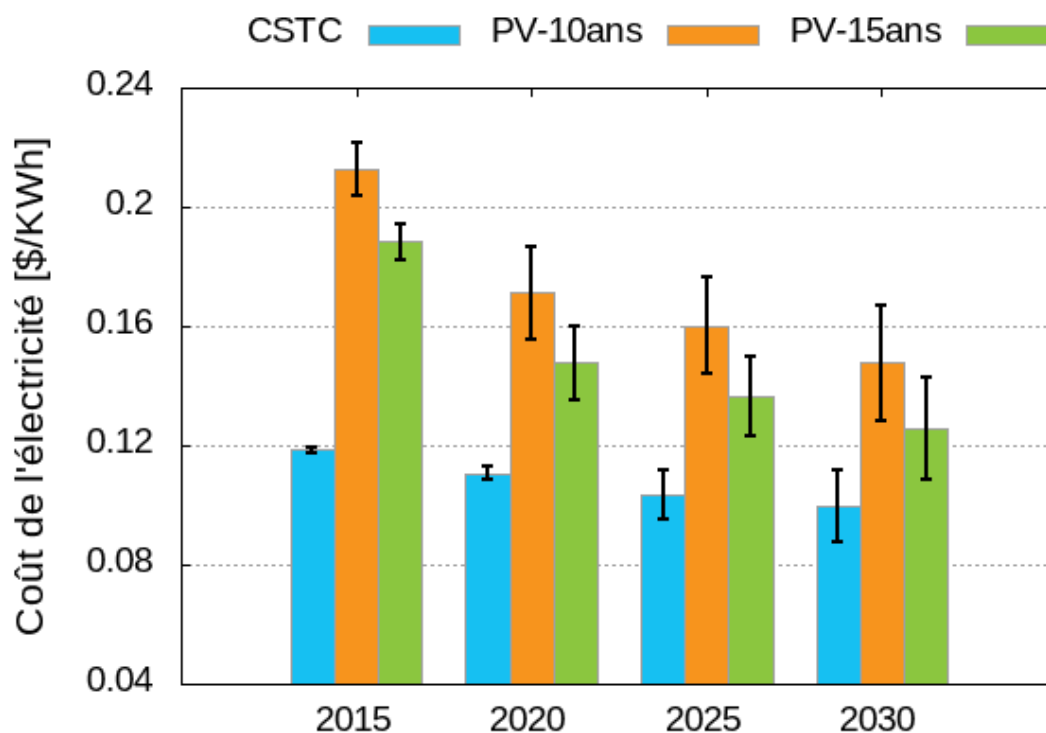


Figure 1-8 : Coût de l'électricité selon le mode de conversion de l'énergie solaire. Installation PV avec un module de stockage de 9 heures d'une durée de vie de 10 ans (orange), et de 15 ans (en vert). Installation CSTC avec un module de stockage de 9 heures avec une durée de vie comprise entre 25 et 30 ans. (World Bank Group 2021).

Nous pouvons retenir de ce chapitre que les CSTC peuvent être une alternative pour la production d'électricité à grande échelle à partir de ressources renouvelables. L'incorporation de modules de stockage permet de pallier les problèmes liés à l'intermittence de l'énergie solaire. Néanmoins le coût élevé d'investissement de cette technologie l'empêche d'être compétitive par rapport à d'autres technologies.

1.2 Centrale solaire thermodynamique à concentration

Les installations CSTC ont l'avantage de pouvoir conserver l'énergie sous forme de chaleur, via des modules de stockage thermique, pendant plusieurs jours avec peu de pertes thermiques. La chaleur stockée peut alors être utilisée pour assurer une production d'électricité continue la nuit ou pendant les périodes nuageuses de la journée. De ce fait, les CSTC peuvent être assimilées à une technologie de production d'énergie ENR continue. Ce type de fonctionnement lui offre un grand avantage par rapport aux types de technologies produisant une ENR intermittente comme l'éolien ou le solaire PV.

1.2.1 Principe de fonctionnement

La [figure 1-9](#) correspond à la représentation simplifiée du fonctionnement d'une CSTC. Celle-ci est constituée de concentrateurs optiques, d'une cellule réceptrice, d'un cycle thermodynamique, d'une unité de stockage thermique et parfois d'un système d'appoint utilisant une énergie fossile. Le concentrateur optique collecte et concentre l'éclairement solaire vers la cellule réceptrice. Cette dernière convertit l'énergie radiative en énergie thermique (chaleur). La chaleur emmagasinée par la cellule réceptrice est ensuite transmise au fluide caloporteur qui alimente un cycle thermodynamique pour la production d'un travail mécanique. Enfin, un alternateur convertit l'énergie mécanique en énergie électrique.

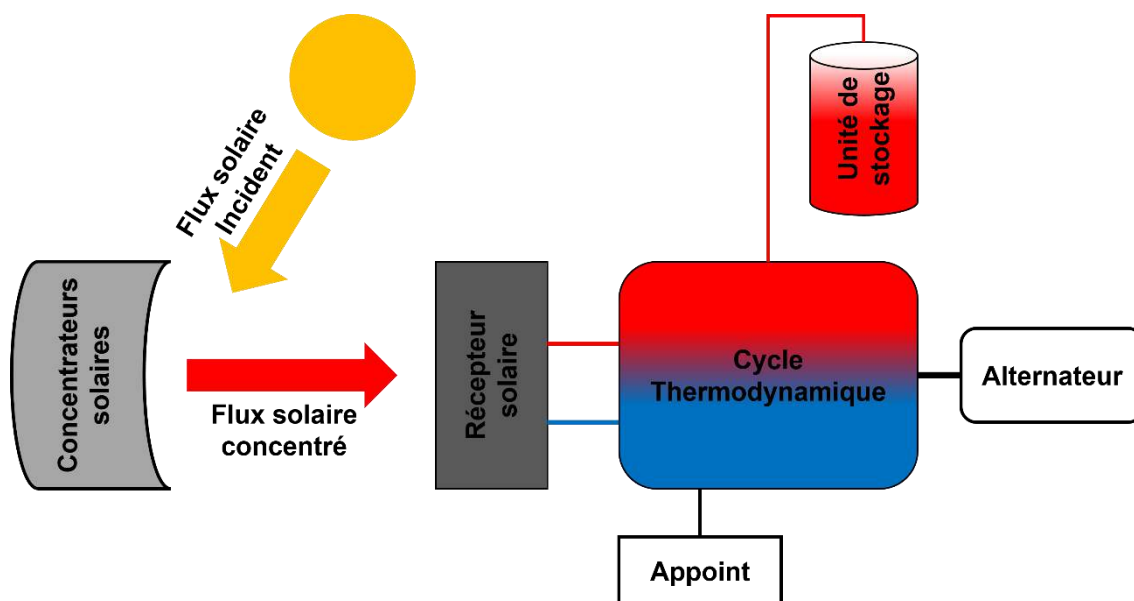


Figure 1-9 : Schéma simplifié d'une centrale solaire thermodynamique à concentration.

1.2.2 Classification des technologies

Les technologies des CSTC peuvent être réparties en quatre groupes distincts. Chaque technologie ayant son mode et ses limites de fonctionnement. Nous nous efforcerons de donner les différentes techniques utilisées de CSTC dans ce chapitre en mettant plus l'accent sur la description de la technologie qui nous intéresse. Les CSTC peuvent être classées selon la mobilité ou non du récepteur solaire. Aussi, nous pouvons identifier deux grandes familles de CSTC :

- Les centrales à récepteurs mobiles.
- Les centrales à récepteurs fixes.

Dans la première catégorie de centrale, les récepteurs se meuvent en synchronisation avec le dispositif de concentration. Les deux technologies utilisant ce mode de fonctionnement présentent une efficacité optique accrue en comparaison avec les systèmes à récepteur fixe.

1.2.2.1 Technologie des centrales à tour

La technologie des centrales thermodynamiques à tour est celle qui fera l'objet de notre étude dans ce travail de thèse. En effet, cette technologie est celle sur laquelle il y a plusieurs améliorations qui peuvent être apportées sur les différents blocs de l'installation afin d'en augmenter sa productivité : les miroirs, les récepteurs, le fluide caloporteur et le système de stockage (Gretz, Strub, et Palz 1985). Le fluide caloporteur peut atteindre des températures supérieures à 1000°C . Les hautes températures atteintes permettent ainsi d'initier des cycles thermodynamiques tels que le cycle de Brayton ou des cycles combinés. La collecte et la concentration des rayons solaires se fait par l'intermédiaire d'un champ d'héliostats, composé de miroirs de différentes formes (plats ou légèrement concaves) et de diverses tailles (40 à 178 m^2) disposés de manière à réduire l'ombrage (World Bank Group 2021), [figure 1-10-a](#). Avec une puissance nette installée de 377 MW , la centrale Ivanpah Solar Electric Generating System (ISEGS) est la plus grande CSTC présente dans le monde ([figure 1-11-a](#)).

1.2.2.2 Technologie à miroirs de Fresnel

La technologie des miroirs de Fresnel est la moins performante car les températures atteintes par le fluide caloporteur n'excèdent pas 500°C . La collecte du rayonnement solaire se fait par un ensemble de longs miroirs plans disposés en parallèle. Ces derniers vont réfléchir les radiations vers de seconds miroirs placés en opposition et ainsi permettre de chauffer un récepteur linéaire. Chacun des miroirs peut pivoter en suivant la course du soleil pour rediriger et concentrer en permanence les rayons solaires vers un tube ou un ensemble de tubes récepteurs linéaires fixes ([figure 1-10-b](#)). Le principal atout de cette technologie est son faible coût de déploiement. On peut citer en exemple la centrale Puerto Errado II située en Espagne ([figure 1-11-b](#)).

1.2.2.3 Technologie à miroirs paraboliques

La technologie des miroirs paraboliques possède le meilleur rendement optique. La température de fonctionnement de ce système peut atteindre 1000°C assurant ainsi des rendements de conversion solaire/électrique de 25 à 30% . La collecte et la concentration des radiations solaires se fait par un miroir parabolique. La mobilité de

l'ensemble (miroir et récepteur) permet de toujours de suivre la course du soleil ([figure 1-10-c](#)). On peut citer en exemple les unités présentes sur la plateforme d'Albuquerque ([figure 1-11-c](#)).

1.2.2.4 Technologie à miroirs cylindro-paraboliques

Dans le cas de cette technologie, les miroirs réfléchissants ont une forme cylindro-parabolique et sont rangés en parallèle. Cet arrangement permet de recueillir le rayonnement solaire incident et de le concentrer sur un récepteur solaire de forme cylindrique placé le long de l'axe transversal des miroirs. Les miroirs sont placés préférentiellement selon un axe nord-sud et pivotent afin de suivre la trajectoire du soleil ([figure 1-10-d](#)).

Le fluide caloporteur circulant dans le récepteur, généralement de l'huile ou des sels fondus, récupère la chaleur et la véhicule vers des échangeurs de chaleur afin de vaporiser de l'eau. Sous cette phase, elle permettra par la suite d'actionner une turbine. Le récepteur peut être constitué d'un tube d'acier inoxydable réfractaire (récepteur surfacique) recouvert d'une couche optiquement sélective afin de maximiser l'absorption du rayonnement solaire dans le visible tout en limitant les pertes radiatives dans l'infrarouge. L'efficacité de la conversion solaire/thermique peut être par ailleurs grandement améliorée si ce récepteur est enveloppé d'une épaisseur de verre et placé sous-vide (diminution des pertes convectives).

La technologie des miroirs cylindro-paraboliques est la plus utilisée, représentant 90% de la production d'électricité par CSTC. Sa popularité se justifie par sa maturité. Elle est la plus maîtrisée avec une utilisation commerciale de plus de 20 ans. La température atteinte au niveau du fluide caloporteur permet d'initier des cycles thermodynamiques de Rankine. Avec une puissance nette installée de 340 MW, la centrale Solar Energy Generating System (SEGS) est la deuxième plus grande CSTC présente dans le monde. Cette dernière est située dans le désert de Mojave, en Californie (USA) ([figure 1-11-d](#)).

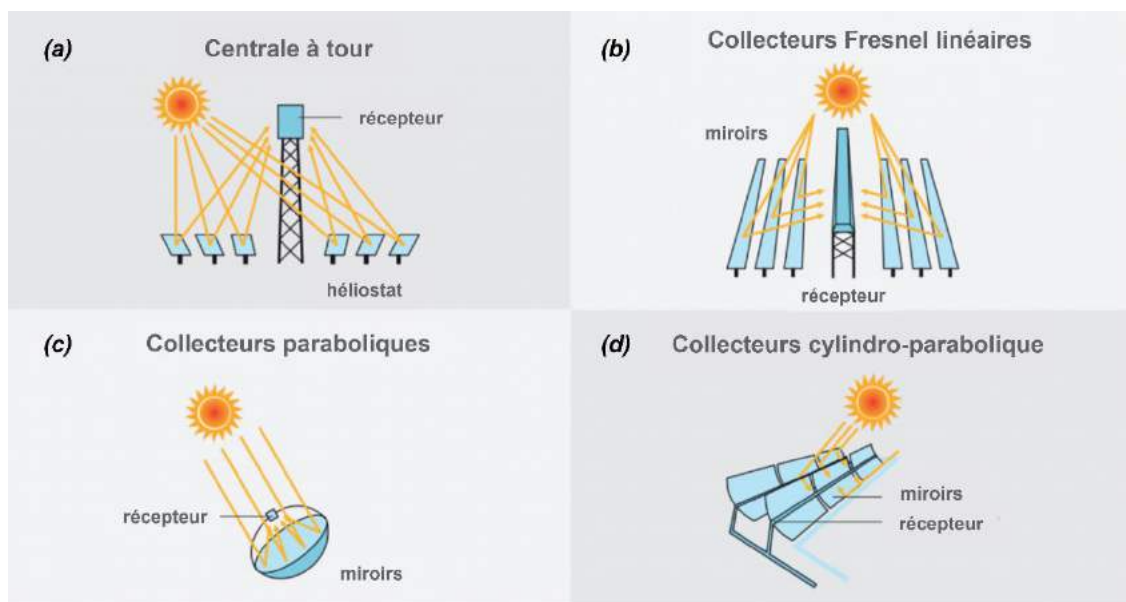


Figure 1-10 : Schéma de principe des différentes technologies de CSTC : centrale à tour (a), miroirs de Fresnel (b), miroirs paraboliques (c) et miroirs cylindro-paraboliques (d).

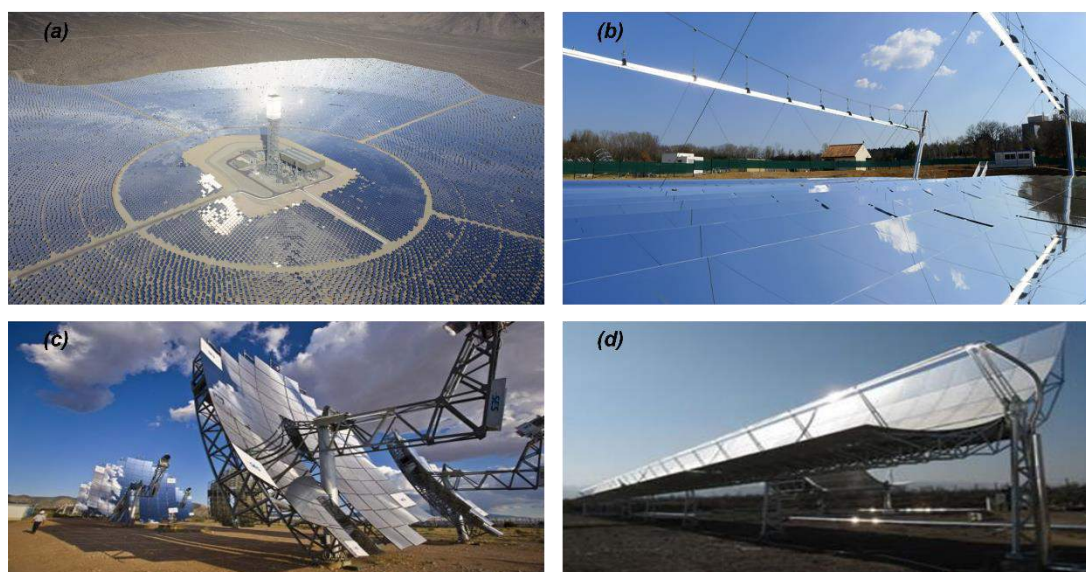


Figure 1-11 : Exemple de technologies de CSTC. Centrale solaire à tour, Ivanpah - Mojave, Californie, USA (a). Centrale Puerto Errado II, Murcia, Espagne (b). Unité de production à miroir parabolique avec un moteur de Stirling, plateforme d'Albuquerque - Nouveau-Mexique, USA (c). Centrale SGES (354MW), Mojave - Californie, USA (d).

Tableau 1-2 : Classification des performances des différentes technologies de CSTC. (Olalde et Flamant 2012; Romero et González-Aguilar 2014)

Technologie	Cylindro-parabolique	Fresnel	Parabolique	Tour
Température du fluide en sortie du récepteur	400 - 500 °C	350°C	150-1000°C	600-1000°C
Cycle thermodynamique**	RC, CC	RC	RC, SC	RC, BC, CC
Capacité typique [MW]***	10-300	10-200	0.01-0.025	10-200
Rendement actuel [%] ****	15-16	8-10	20-25	16-17
Rendement prévisionnel après amélioration [%]****	18	12	30	25-28

*Facteur de concentration : ratio entre la surface éclairée du récepteur et la surface totale des miroirs.

**Cycle Thermodynamique : Cycle de Rankine (RC), Cycle de Brayton (BC), Cycle Combiné (CC) et Cycle de Stirling (SC).

***Capacité typique : énergie solaire pouvant être absorbée par le récepteur composant la CSTC.

**** Rendement de conversion solaire/électrique.

1.2.3 Centrale solaire à tour pour la production à grande échelle

Le schéma de principe d'une CSTC est présenté sur la [figure 1-12](#). Les éléments clés qui nécessitent des études de recherche et développement sont :

- Le champ d'héliostats : module permettant la collecte et la concentration des rayons solaires.
- Le récepteur solaire : module permettant la conversion des rayons solaires concentrés en chaleur.
- Le cycle thermodynamique : cycle permettant la conversion de la chaleur en travail.
- Le fluide de travail (FT) : le fluide caloporteur utilisé pour faire fonctionner le cycle thermodynamique.
- Le réservoir de stockage : module permettant le stockage de la chaleur et la production continue d'électricité.

Le champ d'héliostats est le premier élément de la centrale comme évoqué précédemment. Il permet de collecter et de concentrer les rayons solaires vers le récepteur solaire. Les miroirs composant le champ d'héliostats doivent être placés et orientés de manière à limiter au maximum les effets d'ombrages. Kreith et Goswami (Kreith et Goswami 2007) ont fourni des spécifications pour le positionnement, le pilotage et la taille des miroirs à respecter suivant le type d'utilisation. Des études sont encore menées sur l'amélioration des performances des centrales solaires au travers de la disposition des miroirs dans le champ ainsi que de leurs tailles (Chen, Rao, et Liao 2018).

Le récepteur solaire est le second élément de la centrale mais également l'élément le plus étudié car c'est celui qui permettra d'optimiser de manière significative les performances des CSTC. Il sera l'objet d'une étude approfondie dans le cadre de cette thèse, notamment sur l'amélioration de la sélectivité spectrale par le biais de ses propriétés radiatives. En effet, l'optimisation de ces dernières permettrait d'augmenter le rendement global des CSTC de 5 à 10%. Nous présenterons dans le chapitre suivant différentes technologies associées à la mise en place de ces récepteurs solaires.

Le rendement de conversion de la chaleur en électricité va dépendre du cycle thermodynamique initié. Ce dernier dépendra lui-même du FT choisi mais aussi de la température nominale de fonctionnement espérée pour le fluide. Les centrales solaires de grandes envergures présentes dans le marché de production d'électricité utilisent généralement un cycle thermodynamique de Rankine afin d'atteindre des températures nominales de fonctionnement de l'ordre de 700°C (Boretti, Castelletto, et Al-Zubaidy 2019).

L'augmentation de la température nominale de fonctionnement à des valeurs supérieures à 1000°C en utilisant différents FT (air/eau) permettrait d'initier des cycles combinés tels que Brayton/Rankine. Nous savons que cette technologie est déjà relativement bien maîtrisée dans le cas des centrales thermiques conventionnelles (Colpier et Cornland 2002; Polyzakis, Koroneos, et Xydis 2008; Valdés, Durán, et Rovira 2003).

Les installations de CSTC présentes dans le monde utilisent trois types de fluides de travail (Boretti 2018) :

- Les huiles synthétiques,
- Les sels fondus,
- L'eau sous sa phase liquide et vapeur.

L'énergie thermique non utilisée pour la production d'électricité est souvent stockée dans des réservoirs durant de nombreuses heures et avec peu de pertes. Cette thématique du stockage thermique a fait l'objet de nombreux travaux afin d'en améliorer l'efficacité (Das et Chandramohan 2021; Salilih et Abu-Hamdeh 2021; Yu et al. 2020).

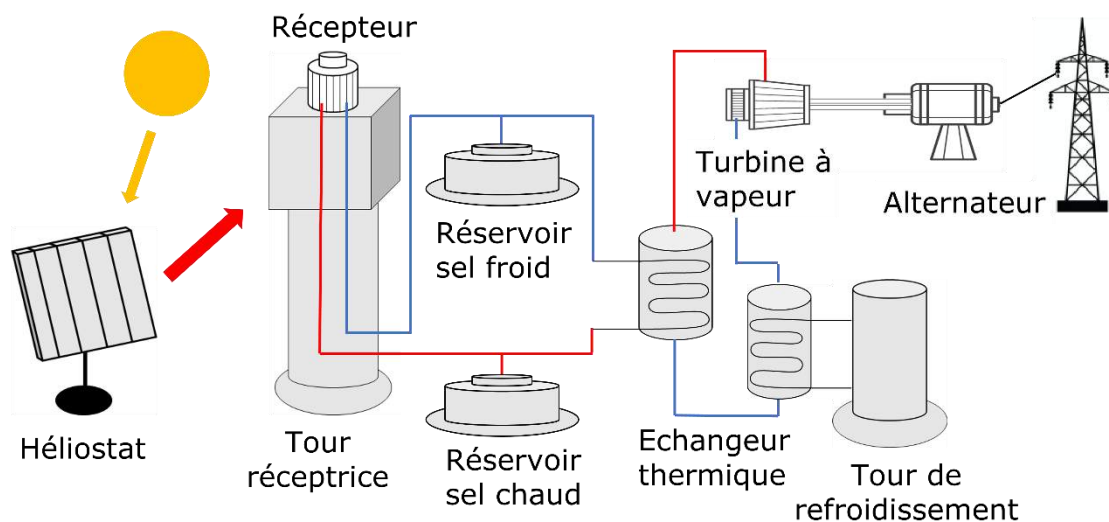


Figure 1-12 : Schéma de principe d'une centrale solaire thermodynamique concentrée à tour.

1.2.4 Bilan d'énergie d'une centrale solaire à tour

Pour calculer le rendement global d'une centrale solaire à tour, on peut décomposer la centrale en trois blocs comme le montre la [figure 1-13](#):

- Le bloc de conversion solaire/thermique assuré par le champ d'héliostat et le récepteur solaire.
- Le bloc de conversion thermique/mécanique associé aux éléments assurant le cycle thermodynamique et les systèmes de stockage et d'appoint.
- Le bloc de conversion mécanique/électrique.

Dans le cadre de cette thèse, nous allons nous focaliser sur l'amélioration du rendement de conversion solaire/thermique au niveau du récepteur solaire. A cette fin, nous allons nous appuyer sur la [figure 1-14](#) et mener un bilan d'énergie afin de donner une expression du rendement de conversion solaire/thermique.

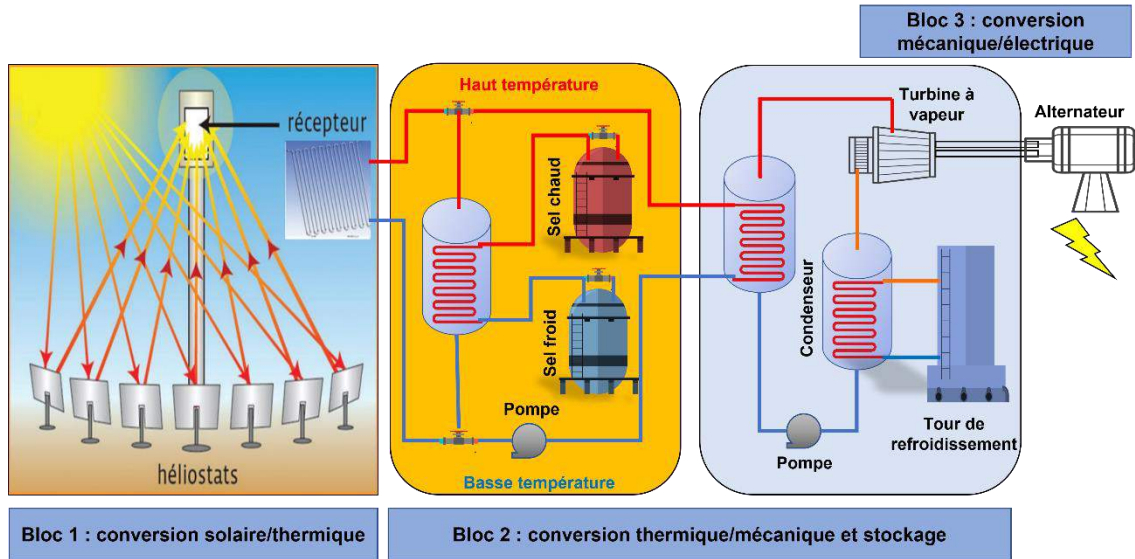


Figure 1-13 : Répartition des étapes de conversion de l'énergie dans une centrale à tour.

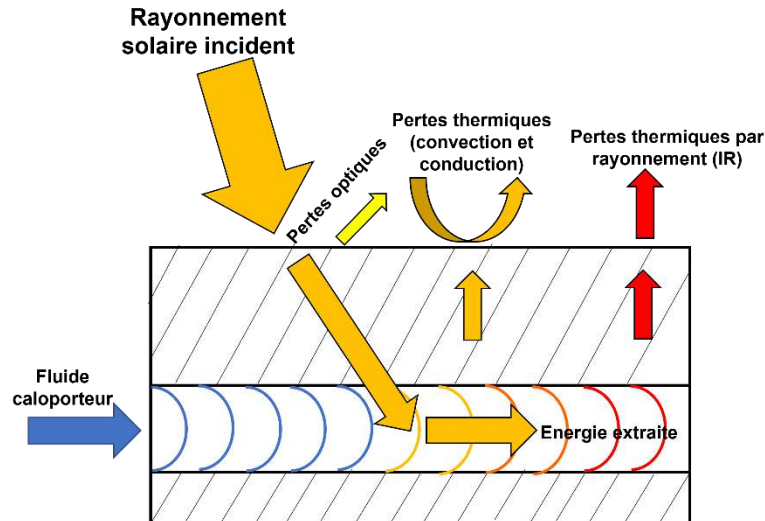


Figure 1-14 : Bilan d'énergie au niveau du récepteur solaire.

Le rendement de conversion solaire/thermique $\eta_{\frac{S}{T}}$ peut s'exprimer comme le rapport entre le flux de chaleur utile φ_{utile} permettant de chauffer le fluide caloporteur au flux incident $\varphi_{incident}$ (Hischier et al. 2009; Poživil et al. 2014a; Sedighi et al. 2019) :

$$\eta_{\frac{S}{T}} = \frac{\varphi_{utile}}{\varphi_{incident}} \quad 1.1$$

Le flux incident provient de la concentration C de l'éclairement solaire E_S réfléchi par les héliostats et est conditionné par le rendement optique η_{opt} de ces derniers tel que :

$$\varphi_{incident} = \eta_{opt} C E_S \quad 1.2$$

Le flux utile déterminé à l'équilibre thermique correspond à la différence entre le flux entrant (absorbé) $\varphi_{entrant}$ et le flux sortant (pertes thermiques) $\varphi_{sortant}$:

$$\varphi_{utile} = \varphi_{entrant} - \varphi_{sortant} \quad 1.3$$

Le flux entrant est donné par la fraction absorbée du flux radiatif incident au niveau du récepteur et est donc conditionné par son absorptivité hémisphérique totale $\alpha_{hémis}$. Généralement, le récepteur solaire est enrobé par un vitrage qui aura pour rôle de limiter les pertes thermiques par rayonnement et convection. C'est la raison pour laquelle il faut tenir compte également de la transmissivité hémisphérique totale du vitrage τ_v . En considérant tous ces paramètres, le flux entrant s'exprimera sous la forme suivante :

$$\varphi_{entrant} = \alpha_{hémis} \tau_v \varphi_{incident} \quad 1.4$$

Les pertes radiatives correspondent à un échange entre le récepteur de température T_{rec} et l'atmosphère considérée comme une surface noire à la température T_{atm} . Les autres pertes sont convectives et se situent entre la surface extérieure du récepteur et l'air ambiant à la température T_{amb} . L'ensemble de ces autres pertes peuvent être caractérisées par un coefficient total de pertes H (Spitz et al. 1979). Le flux sortant s'écrit dès lors sous la forme :

$$\varphi_{sortant} = \varepsilon_{hémis} \sigma (T_{rec}^4 - T_{atm}^4) + H(T_{rec} - T_{amb}) \quad 1.5$$

Où $\varepsilon_{hémis}$ est l'émissivité hémisphérique totale.

La combinaison des relations 1.1 à 1.5 permet d'exprimer le rendement de conversion solaire/thermique par la formule ci-dessous :

$$\eta_{\frac{S}{T}} = \alpha_{hémis} \tau_v - \frac{\varepsilon_{hémis} \sigma (T_{rec}^4 - T_{atm}^4) + H(T_{rec} - T_{amb})}{\eta_{opt} C E_S} \quad 1.6$$

La relation 1.6 prend une forme similaire à celle donnée par Weinstein et al.(2015) à l'exception faite que dans notre cas les pertes conductives sont prises en compte. Aux températures élevées ($> 700K$), il est permis de négliger les pertes conducto-convectives et le rayonnement émis par l'atmosphère afin de simplifier la relation 1.6 sous la forme :

$$\eta_{\frac{S}{T}} = \alpha_{hémis} \left(\tau_v - \frac{\varepsilon_{hémis} \tau T_{rec}^4}{\alpha_{hémis} \eta_{opt} C E_S} \right) \quad 1.7$$

L'émissivité et l'absorptivité hémisphérique totale du récepteur s'obtiennent par intégration de l'émissivité monochromatique $E(\lambda)$ sur tout le spectre et en considérant des températures différentes pour la source d'émission, soit T_S pour le soleil et T_{rec} pour le récepteur :

$$\varepsilon_{hémis} = \frac{1}{\sigma T_{rec}^4} \int_0^{\infty} E(\lambda) \pi L^0(T_{rec}, \lambda) d\lambda \quad 1.8$$

$$\alpha_{hémis} = \frac{1}{\sigma T_s^4} \int_0^{\infty} E(\lambda) \pi L^0(T_s, \lambda) d\lambda \quad 1.9$$

Où λ est la longueur d'onde, L^0 la luminance monochromatique du corps noir. Au regard de la relation 1.7 et afin d'améliorer le rendement de conversion solaire/thermique, il est possible de :

- Maximiser le rendement optique des miroirs.
- Augmenter le facteur de concentration.
- Maximiser l'absorptivité hémisphérique totale du récepteur.
- Minimiser l'émissivité hémisphérique totale du récepteur.

Le rendement du cycle thermodynamique peut être associé à celui d'un cycle de Carnot idéal fonctionnant entre la source froide (air ambiant) à T_{amb} et la source chaude (récepteur) à T_{rec} . L'introduction d'un facteur k compris entre 0 et 1 permettra de se rapprocher du cycle réel. En considérant un rendement de 1 pour l'alternateur (qui assure la conversion mécanique/électrique du troisième bloc), nous écrivons le rendement de conversion thermique/électrique sous la forme :

$$\eta_{\frac{T}{E}} = k \left(1 - \frac{T_{amb}}{T_{rec}} \right) \quad 1.10$$

Le rendement global de la centrale est donné par le produit des rendements des différents blocs :

$$\eta_{global} = \alpha_{hémis} \left(\tau - \frac{\varepsilon_{hémis} \tau T_{rec}^4}{\alpha_{hémis} \eta_{opt} C E_s} \right) \left(1 - \frac{T_{amb}}{T_{rec}} \right) k \quad 1.11$$

Cette dernière expression montre que l'une des voies pour augmenter la production d'électricité dans une centrale solaire à tour consiste à optimiser le rendement de conversion solaire/thermique du récepteur utilisé. Cela passe donc par une nette amélioration de sa sélectivité spectrale à savoir une absorptivité monochromatique élevée dans le visible et une émissivité monochromatique faible dans l'infrarouge.

L'autre axe d'amélioration porte sur le fonctionnement de la centrale à des températures plus élevées ($T_{rec} > 1000^\circ\text{C}$). Cet axe découle en fait du précédent puisqu'une température élevée du récepteur permettra au fluide caloporteur circulant au travers celui-ci de présenter des températures plus importantes en sortie.

1.3 Récepteurs solaires pour centrale solaire à tour

Les récepteurs solaires peuvent être classés en fonction de la manière dont le flux radiatif incident est absorbé et transféré au FT :

- Récepteur à éclairage direct.
- Récepteur à éclairage indirect.

Les récepteurs à éclairage direct, classiquement les récepteurs volumiques (figures 1-15-a et 1-15-b), permettent aux flux solaires concentrés de pénétrer en profondeur. Dans ces systèmes, un matériau solide absorbe le rayonnement et le transfère rapidement au FT. En revanche, les récepteurs à éclairage indirect, classiquement les récepteurs surfaciques (figure 1-15-c), maintiennent une séparation physique entre la région d'absorption et le FT. Les récepteurs solaires peuvent être installés soit en configuration à cavité (figure 1-16-a), soit en configuration externe (figure 1-16-b). Le paramètre le plus important de tout récepteur solaire est le rendement de conversion solaire/thermique bien que la température de sortie et la chute de pression du FT soient également des paramètres importants.

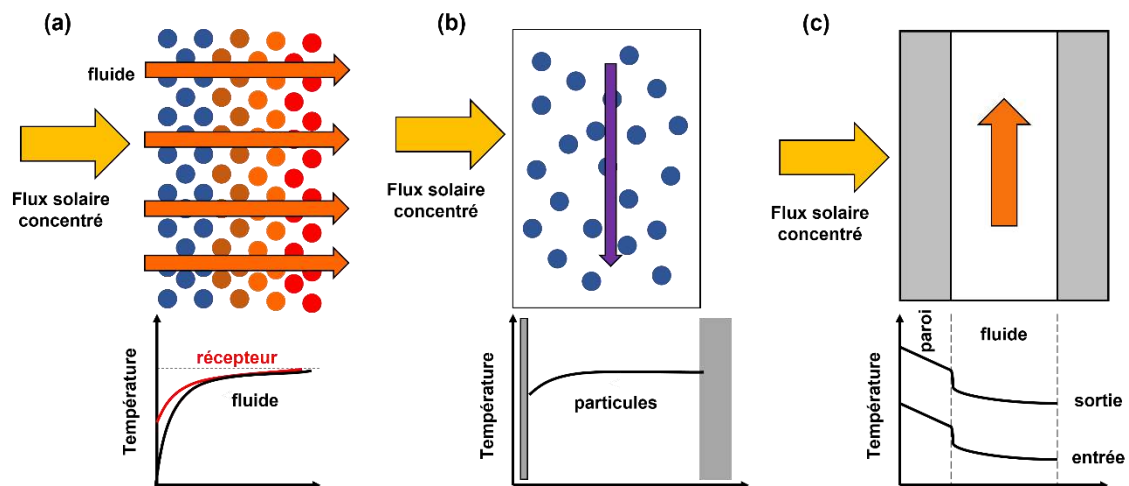


Figure 1-15 : Schéma de principe et profil de température des différentes technologies de récepteur solaire. Récepteur volumique poreux (a). Récepteur volumique à particules (b). Récepteur surfacique (c).

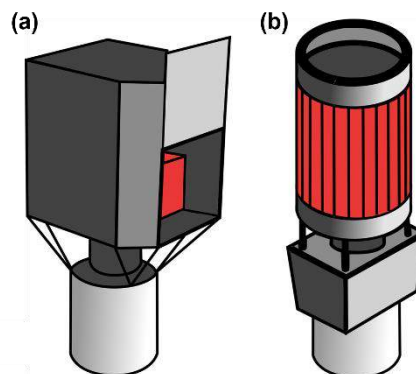


Figure 1-16 : Les deux types de configurations des récepteurs solaires sur la tour réceptrice : à cavité (a) et externe (b). (Guévelou 2015)

1.3.1 Récepteur à éclairage indirect

Les récepteurs à éclairage indirect, ou récepteurs surfaciques, sont étudiés depuis les années 1970 et ont été installés pour la première fois dans les années 1980 et 1990 dans des installations prototypes de grande échelle comme Solar One et Solar Two (Radosevich 1988). Ces récepteurs sont conventionnellement constitués d'une série de tubes à paroi mince (en acier inoxydable ou en alliage) disposés de manière à faire circuler le FT sur plusieurs passages ([figure 1-17](#)). Dans ces systèmes, les rayons solaires viennent chauffer les parois externes. Le fluide, situé à l'intérieur, récupère l'énergie par convection. Ce type de récepteur subi des pertes thermiques élevées par rayonnement. La technologie des récepteurs surfaciques tubulaires est de loin la technologie la plus mature sur le marché. La plupart des exemples commerciaux utilisent un liquide comme FT, mais des récepteurs tubulaires ont également été proposés pour des fluides de travail en phase gazeuse pressurisée.

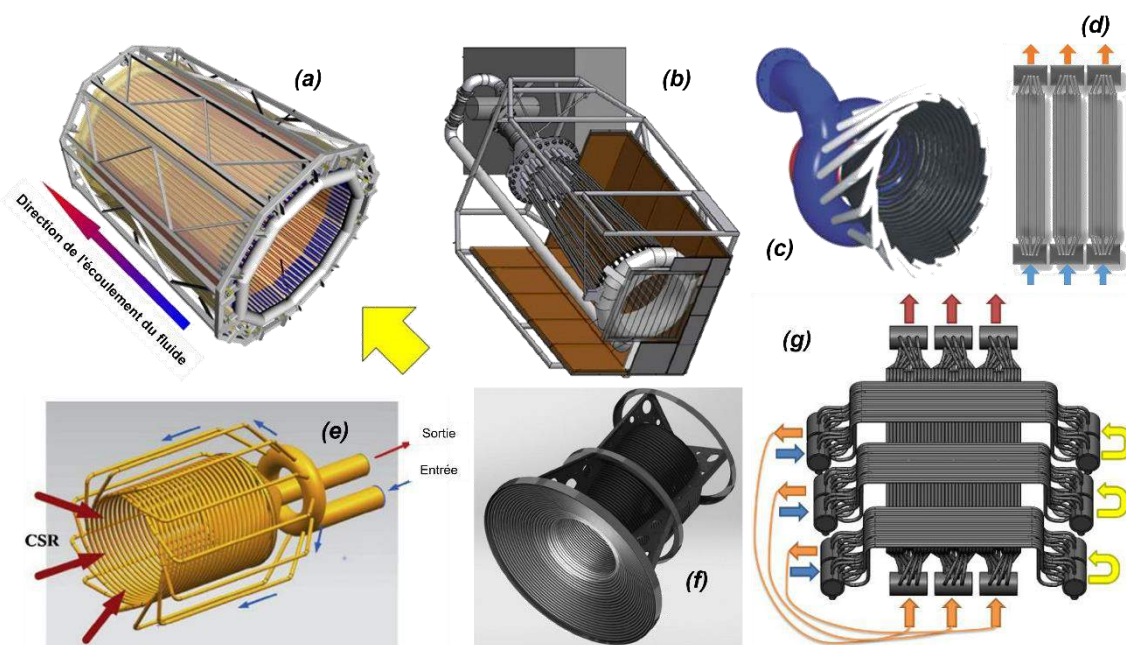


Figure 1-17 : Différents récepteurs surfaciques. (a) Solugas, récepteur tubulaire (Korzynietz et al. 2016). (b) Solhyco, récepteur tubulaire avec une vitre en quartz (Lubkoll et al. 2015). (c) Solgate, récepteur tubulaire (European Commission et Directorate General for Research 2005). (d) Récepteur à écran plat (Ortega, Christian, et Ho 2017). (e) Récepteur tubulaire dans une cavité cylindrique (Zhu et al. 2015). (f) Récepteur tubulaire SG4, récepteur à vapeur directe (Pye et al. 2017). (g) Récepteur à lamelle (Ho et al. 2016).

Les récepteurs à basse température, en forme de cavité, proposés par Solgate ([figure 1-17-c](#)) sont capables de piéger davantage de flux radiatif. Ce type de récepteur est composé de 16 tubes reliés en parallèle avec une entrée et une sortie. Cette technologie permet d'augmenter la température de l'air de 350 à 550°C. Le prix de la conception de ce type de récepteur est moitié moins important que la conception d'un récepteur volumique poreux.

1.3.2 Récepteur à éclairage direct

Les récepteurs à éclairage direct ([figure 1-18](#)) peuvent être sous-classés en fonction de leurs techniques. Il existe deux principales technologies :

- Les récepteurs volumiques poreux
- Les récepteurs volumiques à particules

Le fluide circulant dans les récepteurs volumiques sont presque instantanément chauffés avec le matériau récepteur. Le profil de température du FT et celui du matériau récepteur sont quasiment confondus ([figures 1-15-a](#) et [1-15-b](#)).

1.3.2.1 Récepteurs volumiques poreux

Le principe de fonctionnement du récepteur poreux est de maximiser l'interaction solide-fluide augmentant ainsi la surface de transfert de chaleur entre le FT et le matériau récepteur. Cela permet à la majeure partie du volume du milieu poreux d'être active à la fois pour absorber le flux radiatif solaire et pour transférer rapidement cette énergie au FT.

Le milieu poreux peut être classé en fonction de sa structure et de son matériau. Les modèles hautement structurés contiennent un motif systématique. Par exemple, les canaux parallèles multiples dans la direction de l'écoulement du FT sont appelés "nids d'abeilles monolithiques" (Capuano et al. 2016), les broches installées perpendiculairement à l'écoulement du FT ont été appelées "porcs-épics" (Karni et al. 1997; Karni, Kribus, Rubin, et al. 1998; Kribus et al. 2001), et les boules sphériques ordonnées sont appelées lits tassés (Yang 2017; Zhu et Xuan 2017).

Les modèles non structurés, en revanche, ne présentent aucun motif régulier. On peut citer comme exemples les mousses constituées d'un grand nombre de cellules ouvertes de tailles et de formes aléatoires (X. Chen et al. 2015), les empilements aléatoires de particules de forme arbitraire et tailles différentes (Dolamore, Fee, et Dimartino 2018), et les vides créés par des couches de mailles de fils tricotés (Avila-Marín, Alvarez-Lara, et Fernandez-Reche 2014). En plus de la structure, il existe plusieurs choix pour le matériau poreux, bien qu'ils doivent répondre à des contraintes de haute température et de haute performance.

Deux paramètres clés influencent de manière significative les performances des récepteurs poreux : les propriétés du matériau et les propriétés texturales. Concernant le matériau, les propriétés qui jouent un rôle significatif sur la température de sortie et les performances du récepteur sont l'absorptivité, l'émissivité et la conductivité thermique. La conductivité thermique contribue à fournir une distribution de température uniforme et un flux de chaleur plus élevé dans l'ensemble de l'absorbeur (Gomez-Garcia et al. 2016; Roldán et al. 2015).

Les propriétés texturales correspondent à la porosité (rapport entre le volume de vide et le volume total) et à la distribution linéique de pores (PPI : pores per inch). Ces deux paramètres peuvent être modulés afin d'améliorer l'absorption, la pénétration du rayonnement, la distribution de la température du solide pour l'interaction thermique fluide-solide et la surface globale de transfert de chaleur (X. Chen et al. 2015; Cheng, He, et Cui 2013; Fend et al. 2004; Hoffschmidt et al. 2003). De ce fait, ces deux paramètres peuvent permettre d'augmenter à la fois le rendement de conversion solaire/thermique et la température de sortie du FT.

1.3.2.2 Récepteurs volumiques à particules

Cette technique consiste à mettre en suspension des additifs sous forme de particules solides dans le circuit du FT. Ces particules en suspension créent un FT composite avec une absorptivité, une capacité thermique et une conductivité thermique effective élevées si la suspension des particules est maintenue et si ces derniers ont de bonnes propriétés thermiques et radiatives (Godson et al. 2010). Ce type de récepteur peut aussi être classé comme un récepteur de particules à fluidisation directe (Ho 2016). Le FT utilisé dans ce type de récepteur est généralement de l'air ou du CO₂. Les récepteurs volumiques à particules peuvent être installés suivant les deux configurations exposées précédemment (externe ou cavité). Dans cette technologie, le flux radiatif est transmis à travers une fenêtre ou un tube transparent sous pression qui contient des additifs de particules en suspension dans un FT gazeux. Les particules de taille micrométrique et nanométrique absorbent la chaleur et la transfèrent rapidement au FT (Kitzmler et Miller 2011). Cette technique est aussi appelée absorption directe (Abdelrahman, Fumeaux, et Suter 1979). Les modèles théoriques de ce type de récepteur indiquent une température de sortie du FT de 1160°C (Crocker et Miller 2012).

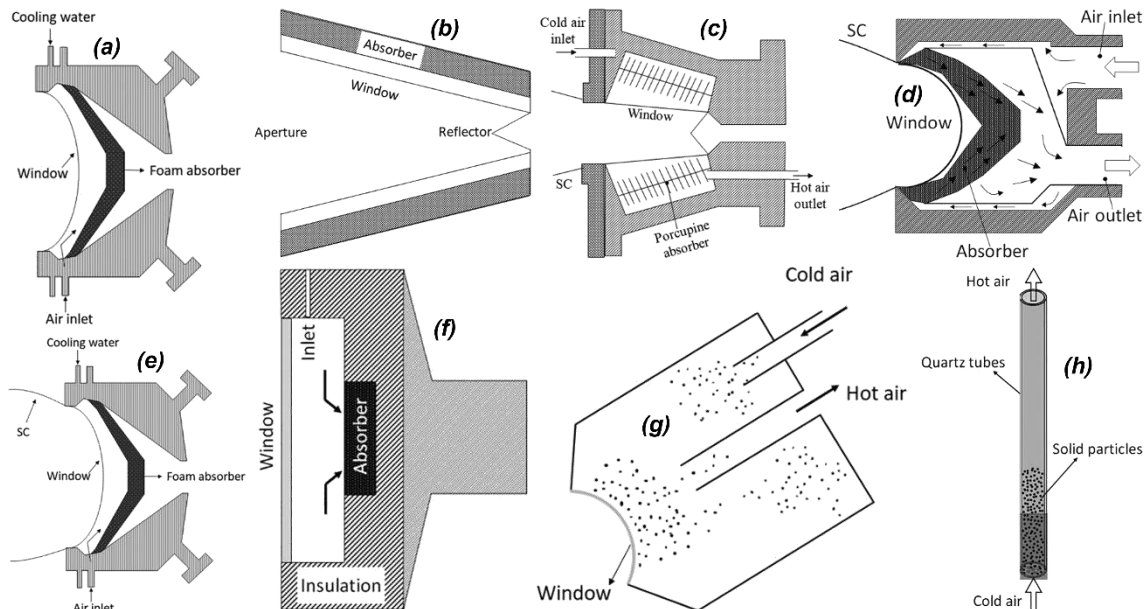


Figure 1-18 : Différents récepteurs volumiques. (a) Récepteur PLVC5 (Pritzkow 1991). (b) Récepteur DIAPR avec une fenêtre d'ouverture (Karni, Kribus, Ostraich, et al. 1998). (c) Récepteur DIAPR avec une fenêtre d'ouverture et un absorbeur en porc-épic (Kribus et al. 2001). (d) Récepteur REFOS (Schwarzbözl et al. 2006). (e) Récepteur PLVCR-500 avec un second concentrateur (SC) (Pritzkow 1991). (f) Récepteur cylindrique avec un absorbeur de SiC (Wang et al. 2017). (g) Récepteur à cavité avec des particules suspendues (Fernández et Miller 2015). (h) Récepteur tubulaire en quartz avec des particules suspendues (Bai et al. 2014).

1.3.3 Matériaux absorbeurs

Les matériaux absorbeurs installés dans les récepteurs solaires doivent présenter une bonne tenue mécanique aux hautes pressions (≈ 30 bar), une bonne résistance à la corrosion aux températures élevées (Karni et al. 1997). Afin de minimiser les coûts d'investissement et dans un souci écologique, les matériaux doivent être à la fois durables et peu onéreux. L'optimisation du rendement de conversion solaire/thermique est possible en utilisant des matériaux qui présentent à la fois une absorptivité élevée dans le visible et une faible émissivité dans l'infrarouge. Les matériaux absorbeurs utilisés dans les CSTC présentes dans le marché sont des absorbeurs en acier inoxydable (Joly et al. 2014) ou en aluminium (Bayón, San Vicente, et Morales 2010; Kaluža et al. 2001) recouverts d'une couche spectralement sélective. Ces matériaux sont limités par leurs températures de fonctionnement qui ne doivent pas excéder 650°C à cause de la détérioration de la couche spectralement sélective (Bayón et al. 2010).

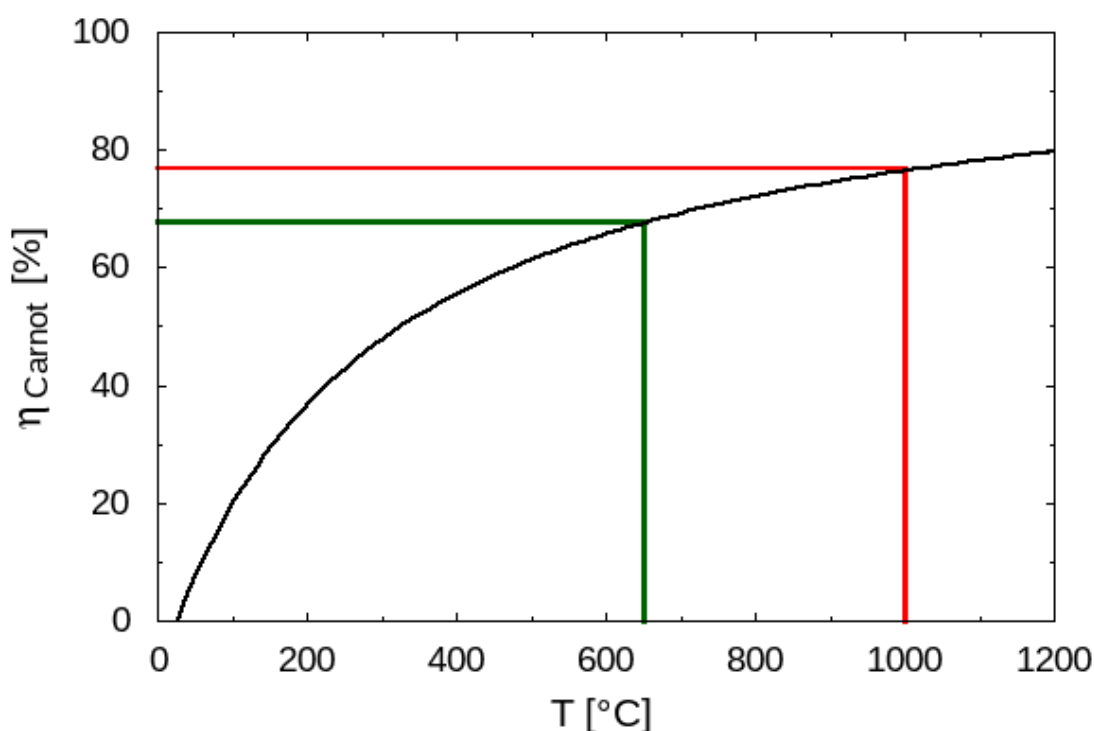


Figure 1-19 : Evolution du rendement de Carnot en fonction de la température de travail. La limite de température des récepteurs métalliques (vert), température optimum de travail des céramiques (rouge).

Pour maximiser le rendement de conversion chaleur/électricité, le matériau doit pouvoir fonctionner à haute température afin de pouvoir initier des cycles thermodynamiques combinés. La courbe théorique de Carnot ([figure 1-19](#)) montre qu'il est possible de gagner 10 points de rendement en augmentant la température de travail à 1000°C . Les matériaux alternatifs pouvant être utilisés pour pallier à cette limite en température sont les matériaux en céramique (Aréna et al. 2019, 2020; H.-L. Chen et al. 2015; Meng et al. 2016; Poživil et al. 2014b) ou les céramiques à haute température (UHTC : Ultra High Temperature Ceramic) (Sciti et al. 2013). Les céramiques à haute température correspondent à une classe de céramiques réfractaires qui offrent une excellente stabilité à des températures supérieures à

2000°C (Wuchina et al. 2007). En comparaison, la température limite de stabilité du SiC à la corrosion a été évalué à 1300°C (Munro et Dapkunas 1993). Les UHTC sont des borures, carbures, nitrures et oxydes de métaux de transition anciens. On peut citer en exemple : le carbure de titane (TiC), le diborure d'hafnium (HfB₂), nitrure de zirconium (ZrN), ...

L'état de l'art des matériaux absorbeurs indiquent, d'après le tableau 1-3, que les matériaux à base de SiC et de TiC-SiC sont ceux qui présentent les meilleures propriétés radiatives pour un fonctionnement à haute température (> 1000°C). Néanmoins, nous notons que la sélectivité spectrale du SiC seul est très faible par rapport aux autres matériaux, en effet on note que le SiC présente une émissivité élevée dans le domaine de l'infrarouge. L'un des objectifs de cette thèse sera d'évaluer si le dopage chimique permet de moduler la sélectivité du SiC tout en maximisant son absorptivité. L'autre objectif sera d'évaluer le ratio de TiC/SiC permettant d'obtenir la meilleure sélectivité spectrale avec une absorptivité maximum.

Tableau 1-3 : Matériaux absorbeurs et leurs propriétés radiatives. [1] (Joly et al. 2014), [2] (Bayón et al. 2010), [3] (Kaluža et al. 2001), [4] (Sciti et al. 2013), [5] (Aréna et al. 2020).

Matériaux	Température [°C]	Propriétés radiatives		
		$\bar{\alpha}$	$\bar{e}$	$\bar{\alpha}/\bar{e}$
Acier inox / CuCoMnSiO [1]	150≤T≤400	0.95	0.04	23.75
Aluminium / CuMnO [2]	150≤T≤520	0.94	0.043	21.86
Aluminium / CuCoMnO [3]	150≤T≤520	0.90	0.05	18.00
Carbure de Silicium [4-5]	600≤T≤1200	0.80	0.80	1.00
UHTC : Carbure de Hafnium [4]	600≤T≤1200	0.70	0.60	1.17
UHTC : Borure de Hafnium [4]	600≤T≤1200	0.50	0.70	0.83
UHTC : Carbure de Zirconium [4]	600≤T≤1200	0.58	0.70	0.83
UHTC : Borure de Zirconium [4]	600≤T≤1200	0.50	0.40	1.17
Carbure de Silicium & Carbure de Titane (TiC-SiC) [5]	600≤T≤1200	0.76	0.44	1.73

1.4 Carbure de silicium

Le carbure de silicium (SiC) est un ancien mais émergent semi-conducteur, qui est prometteur pour les dispositifs de puissance avancés car il possède des propriétés physiques supérieures. Le SiC lui-même est rare dans la nature, et la synthèse d'un matériau composite contenant des liaisons silicium-carbone a été rapportée pour la première fois par Berzelius en 1824. Ferdinand Henri Moissan (prix Nobel de chimie en 1906) a découvert le SiC à l'état naturel par la première fois en 1905 en Arizona dans les fragments d'une météorite.

Depuis 1980, des efforts soutenus ont été consacrés au développement de matériau et de dispositif en SiC. Ce matériau propose des propriétés physiques et chimiques unique, dont nous discuterons plus tard dans cette section. Les dispositifs en SiC sont également prometteurs pour un fonctionnement à haute température, ils présentent aussi une bonne résistance à l'irradiation.

La forte liaison chimique entre les atomes de silicium (Si) et de carbone (C) confère à ce matériau une très grande dureté, une inertie chimique et une conductivité thermique élevée (Harris et Institution of Electrical Engineers 1995). En tant que semi-conducteur, le SiC présente une large bande interdite, une intensité de champ électrique critique importante et une vitesse de dérive à saturation élevée. Le dopage de type « p » et « n » sur une large gamme est relativement facile, ce qui rend le SiC exceptionnel parmi les semi-conducteurs à large bande interdite. La capacité du SiC à former du dioxyde de silicium (SiO₂) comme oxyde natif est un avantage important pour la fabrication de dispositifs. Grâce à ses propriétés, le SiC est un semi-conducteur prometteur pour l'électronique de haute puissance et de haute température (Davis et al. 1991; Ivanov et Chelnokov 1992; Morkoç et al. 1994). Toutefois, la stabilité physique et chimique du SiC a rendu la croissance cristalline du SiC extrêmement difficile et a fortement entravé le développement des dispositifs à semi-conducteurs en SiC et leurs applications électroniques. L'existence de diverses structures de SiC avec différentes séquences d'empilement (autrement connu sous le nom de polytype) a également entravé la croissance des cristaux de SiC de qualité électronique.

1.4.1 Polytype et structure cristallographique

Le SiC est un semi-conducteur composé, ce qui signifie que seule une stœchiométrie rigide (50% de silicium et 50% de carbone) est autorisée. Les structures électroniques des atomes neutres de Si et de C dans leurs états fondamentaux sont :

$$\text{Si}, 14e^- : 1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^2 \quad 1.10$$

$$\text{C}, 6e^- : 1s^2 2s^2 2p^2 \quad 1.11$$

Les atomes de Si et de C sont tous deux des éléments tétravalents et possèdent quatre électrons de valence dans leurs coquilles les plus externes. Les atomes de Si et de C sont liés de manière tétraédrique par des liaisons covalentes en partageant des paires d'électrons dans les orbitales hybrides sp³ pour former un cristal de SiC. Chaque atome de Si a exactement quatre atomes de C voisins, et vice versa. L'énergie

de la liaison Si-C est très élevée (4,6 eV), ce qui confère au SiC une variété de propriétés exceptionnelles.

D'un point de vue cristallographique, le SiC est l'exemple le plus connu de « polytypisme ». Le polytypisme est le phénomène par lequel un matériau peut adopter différentes structures cristallines qui varient sans une dimension (c'est-à-dire dans la séquence d'empilement) sans changement de la composition chimique. La variation des sites occupés le long de l'axe c dans un système hexagonal dense donne lieu à différentes structures cristallines, appelées polytypes. Considérons les sites occupés dans le système hexagonal compact, représenté schématiquement sur la [figure 1-20](#). Il existe trois sites possibles, désignés par A, B et C. Deux couches ne peuvent pas occuper successivement le même site ; la couche suivante au-dessus d'une couche "A" doit occuper soit le site "B", soit le site "C" (de même, "A" ou "C" est autorisé au-dessus de "B").

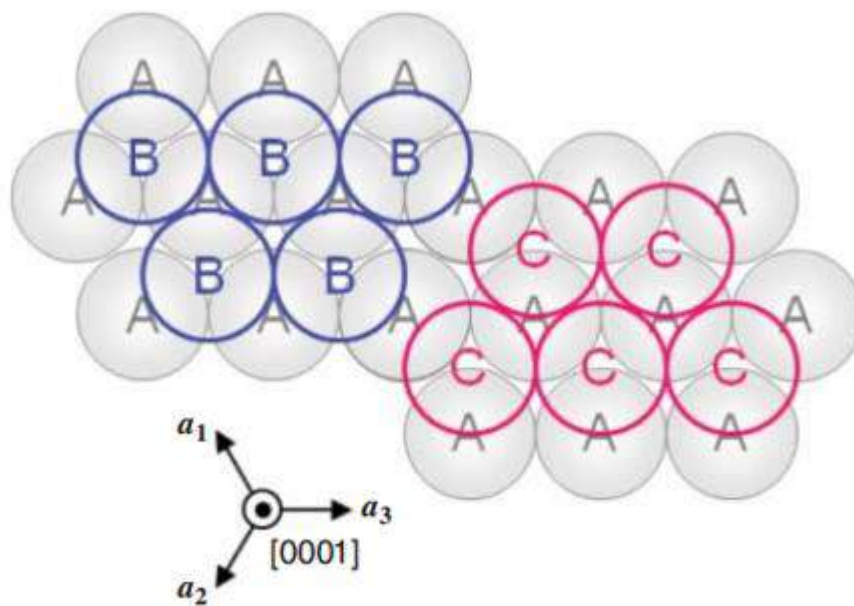


Figure 1-20 : Sites d'occupation (A, B et C) dans un système hexagonal compact

Bien qu'il existe, en principe, des variations presque infinies de la séquence d'empilement lors de l'empilement d'un certain nombre de couches, pour la plupart des matériaux, une seule structure d'empilement (souvent la structure de blende de zinc ou de wurtzite) est généralement stable. Cependant, le SiC se cristallise en un nombre surprenant de polytypes, on recense plus de 200 polytypes de SiC (Harris et Institution of Electrical Engineers 1995). Ces formes cristallines donnent lieu des appellations différentes : SiC 6H, 4H, 2H, 3C, 15R etc. La lettre H indique un empilement de type hexagonal, la lettre C un empilement de type cubique et la lettre R à un empilement de type rhomboédrique. La [figure 1-21](#) illustre les empilements des quatre principaux polytypes du SiC que sont le SiC 3C, 2H, 4H et 6H. Ici, A, B et C sont les sites potentiellement occupés dans une structure hexagonale compacte, comme décrit ci-dessus. Ces noms de sites permettent de décrire le SiC 3C par la séquence répétitive ABCABC, ou simplement ABC. De la même manière, les SiC 2H, 4H et 6H peuvent être décrits respectivement par ABAB, ABCB et ABCACB.

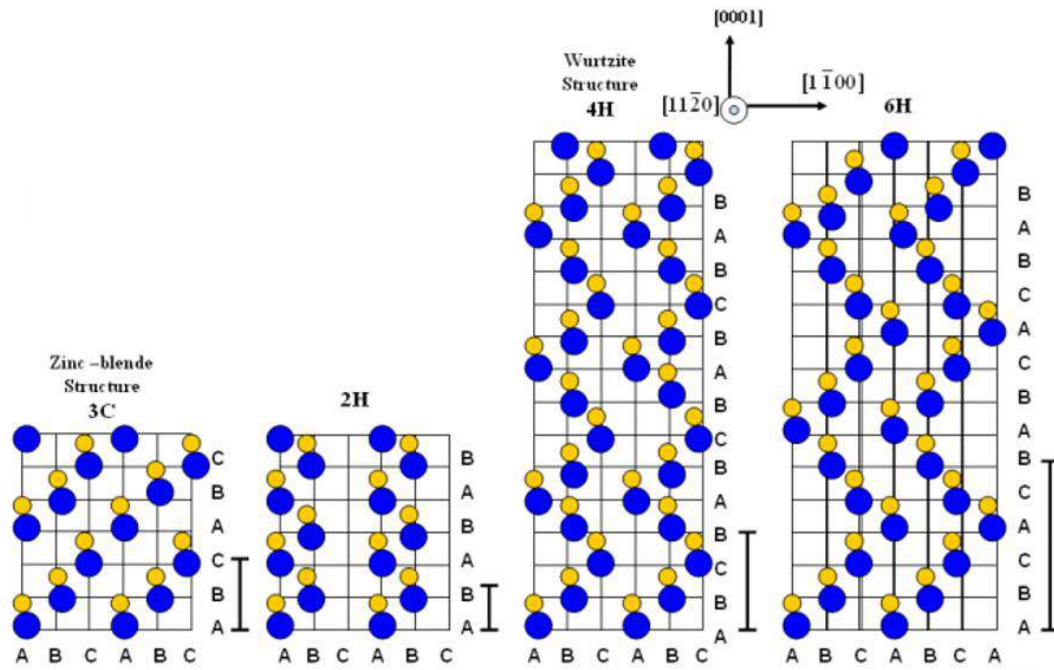


Figure 1-21 : Schéma illustrant les structures des principaux polytypes du SiC. Les cercles jaunes correspondent à l'atome de carbone et les cercles bleus à celui de silicium.

La [figure 1-22](#) montre les cellules primitives et les vecteurs de translation fondamentaux du SiC cubique (3C) et hexagonal. La structure 3C est équivalente à la structure de type zinc-blende, dans laquelle cristallisent la plupart des semi-conducteurs III-V comme le GaAs et l'InP. La structure wurtzite, que l'on trouve également dans le GaN et le ZnS, peut être désignée par « 2H ». Cependant, on ne comprend pas encore très bien pourquoi il existe autant de polytypes de SiC.

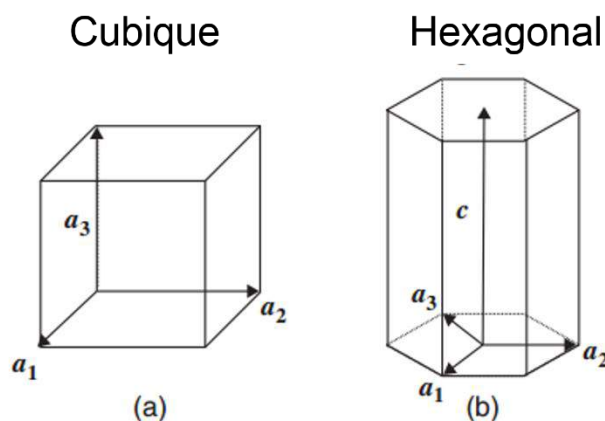


Figure 1-22 : Mailles primitives et vecteurs de translations fondamentaux du SiC cubique (a) et hexagonal (b).

En général, les cristaux à forte liaison covalente cristallisent dans la structure de type zinc-blende, tandis que la structure wurtzite est plus stable pour les cristaux à forte ionicité. L'ionicté intermédiaire du SiC (11% selon la définition de Pauling) peut être une raison possible de l'apparition du polytypisme du SiC (Heine, Cheng, et Needs 1991; Yoo et Matsunami 1992).

Le tableau 1-4 recense les paramètres de mailles des principaux polytypes de SiC à température ambiante (Levinshhteĭn, Rumyantsev, et Shur 2001). Bien que les paramètres de mailles semblent très différents pour les différents polytypes de SiC (en raison de leurs différentes structures cristallines), tous les polytypes de SiC possèdent presque la même longueur de liaison Si-C ($1.89\text{\AA}$). Ainsi, la hauteur de la bicouche Si-C le long de l'axe c (hauteur unitaire) est de $2.52\text{\AA}$, bien que le SiC 3C et le SiC 2H aient une hauteur légèrement inférieure ($2.50\text{\AA}$). Les constantes de réseau varient avec la température et la densité de dopage, comme on l'observe également pour d'autres matériaux semi-conducteurs.

Tableau 1-4 : Paramètre de maille des principaux polytypes de SiC à température ambiante (Levinshhteĭn et al. 2001).

Polytype	a [$\text{\AA}$]	c [$\text{\AA}$]
3C	3.3596	-
4H	3.0798	10.0820
6H	3.0805	15.1151

La [figure 1-23](#) montre la première zone de Brillouin du SiC 3C et des polytypes hexagonaux de SiC. Notez que la hauteur de la zone de Brillouin illustrée à la [figure 1-23-b](#) est différente pour les différents polytypes hexagonaux en raison de leurs différentes valeurs du paramètre de maille (c).

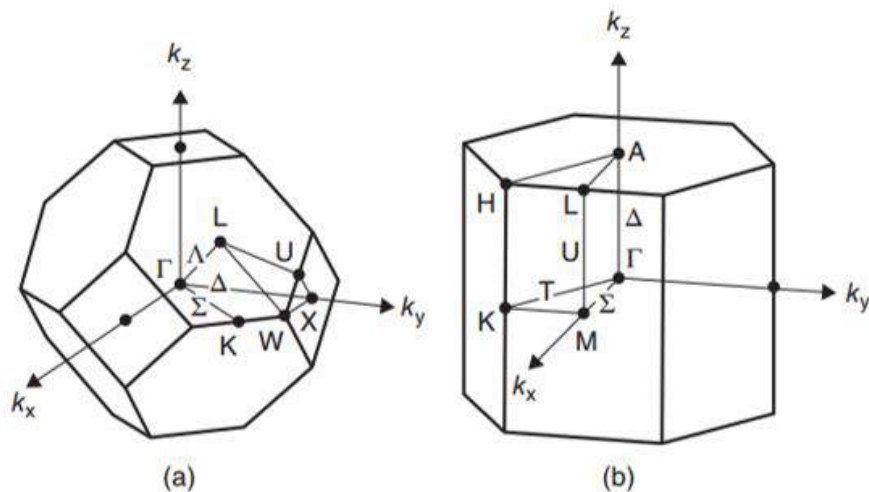


Figure 1-23 : Points de haute symétrie et première zone de Brillouin du SiC cubique (a) et des polytypes hexagonaux de SiC (b).

1.4.2 Propriétés physiques du SiC

Tous les polytypes de SiC présentent une structure de bande indirecte, comme c'est également le cas pour le Si. Le sommet de la bande de valence est situé au point Γ de la zone de Brillouin, tandis que les minima de la bande de conduction apparaissent à la limite de la zone de Brillouin. Les gaps d'énergies de la zone interdite (E_g) de divers polytypes de SiC à 2 K sont représentées en fonction de l'hexagonalité dans la [figure 1-24](#).

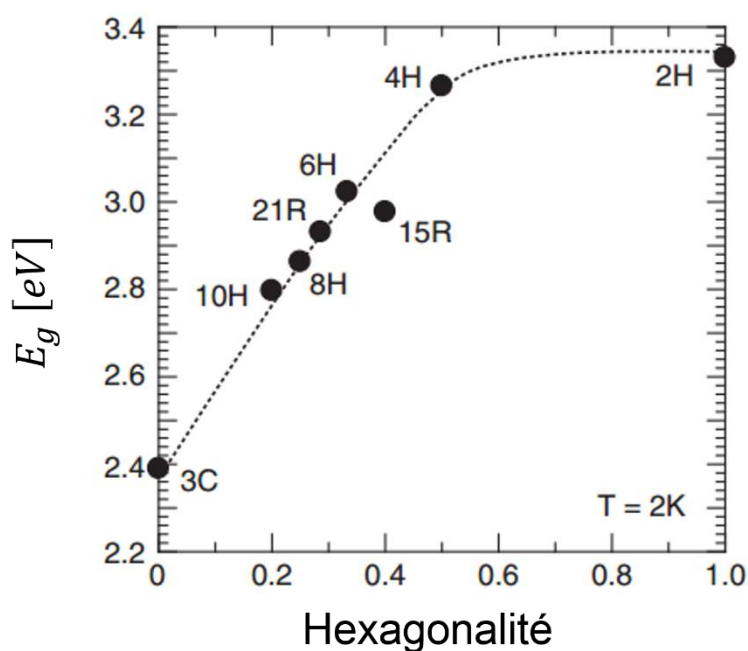


Figure 1-24 : Les gaps d'énergies de la zone interdite de divers polytypes de SiC à 2 K (Kimoto et Cooper 2014).

Le SiC présente une grande résistance mécanique qui est uniquement dépassée que par le nitrure de bore et le diamant. Cette propriété fait de lui un matériau très prisé dans l'industrie pour le durcissement des outils de découpe. Il peut aussi être utilisé pour renforcer les matrices de matériaux composites à hautes performances mécaniques au même titre que les fibres de carbone.

Le SiC est inerte aux solutions aqueuses acides et basiques à température ambiante. Le SiC est aussi très stable thermiquement puisque sa température de sublimation avoisine les 2500°C à la pression atmosphérique. A température ambiante, le SiC possède une conductivité thermique surpassant bon nombre de métaux. Le tableau recense quelques propriétés physiques des principaux polytypes de SiC et du silicium à température ambiante.

Tableau 1-5 : Propriétés physiques des principaux polytypes de SiC et du silicium à température ambiante (Adachi 2009; Feng 2004; Harris et Institution of Electrical Engineers 1995)

Propriétés	3C-SiC	4H-SiC	6H-SiC	Si
E_g [eV]	2.4	3.26	3.03	1.12

$k [W.cm^{-1}.K^{-1}]$	3.2	3.7	3.9	1.4-1.5
$C_p [J.g^{-1}.K^{-1}]$	0.67	0.69	0.69	0.70
$\rho [g.cm^{-33}]$	3.21	3.21	3.21	2.33
Module de Young [GPa]	310 – 550	390 – 690	390 – 690	160
Coefficient de Poisson	0.24	0.21	0.21	0.22

1.4.3 Dopage du SiC

L'azote ou le phosphore sont employés pour le dopage de type « n » et l'aluminium pour le dopage de type « p ». Bien que le bore ait déjà été utilisé comme accepteur, il n'est actuellement pas préféré en raison de sa grande énergie d'ionisation ($\sim 350 meV$) (Troffer et al. 1997), de la génération d'un niveau profond lié au bore (Kuznetsov et Zubrilov 1995; Troffer et al. 1997) et de sa diffusion anormale. L'azote se substitue au site du sous-réseau C, tandis que le phosphore, l'aluminium et le bore se substituent au site du sous-réseau Si. Le tableau 1-6 montre les rayons covalents non polaires de Si, C et des principaux dopants pour SiC.

Tableau 1-6 : Rayons covalents non polaires du SiC des atomes dopants.

Atome	Si	C	N	P	B	Al
Rayon [Å]	1.17	0.77	0.74	1.10	0.82	1.26

Les énergies d'ionisation et les limites de solubilité de l'azote, du phosphore, de l'aluminium et du bore dans les principaux polytypes de SiC sont résumées dans le tableau ci-dessous :

Tableau 1-7 : Energie d'ionisation et limite de solubilité des atomes dopants dans les principaux polytype de SiC (Kimoto et Cooper 2014)

	Hydrogène	Phosphore	Aluminium	Bore
Energie d'ionisation [meV]				
SiC 3C	55	-	250	350
SiC 4H (hexagonale/cubique)	61/126	60/120	198/201	280
SiC 6H (hexagonale/cubique)	85/140	80/130	240	350
Limite de solubilité [cm^{-3}]	2×10^{20}	$\sim 1 \times 10^{21}$	1×10^{21}	2×10^{19}

1.5 Conclusion

Dans cette partie, nous avons posé le contexte de cette thèse qui s'inscrit dans le domaine des énergies renouvelables. Après avoir présenté dans un premier temps les problèmes relatifs à la consommation et à la production mondiale d'électricité, nous sommes dirigés vers les solutions proposées pour pallier ces problèmes. Les différentes solutions permettant d'assurer une production d'énergie verte ont été décrites et par la comparaison des différentes technologies existantes, nous avons montré que la ressource solaire est de loin celle qui possède le potentiel le plus intéressant. L'analyse des technologies de conversion d'énergie solaire en électricité a montré que le système le plus commercialisé (solaire PV) n'est pas celui qui permet d'assurer une production massive d'électricité à cause de son faible rendement. Par ailleurs, le solaire PV ne permet d'assurer une production d'électricité continue à cause des limites posées par le stockage.

A l'inverse, la technologie des CSTC pourrait permettre à la fois la production massive d'électricité tout en assurant une production continue en période non ensoleillée grâce à l'incorporation d'un système de stockage thermique. La comparaison des différentes installations de CSTC a montré que les CSTC à tour sont celles présentant le plus grand potentiel d'amélioration au travers des éléments composant celles-ci. L'élément pouvant permettre une nette amélioration du rendement global d'une CSTC à tour est celui associé au récepteur solaire. L'optimisation de ce dernier permettrait à la fois d'augmenter le rendement de conversion solaire/thermique mais aussi d'augmenter la température de sortie du FT afin d'initier des cycles thermodynamiques combinés.

Nous avons observé après une étude de l'état de l'art sur les matériaux absorbeurs disponibles pour concevoir des récepteurs solaires, que le carbure de silicium est celui qui permet de présenter une grande absorptivité solaire tout en garantissant des températures nominales de fonctionnement élevées. Néanmoins, ce matériau n'étant pas spectralement sélectif, les pertes par émission dans l'infrarouge sont importantes.

Le but de cette thèse est donc de proposer des solutions alternatives afin d'améliorer la sélectivité spectrale des absorbeurs à base de SiC tout en garantissant une absorptivité importante dans le visible. Pour répondre à cette problématique, nous nous proposons de suivre deux axes de travail :

- Moduler le dopage chimique du SiC afin de voir son influence sur les propriétés radiatives.
- Étudier et moduler le ratio TiC/SiC afin d'observer son influence sur les propriétés radiatives.

Dans la partie suivante nous allons détailler les différents outils numériques utilisés pour mener à bien nos travaux.

Partie 2 : Théorie et modèles numériques

2.1	INTRODUCTION.....	37
2.2	LE RAYONNEMENT THERMIQUE	37
2.2.1	L'émission thermique.....	38
2.2.2	Cas du corps noir.....	39
2.2.3	Cas d'un matériau réel tels que le SiC.....	41
2.3	PROPRIETES RADIATIVES ET MODELE NUMERIQUE	42
2.3.1	La fonction diélectrique complexe.....	42
2.3.1.1	Transitions interbandes et modèle de Lorentz	42
2.3.1.2	Transitions intra-bandes et modèle de Drude	44
2.3.1.3	Vibrations atomiques (phonons).....	45
2.3.1.4	Modèle de Drude-Lorentz	46
2.3.2	Coefficients thermo-radiatifs	46
2.3.2.1	Expression des indices de réfraction et d'extinction	46
2.3.2.2	Expression du coefficient de transmission volumique.....	47
2.3.2.3	Expression des coefficients thermo-radiatifs.....	47
2.3.3	Modèle numérique pour la détermination des propriétés thermo-radiatives.....	50
2.4	LA DYNAMIQUE MOLECULAIRE.....	53
2.4.1	Généralité.....	53
2.4.2	Dynamique moléculaire classique.....	55
2.4.2.1	Initialisation du système	55
2.4.2.2	Calcul des forces d'interactions	56
2.4.2.3	Résolution des équations de Newton	57
2.4.2.4	Les ensembles thermodynamiques.....	57
2.4.2.5	LAMMPS	58
2.4.2.6	Dynaphopy	59
2.4.2.6.a	Modèle anharmonique	59
2.4.2.6.b	Résultats.....	61
2.4.2.7	Correction de la température de simulation de DMC.....	63
2.5	ÉVALUATION DE LA FONCTION DIELECTRIQUE IR PAR LA DMC	65
2.6	MODELE NODAL POUR LE CALCUL DU RENDEMENT DE CONVERSION SOLAIRE/THERMIQUE DE L'ABSORBEUR	68
2.6.1	Schématisation de la centrale solaire thermodynamique à tour.....	68
2.6.2	Mise en place du modèle nodal sur l'absorbeur	69
2.6.3	Paramètres géométrique et corrélations de convection	71
2.6.3.1	Convection naturelle extérieure	72
2.6.3.2	Convection forcée extérieure.....	72
2.6.3.3	Convection forcée à l'intérieur de l'absorbeur surfacique	72
2.6.3.4	Convection forcée intérieure de l'absorbeur volumique.....	73

2.1 Introduction

Dans ce chapitre, nous allons développer les diverses relations théoriques et modèles numériques utilisés durant cette thèse. Dans un premier temps, nous présenterons les différentes grandeurs caractérisant le rayonnement thermique.

Nous aborderons ensuite dans un second temps les grandeurs caractérisant les propriétés optiques d'un matériau semi-conducteur. Cela permettra ensuite d'introduire le modèle numérique qui nous a permis d'évaluer les propriétés thermo-radiatives du SiC. Nous nous attarderons plus particulièrement sur la fonction diélectrique qui est la grandeur dont la partie se situant dans le domaine infrarouge sera évaluée par la dynamique moléculaire (DM). Les différentes étapes nécessaires à son calcul seront développées.

Dans un troisième temps, nous poserons les principes de la technique de la DM et de ses variantes (ab-initio et classique). Ce sera l'occasion d'introduire le code de DM utilisé dans cette thèse et des codes annexes de post-traitement.

Enfin, dans un dernier temps, nous présenterons le modèle nodal utilisé pour simuler le rendement de conversion solaire/thermique d'un absorbeur solaire en SiC au sein d'une centrale solaire thermodynamique à tour.

2.2 Le rayonnement thermique

Les transferts thermiques se déclinent sous trois modes d'échange :

- La conduction,
- La convection,
- Le rayonnement.

Parmi ces trois modes, le rayonnement thermique est le seul qui ne nécessite pas de milieu pour se propager. Ce mode de propagation résulte de différents mécanismes optiques vibratoires opérant à l'échelle atomique (vibration du réseau cristallin ou phonon, multi-phonon, polaron...) dont les amplitudes sont d'autant plus importantes que la matière est à haute température. Il y a toujours rayonnement thermique à partir du moment où la température de la matière est non-nulle. L'émission d'ondes thermiques (appelées radiations thermiques) s'effectue en surface pour les solides et les liquides opaques, et en volume pour les gaz. Il existe une dualité onde-corpuscule en rayonnement thermique. Ainsi, on associe une particule appelée photon à chaque onde électromagnétique dont l'énergie e_λ dépend de la longueur d'onde λ de l'onde :

$$e_\lambda = h \frac{c_0}{\lambda} \quad 2.1$$

Où h est la constante de Planck, c_0 est la vitesse de la lumière dans le vide. Le rayonnement thermique couvre les longueurs d'onde s'étalant entre 0.1 μm et 100 μm . Le domaine du visible couvre la gamme allant de 0.4 à 0.75 μm et le domaine de l'infrarouge celle de 0.75 à 100 μm ([figure 2-1](#)).

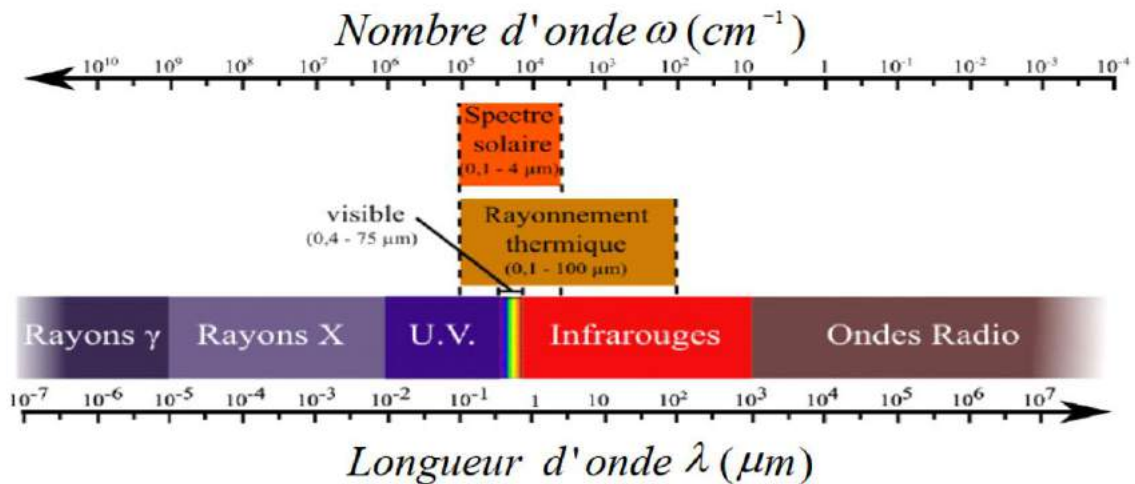


Figure 2-1 : Répartition spectrale du spectre électromagnétique (Guévelou 2015)

2.2.1 L'émission thermique

Les grandeurs caractérisant le rayonnement thermique peuvent être monochromatiques si elles concernent un intervalle autour d'une longueur d'onde ou encore totales si elles sont liées à l'ensemble du spectre électromagnétique. Les grandeurs peuvent être directionnelles si elles correspondent à une direction de l'espace repéré par un angle θ par rapport au vecteur unitaire normal à la surface d'émission ou hémisphériques si elles correspondent à l'ensemble des directions du demi-espace offert à l'émission. Nous présenterons ci-dessous une liste non exhaustive de ces grandeurs dans le cas d'un matériau dont la surface élémentaire dS est présentée sur la [figure 2-2](#).

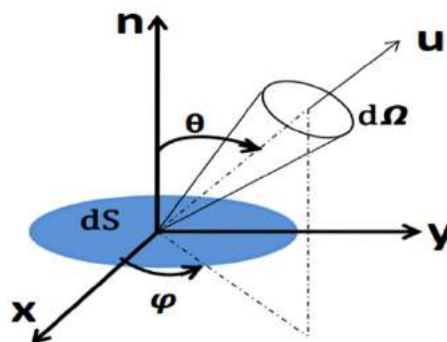


Figure 2-2 : Description géométrique de l'émission d'une surface élémentaire dS .

Le flux spectral directionnel $d\Phi(\lambda)$ correspond à la puissance radiative rayonnée dans la direction de propagation $\vec{u}$ par une surface élémentaire dS à la température T , pour un intervalle de longueur d'ondes comprise entre λ et $\lambda + d\lambda$. Le flux radiatif total Φ_T correspond à la puissance radiative de rayonnement d'une surface élémentaire dS dans tout l'espace et sur toutes les longueurs d'onde.

La luminance spectrale directionnelle $L(\lambda, T, \theta)$, exprimée en $W.m^{-3}.Sr^{-1}$, correspond à la répartition spectrale et spatiale d'un rayonnement émis. Elle se définit comme étant le flux radiatif rayonné par une surface élémentaire dS de température T , dans l'angle solide $d\Omega$ centré sur la direction $\vec{u}$ de propagation du rayonnement :

$$L(\lambda, T, \theta) = \frac{d^2\Phi(\lambda, T, \theta)}{\cos\theta \cdot dS \cdot d\Omega \cdot d\lambda} \quad 2.2$$

L'émittance spectrale hémisphérique $M(\lambda, T)$, exprimée en $W.m^{-3}$, correspond au flux spectral hémisphérique émis par la surface élémentaire dS . Cette émittance est obtenue en intégrant la luminance $L(\lambda, T, \theta)$ sur tous les angles solides portés par des directions de l'espace avant à la surface de réception, c'est-à-dire pour $\vec{u} \cdot \vec{n} > 0$:

$$M(\lambda, T) = \iint L(\lambda, T, \theta) \cdot \cos\theta \cdot d\Omega \quad 2.3$$

Les corps dit lambertiens présentent une luminance spectrale isotrope ne dépendant pas de la direction de propagation du rayonnement $L(\lambda, T, \theta) = L(\lambda, T)$. Ainsi, l'intégration de l'équation précédente conduit à établir un lien entre l'émittance spectrale et la luminance spectrale selon la loi :

$$M(\lambda, T) = \pi \cdot L(\lambda, T) \quad 2.4$$

L'éclairement $E(\lambda, T)$ est une grandeur analogue mais associée à la réception du rayonnement. L'éclairement désigne le flux hémisphérique reçu par la surface élémentaire dS . Il est obtenu par intégration de la luminance $L(\lambda, T, \theta)$ sur tous les angles solides portés par les directions de l'espace dans le cas où $\vec{u} \cdot \vec{n} < 0$:

$$E(\lambda, T) = \iint L(\lambda, T, \theta) \cdot \cos\theta \cdot d\Omega \quad 2.5$$

2.2.2 Cas du corps noir

Un corps noir est un corps idéal qui absorbe tout le rayonnement incident. C'est donc un corps opaque non réfléchissant. Puisqu'il ne réfléchit aucune radiation associée à une couleur d'une lumière blanche incidente, il apparaîtra comme « noir » aux yeux d'une personne extérieure à ce corps. C'est également un corps Lambertien puisque la luminance est indépendante de la direction de propagation. La luminance spectrale d'un corps noir est décrite par une loi appelée loi de Planck. Pour un corps noir à la température T , l'expression de la luminance $L^0(\lambda, T)$ s'écrit dans le cas du vide sous la forme :

$$L^0(\lambda, T) = \frac{2hc_0^2\lambda^{-5}}{\exp\left(\frac{hc_0}{\lambda k_B \cdot T}\right) - 1} \quad 2.6$$

Où h est la constante de Planck ($h = 6.63 \cdot 10^{-34} J.s$), c_0 est la vitesse de la lumière dans le vide ($c_0 = 3,0 \cdot 10^8 m.s^{-1}$) et k_B désigne la constante de Boltzmann ($k_B =$

$1.38 \cdot 10^{-23} J \cdot K^{-1}$). L'exposant 0 sur la luminance sera utilisée pour désigner la luminance d'un corps noir.

La luminance totale du corps noir est obtenue par intégration de la luminance spectrale sur tout le spectre électromagnétique. Cela aboutit à l'établissement d'une nouvelle loi importante appelée loi de Stefan-Boltzmann permettant de calculer l'émittance totale M^0 (densité de flux) du corps noir à une température T selon la relation :

$$M_{T-h}^0 = \sigma T^4 \quad 2.7$$

Où $\sigma = 5.67 \cdot 10^{-8} W \cdot m^{-2} \cdot K^{-4}$ est la constante de Stefan-Boltzmann, l'indice $T - h$ indique que c'est une grandeur totale et hémisphérique. La loi de Stefan-Boltzmann montre que l'émission thermique d'un matériau est uniquement liée à sa température de surface et qu'elle évolue en T^4 .

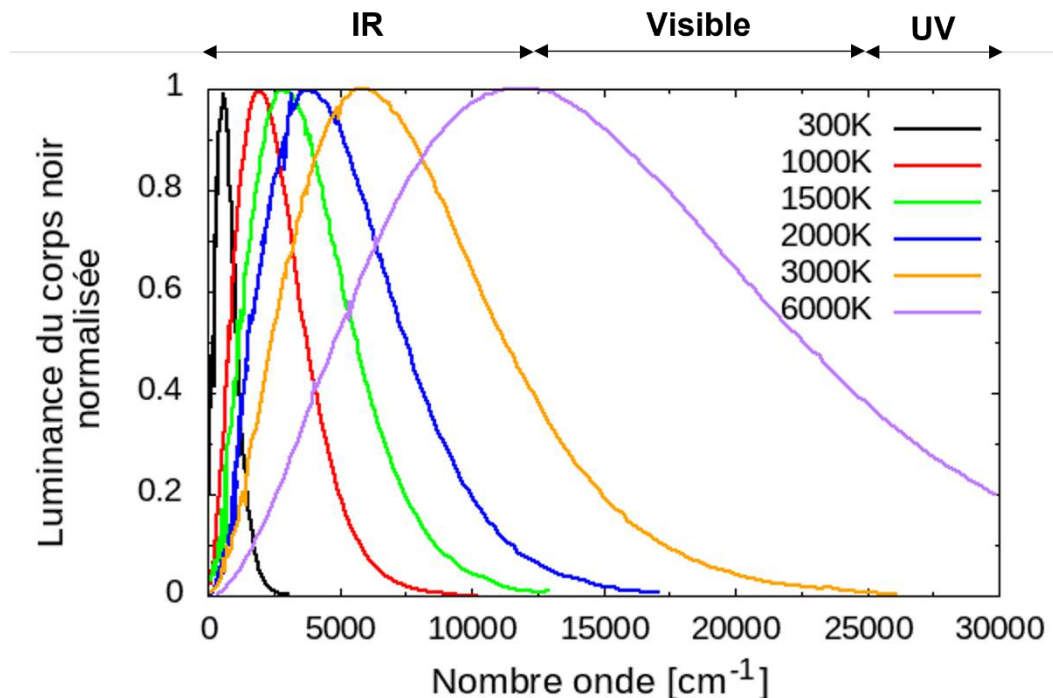


Figure 2-2-3 : Luminance normalisée d'un corps noir (Brun 2003).

Sur la [figure 2-3](#), on observe que le maximum de la luminance se déplace vers les faibles longueurs d'onde quand la température augmente. En dérivant la loi de Planck par rapport à la longueur d'onde, il est possible d'établir une nouvelle loi appelée loi de Wien permettant de relier la température T du corps noir dans le vide et la longueur d'onde λ_m correspondant au maximum de sa luminance :

$$\lambda_m \cdot T = 2898 \mu m \cdot K \quad 2.8$$

2.2.3 Cas d'un matériau réel tels que le SiC

Il n'existe pas de matériau qui présente toutes les caractéristiques du corps noir. On peut toutefois trouver des conditions de mise en forme, qui permettent à un matériau, intrinsèquement absorbant, de tendre vers les propriétés d'un corps noir. Un four noir ayant une géométrie de cavité par exemple, parvient à absorber presque entièrement le rayonnement incident passant à travers une petite ouverture. Cela découle du fait que l'énergie radiative est fortement atténuée lors des multiples réflexions des rayons sur la paroi interne absorbante de la cavité. Puisque la probabilité que les rayons ressortent à travers l'ouverture est très faible, le rayonnement piégé est presque entièrement absorbé.

Comparés aux corps noirs, les matériaux réels sont moins émissifs pour une même température. Les corps noirs sont de ce fait utilisés comme une référence pour quantifier la proportion de l'émission d'un corps réel. La grandeur radiative ainsi définie s'appelle l'émissivité quand les mécanismes microscopiques mis en jeu dans la matière sont en surface. Le rapport de la luminance spectrale directionnelle $L(\lambda, T, \theta)$ du corps réel sur la luminance spectrale $L^0(\lambda, T)$ d'un corps noir à la même température permet de déterminer l'émissivité spectrale directionnelle $\varepsilon(\lambda, T, \theta)$ du corps réel. Cette dernière est estimée par :

$$\varepsilon(\lambda, T, \theta) = \frac{L(\lambda, T, \theta)}{L^0(\lambda, T)} \quad 2.9$$

L'émissivité totale hémisphérique est obtenue en intégrant cette expression sur tout le spectre électromagnétique et dans toutes les directions :

$$\varepsilon_{\text{hémis}} = \frac{\int_0^\infty \iint L(\lambda, T, \theta) \cdot \cos\theta \cdot d\Omega \cdot d\lambda}{\int_0^\infty \iint L^0(\lambda, T) \cos\theta \cdot d\Omega \cdot d\lambda} \quad 2.10$$

Connaissant la valeur de l'émissivité hémisphérique totale et de l'expression de la loi de Stefan-Boltzmann, nous exprimons l'émittance totale hémisphérique du corps réel sous la forme :

$$M_{T-h} = \varepsilon_{\text{hémis}} \sigma T^4 \quad 2.11$$

2.3 Propriétés radiatives et modèle numérique

Dans cette section, nous allons tout d'abord faire un rappel d'une partie de la physique du solide, afin d'introduire les paramètres essentiels permettant d'évaluer les propriétés thermo-radiatives d'un matériau. Par la suite, nous exposerons les modèles numériques utilisés à chaque étape pour in fine déterminer les propriétés thermo-radiatives du récepteur solaire.

2.3.1 La fonction diélectrique complexe

On définit la polarisation $\vec{P}$ comme l'orientation des charges dans un milieu. Tout milieu soumis à un champs électrique $\vec{E}$ donne lieu à une organisation des charges électriques et se traduit par une réponse de la part de ce milieu sous la forme d'un champ électrique de déplacement $\vec{D}$. Dans l'approche macroscopique de l'électromagnétisme dans la matière ce lien est donné par :

$$\vec{D}(\omega) = \tilde{\epsilon}\epsilon_0\vec{E}(\omega) = \epsilon_0\vec{E}(\omega) + \vec{P}(\omega) \quad 2.12$$

Où ω est la fréquence d'oscillation de l'onde électromagnétique, $\epsilon_0 = 8.85.10^{-12}F.m^{-1}$ la permittivité diélectrique du vide et $\tilde{\epsilon}$ la fonction diélectrique complexe du milieu.

En modifiant la relation 2.12, on peut faire apparaître la susceptibilité diélectrique complexe $\tilde{\chi}$ du milieu :

$$\vec{P} = \epsilon_0(\tilde{\epsilon} - 1)\vec{E} = \epsilon_0\tilde{\chi}\vec{E} \quad 2.13$$

La fonction diélectrique complexe peut alors être exprimée en fonction de la susceptibilité diélectrique :

$$\tilde{\epsilon} = 1 + \tilde{\chi} \quad 2.14$$

Cette susceptibilité diélectrique peut être assimilée à la réponse impulsionnelle d'un milieu. Il existe plusieurs mécanismes permettant de générer une polarisation et donc une absorption dans un milieu. Nous allons à présent décrire ces différents mécanismes.

2.3.1.1 Transitions interbandes et modèle de Lorentz

Dans le cas des matériaux diélectriques, l'excitation d'un atome induit des transitions électroniques interbandes. Le centre de gravité des charges positives du noyau ne correspond plus à celui du nuage électronique de charge négative ([figure 2-4](#)). Il en découle l'apparition d'une polarisation électronique. Si ce phénomène est prépondérant dans le domaine de l'ultraviolet, il peut être considéré comme constant à partir du visible ou de l'infrarouge.

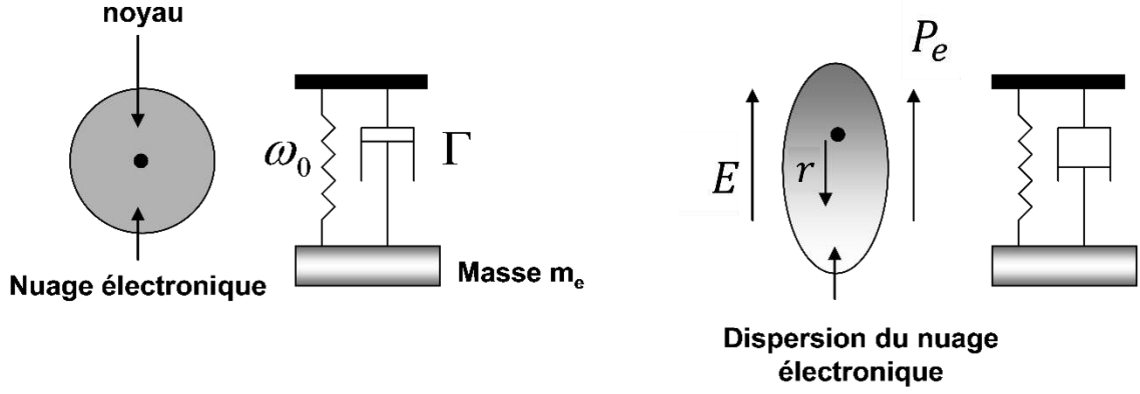


Figure 2-4 : Représentation schématique du déplacement du cortège électronique.

L'interaction entre les électrons et le noyau peut être décrit par un modèle d'oscillateur harmonique forcé dit de Lorentz comme indiqué par la relation ci-dessous :

$$m_e \frac{d^2 \vec{r}}{dt^2} + m_e \Gamma \frac{d\vec{r}}{dt} + m_e \omega_0^2 \vec{r} = q_e \vec{E} \quad 2.15$$

Où m_e est la masse de l'électron, Γ le coefficient d'amortissement, ω_0 la fréquence de résonance et q_e la charge de l'électron. Le deuxième, et troisième terme de la relation 2.15 correspondent respectivement à la force de friction entraînant l'amortissement de l'oscillateur et à la force de rappel de l'oscillateur. Le terme de l'autre côté du signe égal correspond à la force exercée par le champ électrique sur l'électron. La transformée de Fourier de l'équation différentielle peut être définie par les relations 2.16 et 2.17, ci-dessous :

$$-m_e \omega^2 \vec{r}(\omega) - m_e \omega \Gamma j \vec{r}(\omega) + m_e \omega_0^2 \vec{r}(\omega) = q_e \vec{E}(\omega) \quad 2.16$$

$$[m_e (\omega_0^2 - \omega^2) - m_e \Gamma j \omega] \vec{r}(\omega) = q_e \vec{E}(\omega) \quad 2.17$$

En réécrivant la relation 2.17, on peut définir le vecteur position $\vec{r}$ de l'oscillateur harmonique par :

$$\vec{r}(\omega) = \frac{q_e}{m_e [(\omega_0^2 - \omega^2) - j\omega]} \vec{E}(\omega) \quad 2.18$$

Le moment dipolaire de l'oscillateur $\vec{M}(\omega)$ est défini comme le produit du vecteur position de l'oscillateur harmonique par la charge électronique :

$$\vec{M}(\omega) = q_e \vec{r}(\omega) = \frac{q_e^2}{m_e [(\omega_0^2 - \omega^2) - j\omega]} \vec{E}(\omega) \quad 2.19$$

La polarisation est définie comme étant le moment dipolaire par unité de volume telle que :

$$\vec{P}(\omega) = \frac{\vec{M}(\omega)}{V} = \frac{\sum_i \vec{M}_i(\omega)}{V} \quad 2.20$$

Où V est le volume du milieu et l'indice i l'indexation de chaque oscillateur. La relation 2.20 peut être simplifiée par la relation 2.21, en travaillant avec un moment dipolaire moyen par atome.

$$\vec{P}(\omega) = n\langle\vec{M}(\omega)\rangle \quad 2.21$$

Où $n = N/V$ est le nombre d'atomes par unité de volume. La polarisation peut alors être définie par la relation 2.22, ci-dessous :

$$\vec{P}(\omega) = \frac{nq_e^2/m_e}{\omega_0^2 - \omega^2 - \Gamma j\omega} \vec{E}(\omega) \quad 2.22$$

A partir des relations 2.13 et 2.22, on peut évaluer la susceptibilité liée aux transitions interbandes sous la forme :

$$\tilde{\chi}_{el} = \frac{nq_e^2/(m_e \epsilon_0)}{\omega_0^2 - \omega^2 - \Gamma j\omega} \quad 2.23$$

En définissant la fréquence plasma par la relation 2.24, on peut évaluer la fonction diélectrique complexe liée aux contributions électroniques par la relation 2.25.

$$\omega_p = \sqrt{\frac{nq_e^2}{m_e \epsilon_0}} \quad 2.24$$

$$\tilde{\epsilon} = 1 + \frac{\omega_p^2}{\omega_0^2 - \omega^2 - \Gamma j\omega} \quad 2.25$$

2.3.1.2 Transitions intra-bandes et modèle de Drude

Dans les matériaux métalliques, la réponse optique est liée à la présence de charges libres (électrons ou trous) dans la bande de conduction. L'oscillation collective des porteurs de charges libres constitue une pseudo-particule nommé plasmon. Ce dernier est le principal responsable des absorptions dans la gamme du visible et du proche infrarouge.

La susceptibilité liée à la contribution des plasmons se déduit de la relation 2.23 en considérant qu'il n'y a pas de force de rappel, si bien que l'on considère que $\omega_0 = 0$. Cette susceptibilité peut donc être définie par la relation 2.26, ci-dessous :

$$\tilde{\chi}_{pl} = -\frac{n_e q_e^2 / (m_e^* \epsilon_0)}{\omega^2 + \gamma j\omega} = -\frac{\omega_p^2}{\omega(\omega + \gamma j)} \quad 2.26$$

Où n_e est la densité volumique des porteurs de charges libres (électrons ou trous), q_e la charge de l'électron, m_e^* la masse réduite de l'électron, ω_p la fréquence plasma et γ le coefficient d'amortissement du plasmon.

La fonction diélectrique de ce type d'interaction est définie par le modèle dit de Drude :

$$\tilde{\varepsilon} = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega(1 + \gamma j)} \quad 2.27$$

2.3.1.3 Vibrations atomiques (phonons)

Les atomes sont composés de plusieurs niveaux d'énergies électroniques, il y a donc plusieurs résonances possibles. A cela s'ajoute le fait qu'il existe d'autres sources de résonance que celles liées aux électrons. A l'échelle macroscopique, tous les mécanismes sont décrits au moyen d'un modèle de Lorentz si bien que la susceptibilité peut être exprimée sous la forme :

$$\tilde{\chi} = \sum_i \frac{f_i \omega_{0,i}^2}{\omega_{0,i}^2 - \omega^2 - \Gamma_i j \omega} \quad 2.28$$

Où f_i , $\omega_{0,i}$ et Γ_i représentent respectivement la force de l'oscillateur, la fréquence de résonance et le coefficient d'amortissement de l'oscillateur.

C'est ainsi que dans le domaine de l'infrarouge, la vibration des atomes peut être décrite par des pseudo-particules nommées phonons. Ces pseudo-particules sont responsables de la réponse optique dans le domaine du moyen et lointain infrarouge. Dans le cas où il y a une seule résonance liée à ce type d'interaction, on introduit la fréquence longitudinale optique ω_{LO} et la fréquence transverse optique ω_{TO} telle que $\frac{f \omega_{TO}^2}{\varepsilon_\infty} = \omega_{LO}^2 - \omega_{TO}^2$. De ce fait, on peut définir la susceptibilité des phonons par :

$$\tilde{\chi}_{ph}(\omega) = \frac{(\omega_{LO}^2 - \omega_{TO}^2) \varepsilon_\infty}{\omega_{TO}^2 - \omega^2 - \Gamma j \omega} \quad 2.29$$

ε_∞ est la constante diélectrique aux hautes fréquences liée aux électrons (interbandes) et traduisant tout ce qui ne peut être décrit à l'échelle macroscopique.

Dans le cas de contributions uniquement électroniques et avec un seul mode de résonance lié aux phonons, la fonction diélectrique sera donnée par :

$$\tilde{\varepsilon} = 1 + \tilde{\chi}_{el} + \tilde{\chi}_{ph} = \varepsilon_\infty + \tilde{\chi}_{ph} = \varepsilon_\infty + \frac{(\omega_{LO}^2 - \omega_{TO}^2) \varepsilon_\infty}{\omega_{TO}^2 - \omega^2 - \Gamma j \omega} \quad 2.30$$

En simplifiant la relation 2.30, on peut définir la fonction diélectrique par la relation 2.31, ci-dessous :

$$\tilde{\varepsilon} = \varepsilon_\infty \left[1 + \frac{(\omega_{LO}^2 - \omega_{TO}^2)}{\omega_{TO}^2 - \omega^2 - \Gamma j \omega} \right] \quad 2.31$$

Cette forme de la fonction diélectrique correspond à celle dominant dans le domaine de l'infrarouge. La DM sera utilisée pour évaluer les trois paramètres de Lorentz que sont les fréquence transverse et longitudinale optiques ainsi que le coefficient d'amortissement.

2.3.1.4 Modèle de Drude-Lorentz

La description des différents mécanismes permettant de générer une polarisation, nous permet d'introduire le modèle de Drude-Lorentz. Ce modèle est largement utilisé pour décrire les propriétés radiatives des polytypes de SiC (Chafai et al. 2001; Harima, Nakashima, et Uemura 1995; Li, Chen, et Shi 2010; Nakashima et al. 2004, 2005, 2008; Piluso et al. 2010; Yugami et al. 1987), car il permet de décrire la fonction diélectrique sur toutes les fréquences du SiC dopé. Le modèle de Drude-Lorentz est défini par :

$$\tilde{\varepsilon} = \varepsilon_{\infty} \left[1 + \frac{\omega_{LO}^2 - \omega_{TO}^2}{\omega_{TO}^2 - \omega^2 - \Gamma j \omega} - \frac{\omega_p^2}{\varepsilon_{\infty} \omega (1 + \gamma j)} \right] \quad 2.32$$

2.3.2 Coefficients thermo-radiatifs

2.3.2.1 Expression des indices de réfraction et d'extinction

L'indice de réfraction complexe $\tilde{n}$ a une partie réelle n appelée indice de réfraction, et une partie imaginaire k appelée indice d'extinction. L'indice de réfraction traduit la vitesse de propagation (dispersion) d'une onde électromagnétique dans un milieu. Et l'indice d'extinction traduit l'absorption de l'énergie radiative (pertes) lors de son parcours dans le milieu. L'indice de réfraction complexe est donné par la relation :

$$\tilde{n} = n + jk = \sqrt{\tilde{\varepsilon}} \quad 2.33$$

En modifiant la relation précédente, on peut exprimer les indices de réfraction et d'extinction en fonction de la permittivité diélectrique :

$$n^2 + 2jnk - k^2 = \varepsilon_r + j\varepsilon_i \quad 2.34$$

Les parties imaginaire et réelle de la fonction diélectrique sont alors exprimées par les équations suivantes :

$$\varepsilon_r = n^2 - k^2 \quad ; \quad \varepsilon_i = 2nk \quad 2.35$$

En combinant les relations 2.34 et 2.35, et en posant dans un premier temps $n = \varepsilon_i / 2k$, et dans un second temps $k = \varepsilon_i / 2n$, on obtient respectivement deux équations du 4^{ième} degré dont la résolution nous donne l'évolution de k et n en fonction de la permittivité diélectrique par les relations :

$$k = \sqrt{\frac{-\varepsilon_r + \sqrt{\varepsilon_r^2 + \varepsilon_i^2}}{2}} = \sqrt{\frac{-\varepsilon_r + |\tilde{\varepsilon}|}{2}} \quad 2.36$$

$$n = \sqrt{\frac{\varepsilon_r + \sqrt{\varepsilon_r^2 + \varepsilon_i^2}}{2}} = \sqrt{\frac{\varepsilon_r + |\tilde{\varepsilon}|}{2}} \quad 2.37$$

La détermination des indices de réfraction et d'extinction se fait alors par le biais de la fonction diélectrique du matériau d'étude.

2.3.2.2 Expression du coefficient de transmission volumique

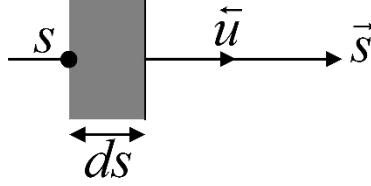


Figure 2-5 : Atténuation de la luminance monochromatique à travers un milieu.

Sur un trajet de longueur ds dans la direction du vecteur unitaire $\vec{u}$ (figure 2-5), la luminance monochromatique connaît une atténuation liée à l'absorption dans le milieu telle que :

$$L_\lambda(s + ds, \vec{u}) - L_\lambda(s, \vec{u}) = [-k_{a\lambda} L_\lambda(s, \vec{u})] ds \quad 2.38$$

$$dL_\lambda(s, \vec{u}) = -k_{a\lambda} L_\lambda(s, \vec{u}) ds \quad 2.39$$

$$\frac{dL_\lambda(s, \vec{u})}{L_\lambda(s, \vec{u})} = -k_{a\lambda} ds \quad 2.40$$

Où $k_{a\lambda}$ est le coefficient d'absorption volumique exprimé en m^{-1} . La résolution de cette équation différentielle du premier ordre conduit à l'expression de la luminance à l'abscisse s définie par la relation 2.41, ci-dessous :

$$L_\lambda(s, \vec{u}) = L_\lambda(0, \vec{u}) \cdot \exp(-k_{a\lambda} s) \quad 2.41$$

On peut en déduire une expression du coefficient de transmission $\tau_{v\lambda}$ liée à l'absorption volumique sous la forme :

$$\tau_{v\lambda} = \frac{L_\lambda(s, \vec{u})}{L_\lambda(0, \vec{u})} = \exp(-k_{a\lambda} s) \quad 2.42$$

2.3.2.3 Expression des coefficients thermo-radiatifs

Il est possible d'évaluer le coefficient de réflexion à une interface à partir de la loi de Snell-Descartes et de la relation de Fresnel. La loi de Snell-Descartes est une relation de passage pour un rayon à l'interface de deux milieux d'indices de réfraction différents (figure 2-6). Celle-ci s'écrit :

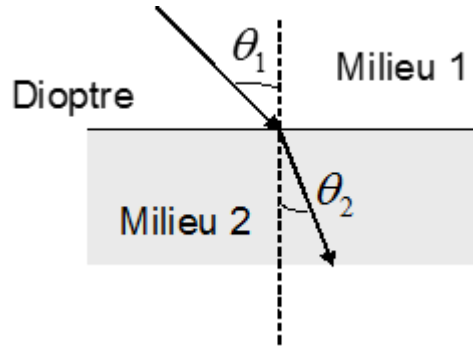


Figure 2-6 : Représentation du rayonnement à l'interface d'un milieu.

$$n_1 \sin \theta_1 = n_2 \sin \theta_2 \quad 2.43$$

Où n_1 et n_2 sont respectivement les indices de réfraction du milieu 1 et 2. Le coefficient de réflexion R à l'interface des deux milieux peut être obtenu à partir de la relation de Fresnel définie ci-dessous :

$$R = \frac{1}{2} \left[\frac{\sin^2(\theta_2 - \theta_1)}{\sin^2(\theta_2 + \theta_1)} + \frac{\tan^2(\theta_2 - \theta_1)}{\tan^2(\theta_2 + \theta_1)} \right] \quad 2.44$$

Dans le cas d'un rayonnement incident normal, le coefficient de réflexion R peut être défini par :

$$R = \left(\frac{n_1 - n_2}{n_1 + n_2} \right)^2 \quad 2.45$$

Pour le cas d'un milieu d'indice complexe $\tilde{n}_1 = n + jk$ et d'un milieu d'indice $\tilde{n}_2 = 1$, la relation précédente s'écrit alors :

$$R = \frac{(n - 1)^2 + k^2}{(n + 1)^2 + k^2} \quad 2.46$$

Considérant à présent le cas d'une lame d'épaisseur finie optiquement polie ([figure 2-7](#)), la transmissivité τ_V liée à l'absorption volumique de la lame d'épaisseur d est déterminé à partir de la formule suivante :

$$\tau_V = \exp(k_a d) \quad 2.47$$

Le flux total réfléchi Φ_r par la lame s'écrit:

$$\Phi_r = \Phi_i \left[R + (1 - R)^2 R \tau_V^2 \sum_{n=0}^{\infty} (R \tau_V)^{2n} \right] \quad 2.48$$

En rappelant que le rapport du flux réfléchi sur le flux incident correspond à la réflectivité ρ , on peut définir cette dernière par la relation :

$$\rho = \frac{\Phi_r}{\Phi_i} = R \left(1 + \frac{(1-R)^2 \tau_V^2}{1-R^2 \tau_V^2} \right) \quad 2.49$$

Il en va de même pour la transmissivité τ qui correspond au rapport entre le flux transmis sur le flux incident :

$$\tau = \frac{\Phi_t}{\Phi_i} = \frac{(1-R)^2 \tau_V}{1-R^2 \tau_V^2} \quad 2.50$$

L'absorptivité α se déduit à partir de la deuxième loi de Kirchhoff :

$$\alpha = 1 - \rho - \tau = 1 - R \left(1 + \frac{(1-R)^2 \tau_V^2}{1-R^2 \tau_V^2} \right) - \frac{(1-R)^2 \tau_V}{1-R^2 \tau_V^2} \quad 2.51$$

La première loi de Kirchhoff permet finalement d'en déduire l'émissivité ε à partir de l'absorptivité pour une même longueur d'onde :

$$\varepsilon_\lambda = \alpha_\lambda \quad 2.52$$

Les relations présentées dans cette section seront utilisées dans le code fait maison pour évaluer les coefficients thermo-radiatifs des différents échantillons étudiés.

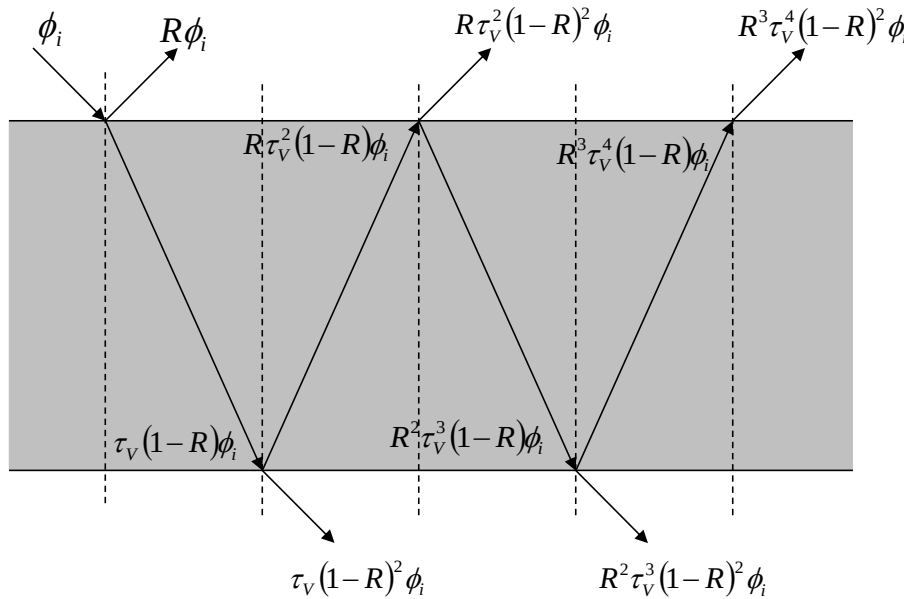


Figure 2-7 : Schématisation des rayons lumineux dans une lame d'épaisseur d optiquement polie

2.3.3 Modèle numérique pour la détermination des propriétés thermo-radiatives

Les deux sections précédentes (section 2.3.1 et section 2.3.2) permettent d'introduire les différents coefficients qui vont être traités par notre modèle numérique. Comme détaillé dans la section 2.3.2, les propriétés thermo-radiatives d'un matériau dépendent de son indice de réfraction complexe $\tilde{n}$, dont les parties réelle et imaginaire dépendent elles aussi de la fonction diélectrique $\tilde{\epsilon}$.

Dans la section 2.3.1, nous avons montré que le modèle de Drude-Lorentz est le modèle qui permet de décrire la fonction diélectrique du SiC sur toutes les fréquences.

Le modèle numérique utilisé pour évaluer les propriétés thermo-radiatives du SiC a été implémenté dans un code fortran. Le programme permet, à partir du modèle de Drude-Lorentz et des différentes relations présentées dans les sections précédentes, de calculer les différents coefficients thermo-radiatifs du SiC. Pour rappel, le modèle de Drude-Lorentz (relation 2.32) dépend de la constante diélectrique aux hautes fréquences ϵ_∞ , des paramètres de Drude que sont ω_p , γ et des paramètres de Lorentz que sont ω_{LO} , ω_{TO} et Γ .

La fréquence plasma ω_p et le coefficient d'amortissement du plasmon γ du modèle de Drude sont respectivement définis par les relations 2.53 et 2.54.

$$\omega_p = \sqrt{\frac{n_e q_e^2}{m_e^* \epsilon_0}} \quad 2.53$$

Pour rappel, n_e est la densité volumique des porteurs de charges libres (électrons ou trous), q_e la charge de l'électron, m_e^* la masse réduite de l'électron, et ϵ_0 la permittivité diélectrique du vide.

$$\gamma = \frac{q_e}{m_e^* \mu} \quad 2.54$$

Où μ est la mobilité des porteurs de charge. Cette dernière décrit la vitesse $\vec{v}$ de dérive des électrons sous l'influence d'un champ électrique $\vec{E}$ à partir de la relation ci-dessous :

$$\vec{v} = \mu \vec{E} \quad 2.55$$

À faible champ électrique, la vitesse des électrons augmente presque linéairement avec le champ et la mobilité a une valeur constante (mobilité à faible champ). La mobilité à bas champ est une fonction de la concentration de dopage et de la température. Caughey et Thomas (Caughey et Thomas 1967) ont développé une expression empirique permettant de tenir compte de l'influence du dopage sur la mobilité des porteurs de charge :

$$\mu_0 = \mu_{min} + \frac{\mu_{max} - \mu_{min}}{1 + \left(\frac{N}{N_{ref}}\right)^{\bar{\alpha}}} \quad 2.56$$

Où μ_{min} et μ_{max} sont respectivement les mobilités électroniques mesurées pour l'échantillon non dopé et l'échantillon fortement dopé tous deux à une température de référence (300 K). N et N_{ref} correspondent respectivement aux densités de porteur de charge d'étude et aux densités de porteur de charge de référence (mesuré pour une mobilité moyenne comprise entre μ_{min} et μ_{max}). La constante $\bar{\alpha}$ correspond à la mesure de rapidité pour laquelle la mobilité passe de μ_{min} à μ_{max} .

La dépendance à la température de la mobilité se fait via la relation 2.57, où l'évolution en température de chaque paramètre de la relation 2.56 est obtenue à partir d'un modèle mathématique permettant de reproduire les valeurs expérimentales.

$$Par = Par_0 \cdot \left(\frac{T}{T_{ref}} \right)^\gamma \quad 2.57$$

Où Par peut représenter μ_{min} , μ_{max} , N_{ref} et $\bar{\alpha}$. Le coefficient γ correspond à une constante évaluée à partir du modèle mathématique.

De nombreuses études ont été menées afin de déterminer et d'optimiser les paramètres permettant de déterminer la mobilité électronique du SiC 3C, 4H et 6H (Mnatsakanov et al. 2004; Mnatsakanov, Pomortseva, et Yurkov 2001; Roschke et Schwierz 2001).

Mnatsakanov et ses collaborateurs (Mnatsakanov et al. 2004) ont étendu le modèle de Caughey et Thomas afin d'avoir des paramètres de fit qui donnent des résultats plus en accord avec les résultats expérimentaux pour les trois polytypes. Le nouveau modèle permet d'évaluer la mobilité en fonction à la fois du dopage et de la température.

$$\mu_i(N, T) = \mu_{max,i}(T_{ref}) \cdot \frac{B_i \cdot \left(\frac{T}{T_{ref}} \right)^{\beta_i}}{1 + B_i(N) \cdot \left(\frac{T}{T_{ref}} \right)^{\bar{\alpha}_i + \beta_i}} \quad 2.58$$

Où l'indice i correspond au type de charge libre (électron ou trou) et B_i correspondant à une constante obtenue à partir de la relation 2.59, ci-dessous :

$$B_i = \left[\frac{\mu_{min,i} + \mu_{max,i} \cdot \left(\frac{N_{ref}}{N} \right)^{\gamma_i}}{\mu_{max,i} - \mu_{min,i}} \right]_{T_{ref}} \quad 2.59$$

Tableau 2-1 : Paramétrage du modèle Mnatsakanov pour le SiC 3C, 4H et 6H et pour différents types de porteurs de charges (Mnatsakanov et al. 2004).

Polytypes	Type de charge	μ_{max} [cm ² .V ⁻¹ .s ⁻¹]	μ_{min} [cm ² .V ⁻¹ .s ⁻¹]	N_{ref} [cm ⁻³]	γ	$\bar{\alpha}$	β
4H-SiC	électron	800	30	2x10 ¹⁷	0.67	2.60	0.50
4H-SiC	trou	117	33	1x10 ¹⁹	0.50	-	-
6H-SiC	électron	400	25	1x10 ¹⁸	0.80	2.10	0.70
6H-SiC	trou	95	25	5x10 ¹⁸	0.40	2.00	-
3C-SiC	électron	750	50	2x10 ¹⁷	0.80	2.50	0.30

Cependant, il n'existe à notre connaissance aucun modèle permettant de remonter aux paramètres de Lorentz en fonction à la fois de la température et du dopage. Or, il est primordial de pouvoir décrire l'évolution des paramètres de Lorentz à la fois en température et en fonction de la concentration en porteurs de charge pour pouvoir évaluer la fonction diélectrique sur toutes les fréquences et par suite les propriétés thermo-radiatives du SiC. La solution proposée pour pallier au manque d'information sur l'évolution des paramètres de Lorentz en température et en dopage est d'évaluer ces paramètres par la technique de la dynamique moléculaire DM.

2.4 La dynamique moléculaire

2.4.1 Généralité

La dynamique moléculaire (DM) est une méthode qui, par l'intégration des équations du mouvement, génère un ensemble de trajectoires dans l'espace des phases à partir desquelles les propriétés structurales, vibrationnelles, thermodynamiques et de transport d'un système à plusieurs corps peuvent être déterminées. Nous supposons que les interactions inter-particules sont décrites par un potentiel différentiable $U(\vec{r}_i, i = 1, N)$ où N est le nombre de particules du système. D'après les équations de Newton, la force agissant sur la i -ème particule est :

$$\vec{F}_i = -\vec{\nabla}_i U(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) \quad 2.60$$

Plusieurs ouvrages permettent d'acquérir les notions de base de cette technique (Allen et Tildesley 2017; Bassani, Liedl, et Wyder 2005; Frenkel et Smit 2002; Meyer, Pontikis, et North Atlantic Treaty Organization 1991). Au cœur même de tout schéma de dynamique moléculaire se trouve la question de la description - c'est-à-dire, de l'approximation - des interactions atomiques. Le niveau de précision avec lequel on choisit de décrire le potentiel d'interaction détermine si le type de dynamique moléculaire sera *ab initio* (DMAI), à liaison-fort (*tight-binding DMTB*) ou classique (DMC).

DMAI : L'idée de base de toute méthode de dynamique moléculaire *ab initio* est de calculer les forces agissant sur les noyaux par le biais de calculs de structure électronique qui sont effectués "à la volée" au fur et à mesure que la trajectoire de la dynamique moléculaire est générée (Iftimie, Minary, et Tuckerman 2005). Cela implique que les variables électroniques ne sont pas intégrées au préalable, mais qu'elles sont considérées comme des degrés de liberté actifs. Dans sa forme la plus idéale, un calcul DMAI suppose seulement que le système est composé de N noyaux et de N_e électrons, que l'approximation de Born-Oppenheimer est valide, et que la dynamique des noyaux peut être traitée classiquement sur la surface électronique de l'état fondamental. L'hamiltonien total est :

$$H = T_e + V_{ee} + V_{eN} + T_N + V_{NN} \equiv H_{elec} + T_N + V_{NN} \quad 2.61$$

où les termes sont respectivement l'énergie cinétique électronique, la répulsion coulombienne électron-électron, l'attraction coulombienne électron-nucléaire, l'énergie cinétique nucléaire et la répulsion coulombienne nucléaire-nucléaire. Le problème de l'état fondamental électronique ne pouvant être résolu de manière exacte, des méthodes de structure électronique approximatives sont nécessaires. Les classes d'approximations les plus courantes sont les approximations de densité locale, de gradient généralisé et de méta-gradient généralisé. Dans le type de calcul AIMD le plus simple, le système est intégré pour tous les pas de temps et les forces sont calculées en minimisant la fonctionnelle d'énergie à la configuration nucléaire actuelle. Ce type d'AIMD est appelé dynamique de Born-Oppenheimer. Cependant, la minimisation doit être effectuée avec un haut niveau de précision pour garantir que l'hamiltonien

nucléaire classique est correctement conservée. L'AIMD peut également être réalisée en utilisant l'approche Lagrangienne étendue de Car-Parrinello (CP) (Car et Parrinello 1985). Dans cette approche une dynamique pour les orbitales est introduite qui propage un ensemble d'orbitales, initialement entièrement minimisées, vers des minima ultérieurs correspondant à chaque nouvelle configuration nucléaire. Cette tâche est accomplie en concevant la dynamique des orbitales de telle sorte que les orbitales soient maintenues à une "température" T_e qui est beaucoup plus petite que la température nucléaire réelle T , mais qui est la plupart du temps autorisée à se relaxer rapidement en réponse au mouvement nucléaire. L'avantage de l'AIMD est de donner des résultats plus précis, car le mécanisme, mise en jeu peut, prend en compte toutes les absorptions élémentaires. Cette méthode est cependant coûteuse en temps de calcul (le coût s'échelonne comme N^3), et de ce fait, limitée à des systèmes petits (quelques centaines d'atomes), et non complexes

TBMD : Un niveau intermédiaire de sophistication qui prend en compte à la fois les demandes de description des électrons et de simulation de systèmes plus grands que ceux qui sont abordables avec l'AIMD est représenté par le MD à liaisons fortes (TB) (Colombo 2006). Avec des approximations appropriées, il est alors possible d'économiser une quantité raisonnable de temps de calcul sans perdre complètement la description mécanique quantique du système. Dans la TB, les fonctions d'onde des électrons ψ_n sont développées comme une combinaison linéaire d'orbitales atomiques

$$\psi_n = \sum_{li} c_{li}^n \phi_{li} \quad 2.62$$

où l est l'indice du nombre quantique. Pour simplifier, on suppose souvent d'avoir un ensemble de base orthogonal d'orbitales atomiques. Les éléments de la matrice du hamiltonien à un électron $\langle \phi_{li} | H | \phi_{li} \rangle$ sont alors traités comme des constantes à ajuster (en accord avec la théorie de Slater-Koster), plutôt que de s'évaluer de manière cohérente. La procédure d'ajustement (fit) est effectuée en supposant : (i) un ensemble de base minimal, (ii) des superpositions à courte portée et (iii) une approximation à deux centres. De plus, la différence entre le potentiel de noyau et électronique est généralement remplacée par un potentiel effectif empirique, dont la calibration est similaire à celle du potentiel du modèle. Pour cette raison, le TBMD est également appelé MD semi-empirique. La charge de travail du CPU dans TB est considérablement réduite par rapport à AIMD. La partie la plus coûteuse est la diagonalisation à chaque pas de temps de la matrice TB. Cette opération a une échelle de N^3 , donc son utilisation est limitée à plusieurs centaines de milliers de particules.

Dans le cadre de notre étude, nous privilégions la méthode classique du DM, dont le principe sera détaillé dans les sections suivantes. Cette méthode nous permettra d'étudier des systèmes plus complexes tels que le TIC-SiC et de prendre en compte les effets des hautes températures, qui sont les températures de travail du CSPT.

2.4.2 Dynamique moléculaire classique

La dynamique moléculaire classique respecte les mêmes conditions que celles des études expérimentales. Lorsqu'une étude expérimentale est menée, on suit la procédure suivante. On prépare l'échantillon du matériau que l'on souhaite étudier. On connecte les appareils de mesure sur l'échantillon (thermomètre, baromètre, ampèremètre ...), et on mesure les quantités voulues durant un intervalle de temps. Pour pallier les bruits statiques des mesures sont moyennées sur des périodes plus courtes. Ce qui permet d'avoir des résultats plus précis. Dans le cas de la DMC, on suit la même procédure. D'abord on prépare l'échantillon, en définissant la structure cristallographique et le nombre d'atomes du système. Ensuite, on résout les équations de mouvement de Newton du système jusqu'à ce que les propriétés du système n'évoluent plus (phase de mise en équilibre thermodynamique). Enfin, on mesure les quantités voulues. Les types d'erreur pouvant être obtenues par la DMC sont similaires à ceux que l'on peut avoir lors d'une expérience réelle (l'échantillon n'est pas bien préparé, les mesures ne sont pas assez longues, le système subit des irréversibilités lors de l'expérience, où la quantité mesurée n'est pas la bonne). Pour mesurer une quantité par la DM (à partir de maintenant, nous ferons référence à la DMC en tant que DM), il faut d'abord être capable d'exprimer cette quantité en fonction de la position et du moment atomique du système.

La DM peut être considérée comme un programme simple composé de plusieurs étapes:

1. Lecture des paramètres qui définissent les conditions de la simulation (exemples : la température initiale, le nombre de particule, la densité, le pas de temps...).
2. Initialisation du système, définition des positions atomiques et de leurs vitesses.
3. Calcul des forces d'interactions entre les particules, à partir de la connaissance du potentiel interatomique décrivant leurs interactions.
4. Résolution des équations de Newton. Les étapes 3 et 4 définissent le corps de la simulation. Ces deux étapes sont répétées jusqu'à atteindre les conditions de taille et de temps définis préalablement.
5. Calcul et sauvegarde de la moyenne des quantités souhaitées.

2.4.2.1 Initialisation du système

Pour commencer la simulation, il faut d'abord définir les positions et les vitesses de toutes les particules du système. Les positions des particules doivent être compatibles avec la structure cristallographique de l'échantillon étudié. Les particules ne doivent jamais se chevaucher entre elles. Par la suite, il faut définir la vitesse de chaque particule de sorte que l'ensemble des particules répondent à la distribution de Maxwell-Boltzmann pour une température donnée :

$$k_B T = \sum_{i=1}^N \frac{m_i v_{\alpha,i}^2}{3N} \quad 2.63$$

Où k_B correspond à la constante de Boltzmann, T à la température désirée, i à l'indice de la particule observée, m masse de la particule, α l'indice de la direction

spatiale (x , y ou z), v à la vitesse de la particule, et N au nombre total de particules du système.

Ensuite, la simulation est lancée pour générer les nouvelles positions des particules, en suivant la relation définie par la relation 2.63. Ce démarrage ne tient pas compte des équations du mouvement de Newton, mais uniquement de la conservation linéaire de la quantité de mouvement atomique.

$$\vec{x}_m(i) = \vec{x}(i) - \vec{v}(i)\Delta t \quad 2.64$$

Où $\vec{x}_m(i)$ correspond à la position de la particule i au temps $(t - \Delta t)$, $\vec{x}(i)$ à la position au temps t , et Δt au pas de temps.

2.4.2.2 Calcul des forces d'interactions

L'étape où le programme calcule les forces d'interactions de chaque particule est l'étape qui consomme le plus en temps de calcul. Dans le cas, où l'on considère uniquement les interactions de paires, le programme prend en compte les contributions de toutes les forces s'appliquant sur l'atome i et provenant de tous ses voisins. Si le programme ne contient pas d'artifice, cela implique que le temps nécessaire pour évaluer les forces est l'ordre de N^2 . Il existe de nombreuses techniques permettant d'accélérer les temps de simulation que ce soit pour les forces courtes et/ou longues portées, que nous ne détaillerons pas dans ce manuscrit. Le sujet étant dans un domaine autre que notre sujet d'étude.

Dans un premier temps le programme calcule les distances actuelles entre l'atome i et l'atome j dans les trois directions $\vec{x}$, $\vec{y}$ et $\vec{z}$. Ce calcul est réalisé suivant les conditions aux limites de Bon Van Karman (BVK), qui consiste à remplacer un atome sortant d'une face du volume par son équivalent entrant par la face opposée, dont l'illustration est représentée sur la [figure 2-8](#).

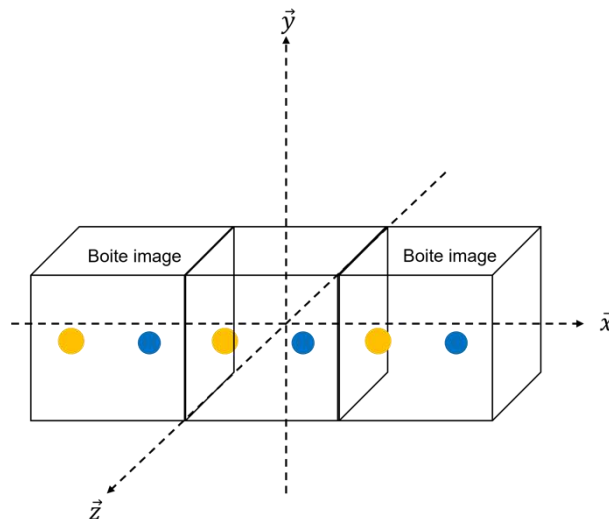


Figure 2-8 : Principe de l'application des conditions aux limites suivant la direction $\vec{x}$

Les forces d'interactions entre les particules sont calculées à partir du potentiel d'interactions utilisé pour décrire les interactions atomiques. Les calculs sont réalisés uniquement si les distances d_{ij} entre l'atome i et l'atome j sont inférieures au rayon

de coupure r_c d'application dudit potentiel interatomique. Dans le cas où $d_{ij} < r_c$, le programme calcul automatiquement les forces d'interactions (Eq. 2.60), dans le cas contraire la force est estimée comme étant nulle. Le calcul des forces étant une étape primordiale de la simulation de DM, il est important de bien choisir le potentiel interatomique à utiliser pour bien évaluer les quantités que l'on souhaite mesurer.

2.4.2.3 Résolution des équations de Newton

Une fois avoir calculer les forces s'appliquant sur tous particules du système, le programme intègre les équations de mouvement de Newton. Pour ce faire, le programme utilise l'algorithme de Verlet (Frenkel et Smit 2002) décrit ci-dessous.

1. Les positions des particules sont mises à jour au temps $t + \Delta t$:

$$\vec{r}_i(t + \Delta t) = \vec{r}_i(t) + \vec{r}(t)\Delta t + \frac{1}{2}\vec{r}_i(t)\Delta t^2 \quad 2.63$$

2. La vitesse des particules est évaluée au milieu de l'étape.

$$\vec{r}\left(t + \frac{\Delta t}{2}\right) = \vec{r}(t) + \frac{1}{2}\vec{r}_i(t)\Delta t \quad 2.64$$

3. Les forces et les accélérations peuvent alors être évaluées à l'aide de l'équation.

$$\vec{r}_i(t) = \frac{1}{m_i}\vec{F}_i(t) \quad 2.65$$

4. Les vitesses sont ensuite réactualisées au temps

$$\vec{r}(t + \Delta t) = \vec{r}\left(t + \frac{\Delta t}{2}\right) + \frac{1}{2}\vec{r}_i\left(t + \frac{\Delta t}{2}\right)\Delta t \quad 2.66$$

Cet algorithme ne requiert pour chaque particule que neuf informations de base (c'est-à-dire la position, la vitesse et les composantes de l'accélération) ; il n'est pas exigeant et sa mise en œuvre est simple. De plus, il est stable et permet l'utilisation de pas de temps assez importants. Cette expression pour la vitesse n'est exacte que pour l'ordre Δt^2 . Le programme utilise les vitesses uniquement pour calculer l'énergie cinétique et, par conséquent, la température instantanée. Après le calcul, les positions actuelles deviennent les anciennes positions et les nouvelles positions deviennent les positions actuelles. Et après chaque pas de temps, le programme calcule la nouvelle température, l'énergie potentielle et l'énergie totale. Si le programme est bien défini et que le pas de temps Δt est bien choisi, l'énergie totale du système sera bien conservée. Cette étape termine l'introduction du fonctionnement de la DM.

2.4.2.4 Les ensembles thermodynamiques

L'un des critères permettant de vérifier la validité d'une simulation de DM est la conservation de l'énergie. Cette validation se fait en définissant un système dans un ensemble dit microcanonique, dans lequel le nombre de particule N , le volume V et l'énergie E sont conservés (ensemble *nve*). Classiquement l'algorithme de Verlet permet d'atteindre cette conservation de l'énergie. L'algorithme de Verlet est aussi considéré comme permettant d'atteindre une conservation de l'énergie à courte

portée, et une petite dérivation de l'énergie à longue portée. Il n'existe pas d'algorithme permettant d'atteindre une conservation de l'énergie à court et longue portée avec la DM. On considère que l'énergie du système est stable si la déviation de l'énergie est de l'ordre de $10^{-5} eV$ par rapport à l'énergie mesurée.

Dans le cadre notre étude, nous utiliserons trois types d'ensembles thermodynamiques :

- L'ensemble *nve*, microcanonique : le nombre de particule N , le volume V et l'Energie E sont conservés.
- L'ensemble *nvt* ou canonique : le nombre de particule N , le volume V et la température T sont conservés.
- L'ensemble *npt* : le nombre de particule N , de la pression P , et la température T sont conservés.

Il existe de nombreux algorithmes permettant d'atteindre des ensembles *nvt* et *npt* à partir de la DM. Nous pouvons citer en exemple : l'extension de la méthode Lagrangien introduite par Anderson (Andersen 1980), la méthode de Parrinello et Rahman (Parrinello et Rahman 1981), et la méthode Nosé-Hoover (Martyna, Klein, et Tuckerman 1992; Shūichi Nosé 1984; Shuichi Nosé 1984). Dans le cadre notre étude, nous utiliserons la méthode de Nosé-Hoover développé par Sinoda et ses collaborateurs (Shinoda, Shiga, et Mikami 2004). Ce modèle se base sur la modification de la méthode de Parrinello-Rahman à l'aide de techniques d'échantillonnages utiles utilisant la méthode de la chaine massive de Nosé-Hoover et d'une méthode hybride de Monté Carlo.

La déduction des grandeurs macroscopiques est effectuée à partir des propriétés microscopiques du système, via la DM, en tirant profit des lois de la physique statique. L'ensemble des simulations de DM réalisés durant cette thèse ont été effectué sous LAMMPS (Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator) (<https://www.lammps.org>, n.d.).

2.4.2.5 LAMMPS

Les techniques de la DM ne sont généralement pas gourmandes en mémoire de stockage, puisque seules les informations sur des vecteurs de vitesse et de position des atomes sont stockées. Néanmoins, en termes de calcul numérique, les simulations peuvent être lourdes dépendant du nombre d'atomes présent dans le système et du pas de temps de la simulation (nombre d'itération). Les coordonnées des positions atomiques sont évaluées en angström, en pratique dans un système tridimensionnel, il faut simuler des milliers, voire des millions d'atomes pour approcher l'échelle submicronique. Dans le cas des systèmes liquides ou solides, la taille du pas de temps est contrainte par la précision voulue au niveau des mouvements vibratoires des atomes. C'est-à-dire que plus le pas de temps sera petit, plus précis sera les résultats simulés. Les pas de temps en DM sont estimés généralement en femtoseconde, il faut en moyenne des dizaines, voire des centaines de milliers de pas de temps pour simuler quelques picosecondes du temps « réel » du système étudié.

À cause de la demande en calcul lié aux conditions citées précédemment, de nombreux efforts ont été effectué afin d'optimiser les simulations de DM par les supercalculateurs et les machines parallélisées (Giles et Tamayo 1992; Grest,

Dünweg, et Kremer 1989; Morales et Nuevo 1992; Rapaport 1988) . LAMMPS est un code de DM parallélisé à haute performance, dont le code source provient des travaux menés par Plimpton (1995). Il a été développé à l'origine aux Sandia National Laboratories, une installation du ministère américain de l'énergie (DOE : Department Of Energy). LAMMPS est un code open-source, distribué gratuitement selon les termes de la licence publique GNU version 2. Le code permet d'effectuer des axées sur la modélisation des matériaux en particulier le code permet toucher différents domaines d'étude :

- La mécanique des solides.
- La science des matériaux.
- La chimie.
- La biophysique.
- L'écoulement granulaire.

LAMMPS permet de combiner différents potentiels interatomiques afin d'étudier des systèmes complexes assez facilement, une commande a été incorporée exprès pour faire ce type d'étude. Il est aussi possible de rajouter les interactions coulombiennes de longues portées dans les systèmes étudiés. De part tous ces atouts, au moment le code LAMMPS est un des codes de DM plus utilisés dans le monde.

La procédure d'installation du code LAMMPS est simple à suivre. Le code est parfaitement documenté, la communauté est directement informée des différentes mises à jour réalisées dans le code. Le code étant open-source, il peut facilement être modifié afin de répondre à des études plus développées.

2.4.2.6 Dynaphopy

Le code Dynaphopy développé par Carreras et ses collaborateurs (Carreras, Togo, et Tanaka 2017) est principalement écrit en « Python » dont le goulet d'étranglement en termes de performance est traité par « C ». Le programme permet d'extraire les fréquences et les amortissements des pseudo-particules de phonon à partir de la technique de décomposition en mode normale (McGaughey et Larkin 2014). Dynaphopy peut être associé aux interfaces de DM de LAMMPS ou de VASP, Vienna ab initio simulation package (Kresse et Furthmüller 1996; Kresse et Joubert 1999).

La simulation de DM permet de sortir les trajectoires des particules qui relié avec le code de Phonopy (Togo et Tanaka 2015) permet de calculer les vecteurs propres des phonons. Pour ce faire, le code a besoin des informations de la structure cristalline et des forces s'exercent sur les atomes du système. Pour calculer les fréquences phononiques des pseudo-particules, la vitesse pondérée en fonction de la masse est projetée sur un vecteur d'onde $\vec{q}$ pour obtenir $\vec{v}^{\vec{q}}(t)$. Par la suite, le code utilise l'interface de Phonopy pour obtenir le vecteur propre du phonon à la longueur d'onde $\vec{q}$ et et à l'indice de bande s . La vitesse $\vec{v}^{\vec{q}}(t)$ est alors projeté sur ce vecteur propre pour obtenir $\vec{v}_{\vec{q}s}(t)$ et enfin le spectre de puissance $G_{\vec{q}s}(\omega)$.

2.4.2.6.a Modèle anharmonique

Dans les cristaux parfaits, la position atomique peut être défini par la relation 2.67, ci-dessous :

$$\vec{r}_{jl}(t) = \vec{r}_{jl}^0 + \vec{u}_{jl}(t) \quad 2.67$$

Où $\vec{r}_{jl}^0$ est la position d'équilibre, et $\vec{u}_{jl}$ le déplacement par rapport à la position d'équilibre. Dans l'approximation harmonique le déplacement atomique $\vec{u}_{jl}(t)$ peut exprimer par la relation :

$$\vec{u}_{jl}(t) = \frac{1}{\sqrt{Nm_j}} \sum_{qs} \vec{e}_j(\vec{q}, s) \exp(i\vec{q} \cdot \vec{r}_{jl}^0) \vec{u}_{\vec{q}s}(t) \quad 2.68$$

Où N est le nombre de point dans le réseau cristallin, m_j la masse atomique, $\vec{e}$ le vecteur propre du phonon, $\vec{q}$ et s sont respectivement le vecteur d'onde et la branche, et $\vec{u}_{\vec{q}s}(t)$ est le déplacement dans les coordonnées du phonon. Ces modes phononiques sont obtenues à partir de la résolution des valeurs propres de la matrice dynamique, à partir de:

$$D(\vec{q})e(\vec{q}, s) = \omega_{\vec{q}s}^2 e(\vec{q}) \quad 2.69$$

Où $\omega_{\vec{q}s}$ est la fréquence phononique, et $D(q)$ la matrice dynamique définie par la relation :

$$D_{\alpha\beta}(jj', \vec{q}) = \frac{1}{(m_j m_{j'})^{1/2}} \sum_{ll'} \Phi_{\alpha\beta} \begin{pmatrix} jj' \\ 0l' \end{pmatrix} \exp\left(i\vec{q} \cdot (\vec{r}_{j'l'}^0 - \vec{r}_{j0}^0)\right) \quad 2.70$$

Où α et β sont les indices des coordonnées cartésiennes, Φ est matrice harmonique des constantes de forces donnée par:

$$\Phi_{\alpha\beta} \begin{pmatrix} jj' \\ ll' \end{pmatrix} = \frac{\partial^2 W}{\partial u_{jl\alpha} \partial u_{j'l'\beta}} \quad 2.71$$

Où W est le potentiel énergétique du cristal.

Le modèle des quasiparticules de phonon développée par Zhang et ses collaborateurs (Zhang, Sun, et Wentzcovitch 2014) a été utilisé pour inclure l'anharmonicité. Dans ce modèle, la vitesse atomique $v_{jl}(t)$ est définie par la relation :

$$\vec{v}_{jl}(t) = \frac{1}{\sqrt{Nm_j}} \sum_{qs} \vec{e}_j(q, s) \exp(i\vec{q} \cdot \vec{r}_{jl}^0) \vec{v}_{\vec{q}s}(t) \quad 2.72$$

Où $v_{qs}(t)$ est la vitesse du pseudo-particule de phonon. Le model des quasiparticules de phonon est considéré comme étant un bon modèle si la puissance spectrale de $\vec{v}_{qs}(t)$ a une forme spectrale bien définie. Cela implique que la transformée de Fourier de l'autocorrélation de $\vec{v}_{qs}(t)$ doit avoir une forme spectrale bien définie. Cette puissance spectrale est l'information centrale que peut calculer le code, elle est définie par la relation 2.73, ci-dessous :

$$G_{\vec{q}s}(\omega) = 2 \int_{-\infty}^{\infty} \langle \vec{v}_{\vec{q}s}^*(0) \vec{v}_{\vec{q}s}(\tau) \rangle \exp(i\omega\tau) d\tau \quad 2.73$$

Où $G_{\vec{q}s}(\omega)$ est la puissance spectrale, et $\langle \vec{v}_{\vec{q}s}^*(0) \vec{v}_{\vec{q}s}(\tau) \rangle$ la fonction d'autocorrélation de définie par :

$$\langle \vec{v}_{\vec{q}s}^*(0) \vec{v}_{\vec{q}s}(\tau) \rangle = \lim_{t' \rightarrow \infty} \frac{1}{t'} \int_0^{t'} \vec{v}_{\vec{q}s}(t + \tau) \vec{v}_{\vec{q}s}^*(t) dt \quad 2.74$$

Sun et ses collaborateurs (Sun, Shen, et Allen 2010) ont montré que la puissance spectrale a la forme d'une fonction lorentzienne. Cette technique fonctionne bien lorsque le décalage de la fréquence et le coefficient d'amortissement phononique sont tous deux petits. Partant de cette approximation, la fonction lorentzienne permet définir la puissance spectrale par :

$$G_{\vec{q}s}(\omega) \approx \frac{\langle |\vec{v}_{\vec{q}s}(t)|^2 \rangle}{\frac{1}{2} \gamma_{\vec{q}s} \pi \left(1 + \left(\frac{\omega - \tilde{\omega}_{\vec{q}s}}{\frac{1}{2} \gamma_{\vec{q}s}} \right)^2 \right)} \quad 2.75$$

La représentation de la puissance spectrale par une fonction lorentzienne permet de déterminer la fréquence phononique du pseudo-particule $\tilde{\omega}_{\vec{q}s}$ à la position du pic et le coefficient d'amortissement phononique comme étant la largeur maximum à mi-hauteur du pic. La relation 2.75 n'est utilisée cependant que pour évaluer les courbes des dispersions des phonons. En pratique les paramètres de Lorentz seront évaluées à partir de la méthodologie expliquée dans la section 2.5.

2.4.2.6.b Résultats

La [figure 2-9](#) illustre le type de tracé que permet d'obtenir le code Dynaphopy. L'exemple présenté ici, correspond à la dispersion des phonons harmoniques évaluée pour un système SiC 3C dont les interactions atomiques sont décrites par le potentiel de Vashishta (potentiel décrit dans la section 3.1.1.3). Les traits bleus correspondent aux modes acoustiques et les rouges aux modes optiques.

Le nombre de courbe (ou branche) identifié dans la dispersion des phonons correspond au nombre N d'atome constituant la maille primitive de la structure cristallographique multiplié par trois. Dans le cas présent, la maille primitive de la structure SiC 3C ne contient que deux atomes d'où les six branches identifiées dans la [figure 2-9](#).

Dans le cas de notre étude, nous nous préoccupons essentiellement des branches optiques. La connaissance de ces dernières nous permettra d'évaluer la fonction diélectrique IR.

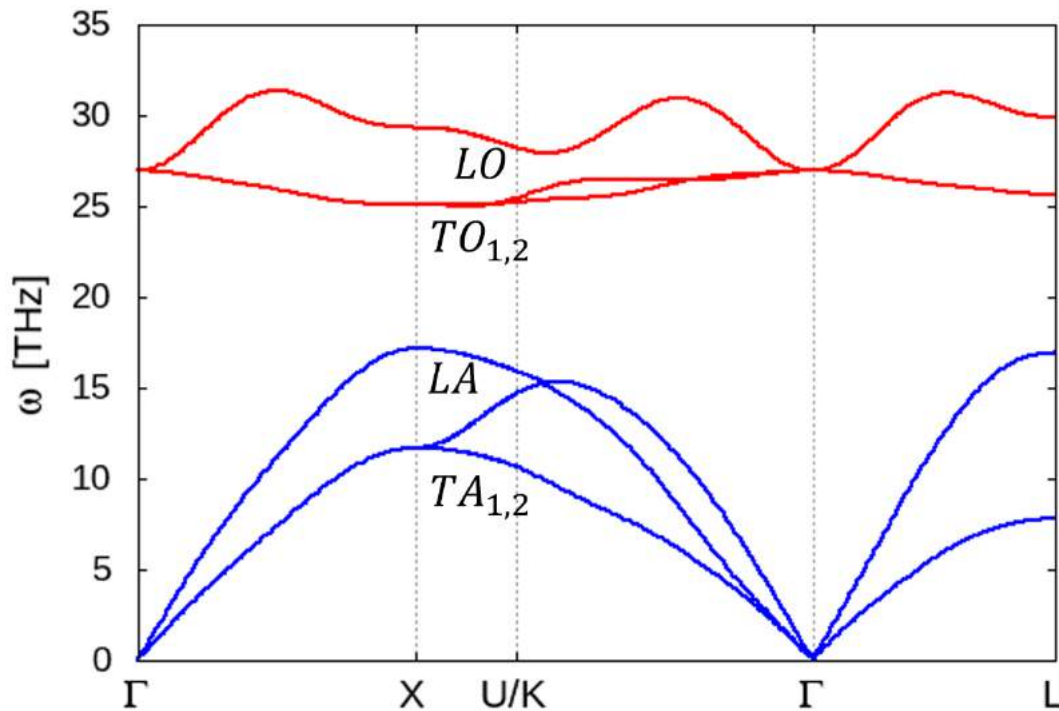


Figure 2-9 : Dispersion des phonons harmoniques du SiC 3C simulé avec le potentiel de Vashishta évaluée à 0 K. Les traits bleus correspondent aux modes acoustiques et les rouges aux modes optiques. Les lettres L, T, O et A sont les abréviations respectives de longitudinal, transversal, optique et acoustique.

Le code de Dynaphopy va nous permettre de choisir de manière judicieuse le potentiel interatomique à utiliser pour évaluer les propriétés thermo-radiatives du SiC. La [figure 2-10](#) correspond au schéma suivi pour faire le choix du potentiel interatomique à utiliser pour décrire les interactions atomiques du SiC. Le potentiel qui permettra d'étudier les propriétés thermo-radiatives du SiC est celui qui représentera au mieux les branches optiques du SiC. Nous effectuerons différentes simulations en utilisant à chaque fois un potentiel interatomique différent, et nous garderons le potentiel qui aura des branches TO et LO qui seront les plus en accord avec les modes optiques mesurés expérimentalement.

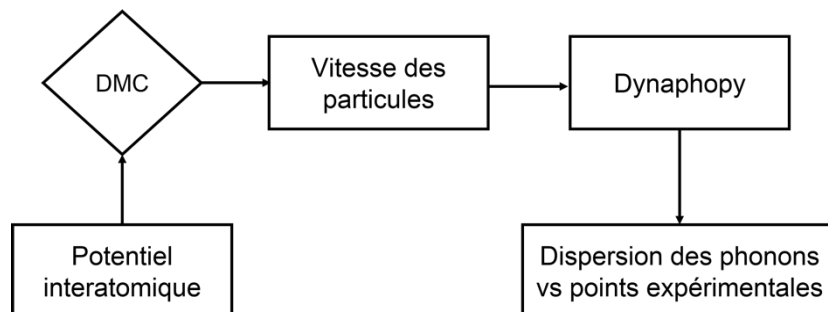


Figure 2-10 : Schéma suivi pour déterminer le potentiel interatomique à utiliser.

2.4.2.7 Correction de la température de simulation de DMC

La température de simulation utilisée en DM, T_{DM} , ne permet pas de bien représenter l'énergie atomique du système à température réelle, $T_{réel}$. Porter et al. (1997) ont proposé une méthode pour corriger la température de simulation de DM. Le principe de cette correction est de faire le lien entre l'énergie totale du système de N atomes avec le système quantique à partir de la relation :

$$3NK_B T_{DM} = \int_0^{\infty} D(\omega) \langle n(\omega, T_{réel}) \rangle h\omega d\omega \quad 2.76$$

Où T_{DM} et $T_{réel}$ sont respectivement les températures de simulation de DM et la température réelle, $\langle n(\omega, T_{réel}) \rangle$ la fonction de distribution de Bose-Einstein, h est la constante de Planck, ω la fréquence de vibration. Le terme $D(\omega)$ correspond à la densité d'état phononique du système. La DOS est obtenue par la DM à partir de la relation :

$$D(\omega) = \frac{1}{K_B T} \sum_i m_i |v_i(\omega)|^2 \quad 2.77$$

En suivant cette méthode Porter et ses collaborateurs (Porter et al. 1997), ainsi que Domingues et ses collaborateurs (Domingues et al. 2018) ont déterminé respectivement l'évolution de la température de simulation en fonction de la température réelle pour le cas du SiC simulé avec un potentiel de Tersoff, et le SiC simulé avec un potentiel de Vashishta.

La [figure 2-11](#) correspond à la DOS évaluée pour un système SiC 3C dont les interactions atomiques sont décrites par le potentiel de Vashishta.

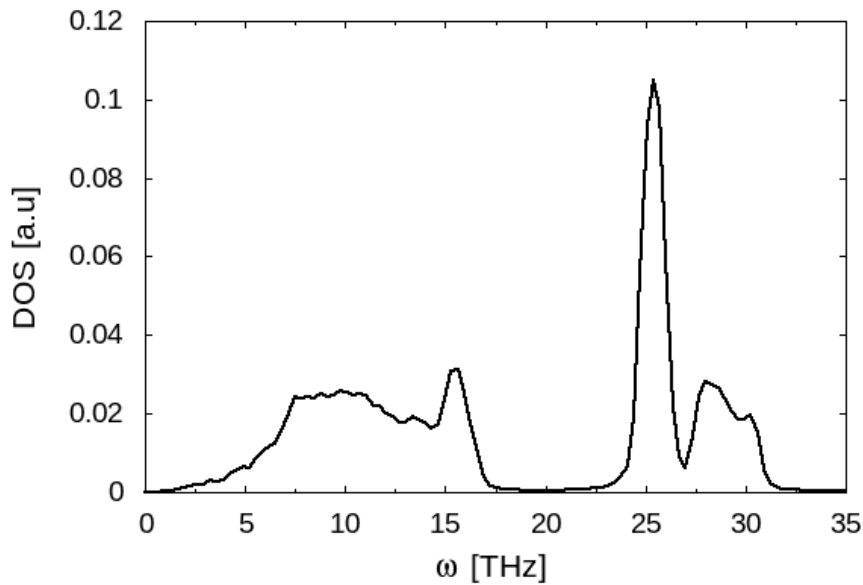


Figure 2-11 : DOS évaluée pour un système SiC 3C simulé avec le potentiel de Vashishta.

La [figure 2-12](#) correspond à la correction à apporter à la température de simulation pour une température réelle donnée. Cette courbe a été construite en utilisant la DOS présentée précédemment. On constate que l'écart entre la température de simulation et la température réelle est plus importante aux faibles températures. Cet écart s'amenuise au fur et à mesure que les températures sont importantes.

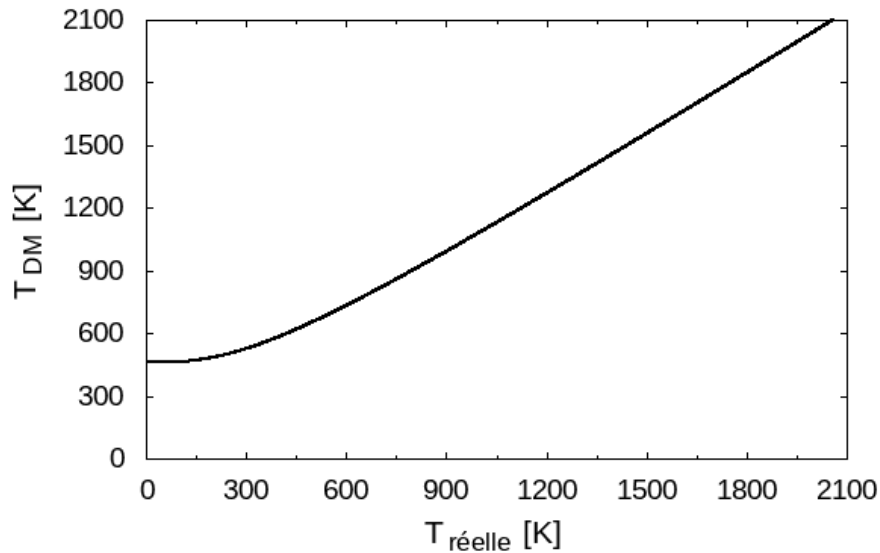


Figure 2-12 : Correction de la température de simulation par rapport à la température réelle.

2.5 Évaluation de la fonction diélectrique IR par la DMC

La théorie de la réponse linéaire permet d'évaluer le moment dipolaire d'un milieu diélectrique comme étant le produit de convolution entre le champ électrique appliqué E_β dans la direction β et la susceptibilité diélectrique microscopique $\chi_{\alpha\beta}^s$:

$$\langle M_\alpha(t) \rangle = \int_{-\infty}^t \chi_{\alpha\beta}^s(t-t') E_\beta(t') dt' \quad 2.78$$

Où α, β sont des directions de l'espace. La transformée de Fourier de la relation précédente permet de fournir le moment dipolaire dans l'espace fréquentiel :

$$\langle M_\alpha(t) \rangle = \chi_{\alpha\beta}^s(\omega) E_\beta(\omega) \quad 2.79$$

La polarisation correspond au moment dipolaire par unité de volume tel que :

$$P_\alpha(\omega) = \frac{\chi_{\alpha\beta}^s(\omega) E_\beta(\omega)}{V} \quad 2.80$$

Les lois de l'électromagnétisme fournissent une autre expression de la polarisation d'un matériau diélectrique soumis à un champ électrique :

$$P_\alpha(\omega) = \varepsilon_0 \chi_{\alpha\beta}(\omega) E_\beta(\omega) \quad 2.81$$

Où $\chi_{\alpha\beta}$ est la susceptibilité diélectrique macroscopique du matériau. Les relations 2.80 et 2.81 permettent d'exprimer la fonction diélectrique macroscopique à partir de la fonction diélectrique microscopique :

$$\chi_{\alpha\beta}(\omega) = \frac{\chi_{\alpha\beta}^s(\omega)}{\varepsilon_0 V} \quad 2.82$$

Où ε_0 est la permittivité diélectrique du vide et V le volume du système. Partant de la relation précédente, la fonction diélectrique peut être exprimée par la relation :

$$\tilde{\varepsilon}_{\alpha\beta}(\omega) = 1 + \frac{\chi_{\alpha\beta}^s(\omega)}{\varepsilon_0 V} \quad 2.83$$

La susceptibilité diélectrique microscopique est donnée par la formule de Green-Kubo (Kubo 1957) sous la forme :

$$\chi_{\alpha\beta}^s(\omega) = -\frac{1}{k_B T} \int_0^\infty \frac{d}{dt} \langle M_\alpha(0) M_\beta(t) \rangle e^{-j\omega t} dt \quad 2.84$$

Où k_B est la constante de Boltzmann et $\langle M_\alpha(0) M_\beta(t) \rangle$ la fonction d'autocorrélation des moments dipolaires. La combinaison des relations 2.83 et 2.84 conduit à une expression générale de la fonction diélectrique en fonction de l'autocorrélation des moments dipolaires du système :

$$\tilde{\varepsilon}_{\alpha\beta}(\omega) = 1 - \frac{1}{\varepsilon_0 V k_B T} \int_0^\infty \frac{d}{dt} \langle M_\alpha(0) M_\beta(t) \rangle e^{-j\omega t} dt \quad 2.85$$

Le calcul du moment dipolaire découle de la sommation sur tous les atomes i du système du produit vecteur position $\vec{r}_i(t)$ par la charge partielle q_i :

$$\vec{M}(t) = \sum_{i=1}^N q_i \vec{r}_i(t) \quad 2.86$$

La DMC n'est pas en mesure de tenir compte des transitions électroniques à l'instar de ce qui est présenté dans le modèle de Lorentz (2.30). Pour établir une équivalence entre les deux expressions de la fonction diélectrique complexe, on multiplie la fonction diélectrique évaluée en DMC par la constante diélectrique aux hautes fréquences ε_∞ :

$$\tilde{\varepsilon}_{\alpha\beta}(\omega) = \varepsilon_\infty - \frac{\varepsilon_\infty}{\varepsilon_0 V k_B T} \int_0^\infty \frac{d}{dt} \langle M_\alpha(0) M_\beta(t) \rangle e^{-j\omega t} dt \quad 2.87$$

En faisant correspondre le modèle de Lorentz avec la fonction diélectrique simulée par DMC, nous pourrions étudier l'évolution en température et en fonction du dopage des paramètres de Lorentz (fréquences transverse optique et longitudinale optique, coefficient d'amortissement phononique Γ).

Afin de diminuer le bruit numérique relatif à l'application de conditions limites périodiques lors des simulations par DMC, nous allons introduire les densités de courant dans l'expression de la fonction diélectrique :

$$\tilde{\varepsilon}_{\alpha\beta}(\omega) = \varepsilon_\infty - \frac{\varepsilon_\infty}{\varepsilon_0 V k_B T j \omega} \int_0^\infty \langle J_\alpha(0) J_\beta(t) \rangle e^{-j\omega t} dt \quad 2.88$$

Où $\langle J_\alpha(0) J_\beta(t) \rangle$ est la fonction d'autocorrélation des densités de courant J_α . Cette grandeur physique est obtenue par dérivation du moment dipolaire par rapport au temps :

$$\vec{J}(t) = \sum_{i=1}^N q_i \vec{v}_i(t) \quad 2.89$$

Où $\vec{v}_i(t)$ est le vecteur vitesse de l'atome i . Le choix de travailler avec les densités de courant se justifie d'autant plus par la gamme de températures couvertes (de 300 K à 1500 K) où les conditions limites sont plus fréquemment appliquées.

En pratique la fonction d'autocorrélation des densités de courant est tronquée à l'instant t où elle converge vers zéro. Cette méthode permet d'avoir un signal minimisant les erreurs numériques au niveau de la fonction diélectrique IR évaluée par la DM.

La [figure 2-13](#) correspond à l'étude d'un échantillon de SiC-3C dont les interactions atomiques sont décrites par le potentiel de Vashishta (section 3.1.1.3). L'autocorrélation des densités de courant est tronquée à $t = 7.4 \text{ ps}$.

Les paramètres de Lorentz sont déterminés en faisant tout simplement une équivalence entre la fonction diélectrique obtenue par la DM (relation 2.88) et celle évaluée par un modèle de Lorentz (relation 2.31). La fréquence transverse optique correspond à la position du pic de la partie imaginaire. La fréquence longitudinale optique correspond quant à elle à la fréquence pour laquelle la partie réelle change de signe. La fréquence du coefficient d'amortissement Γ correspond à la demi-largeur à mi-hauteur du pic de la partie imaginaire. La procédure détaillée de la méthodologie est donnée dans en [annexe](#). La distinction des fréquences LO et TO est possible grâce à la prise en compte dans des charges effectives atomiques (distincte entre Si et C) dans le calcul de la densité de courant (relation 2.89).

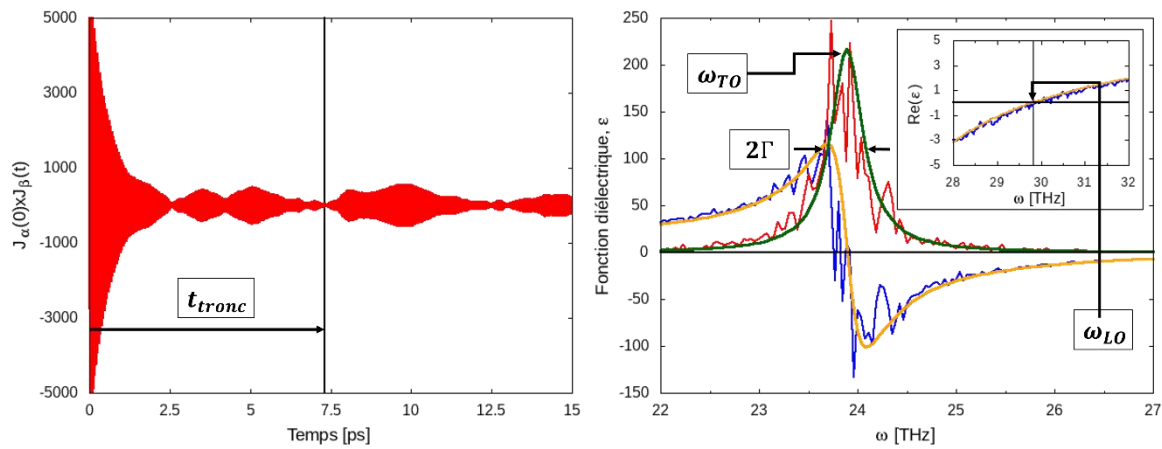


Figure 2-13 : Fonction d'autocorrélation des densités de courant (gauche), fonction diélectrique complexe (droite). Les courbes rouge et bleue correspondent respectivement à la partie imaginaire et à la partie réelle de la fonction diélectrique obtenue par la DMC, les courbes verte et orange correspondent au fit avec un modèle de Lorentz.

2.6 Modèle nodal pour le calcul du rendement de conversion solaire/thermique de l'absorbeur

2.6.1 Schématisation de la centrale solaire thermodynamique à tour

Afin de mettre en évidence l'influence du dopage chimique au sein des absorbeurs en carbure de silicium sur le rendement total des centrales solaires thermodynamiques à tour, nous allons décomposer ces dernières en trois blocs simplifiés comme le montre la [figure 2-14](#). Le premier bloc est celui représentant la conversion solaire/thermique de l'absorbeur en carbure de silicium dont le rendement η_{abs} varie au cours d'une journée selon l'intensité de l'éclairement solaire $E_S [W.m^{-2}]$, la concentration solaire C des héliostats et les pertes convectives et radiatives. Un modèle nodal associé à celui-ci sera développé et mis en place dans le paragraphe suivant. Le deuxième bloc est celui de la conversion de l'énergie thermique en énergie mécanique par le biais d'un cycle thermodynamique. Par souci de simplicité, nous choisissons de prendre le rendement thermodynamique comme étant égal à celui d'un cycle idéal de Carnot fonctionnant entre la source chaude à la température de sortie T_{out} de l'air en sortie de l'absorbeur, et la source froide à la température de l'air ambiant T_{amb} . Enfin, le troisième bloc est celui de l'alternateur assurant la conversion de l'énergie mécanique en énergie électrique dont le rendement sera fixe et aura pour valeur $\eta_A = 95\%$.

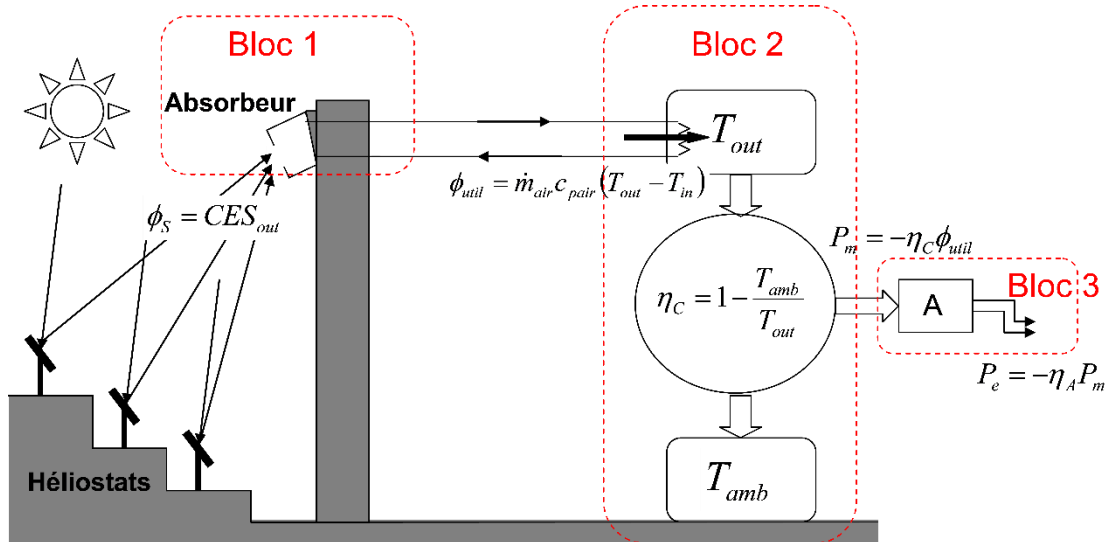


Figure 2-14 : Schématisation de la centrale solaire thermodynamique à tour.

Le rendement total de l'installation s'écrit comme le rapport entre la puissance électrique produite P_e et le flux solaire incident concentré $\phi_S = CE_S S_{out}$ sur la surface extérieure S_{out} de l'absorbeur tel que :

$$\eta_{inst} = \frac{P_e}{\phi_S} \quad 2.90$$

Sachant que le rendement de conversion de l'absorbeur s'écrit $\eta_{abs} = \phi_{util}/\phi_S$, celui du cycle thermodynamique de Carnot $\eta_C = -P_m/\phi_{util} = 1 - T_{amb}/T_{out}$ et le

rendement de l'alternateur $\eta_A = P_e/P_m$, nous pouvons calculer le rendement de l'installation comme étant le produit des trois rendements :

$$\eta_{inst} = \left(\frac{\phi_{util}}{\phi_S} \right) \left(-\frac{P_m}{\phi_{util}} \right) \left(-\frac{P_e}{P_m} \right) = \frac{P_e}{\phi_S} \quad 2.91$$

Précisons que ϕ_{util} est le flux utile récupéré par de l'air servant de fluide caloporteur en sortie de l'absorbeur et P_m est la puissance mécanique générée par la turbine.

L'objectif de cette partie sera donc de calculer le rendement de conversion solaire/thermique de l'absorbeur et de celui du cycle de Carnot qui en découle afin de prédire l'influence du dopage chimique sur la production finale d'électricité par la relation :

$$P_e = \eta_{inst} \phi_S \quad 2.92$$

Nous allons précisément développer dans le paragraphe suivant le modèle nodal associé à l'absorbeur afin de prédire le flux utile récupérable sur les deux types d'absorbeurs possibles : surfacique et volumique.

2.6.2 Mise en place du modèle nodal sur l'absorbeur

La modélisation du rendement de l'absorbeur est une tâche compliquée car elle nécessite de tenir compte du couplage des différents modes de transferts thermiques et autres phénomènes physiques. Nous proposons ici d'établir un modèle nodal simple (appelé encore modèle capacitif) en posant des hypothèses de base :

- La température de l'absorbeur T_{abs} sera supposée uniforme sur tout son volume afin de pouvoir associer un seul nœud de température à celui-ci et une capacité thermique C_{abs} . Ce choix peut être validé par le fait que la conductivité thermique du carbure de silicium est relativement élevée.
- L'absorbeur se présentera sous la forme d'un cylindre creux d'épaisseur e_{SiC} . Dans le cas de l'absorbeur volumique, on considérera que l'intérieur est constitué d'une mousse de carbure de silicium présentant une porosité définie ϕ . La capacité thermique de l'absorbeur C_{abs} sera liée à la quantité de carbure de silicium présente.
- Il n'y aura pas d'influence des pertes de charges sur la circulation de l'air au sein de l'absorbeur. Cet air entrera à une température fixe T_{in} correspondant à celle de l'air ambiant et sortira à une température T_{out} dépendant de celle de l'absorbeur.
- Le coefficient d'échange convectif sera constant sur sa surface intérieure et extérieure.

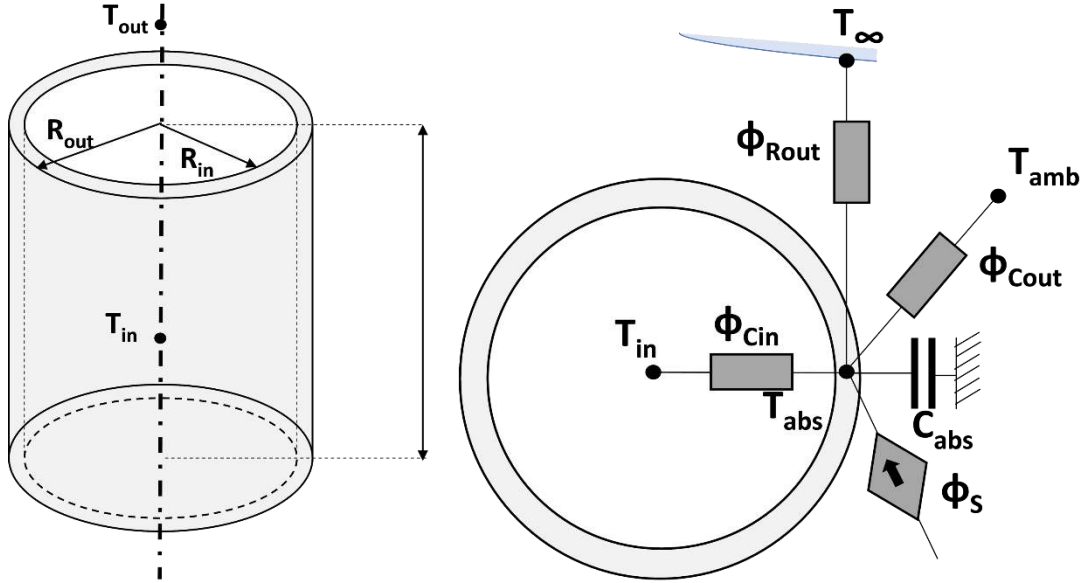


Figure 2-15 : Modèle nodal associé à un absorbeur solaire de forme cylindrique.

Le modèle nodal associé à l'étude des différents échanges thermiques sur l'absorbeur est représenté sur la [figure 2-15](#). Celui-ci intègre quatre échanges thermiques entre l'absorbeur et son environnement qui sont les suivants :

- Le flux solaire absorbé : $\phi_a = \alpha_{SiC} C S_{out} E_s$. Où α_{SiC} est l'absorptivité totale hémisphérique du carbure de silicium dans le visible. L'éclairement E_s est calculé au moyen de corrélations proposées par Jacques Bernard (Bernard 2004).
- Le flux radiatif échangé entre l'absorbeur et l'atmosphère assimilée à une surface noire de température $T_\infty = 0.00552 T_{amb}^{1,5}$ (Bernard 2004) : $\phi_{Rout} = \varepsilon_{SiC} \varepsilon_\infty S_{out} F_{out-\infty} \sigma (T_{abs}^4 - T_\infty^4)$. ε_{SiC} est l'émissivité totale hémisphérique du carbure de silicium dans l'infrarouge tandis que $F_{out-\infty} = 1$ est le facteur de forme entre l'absorbeur et l'atmosphère. En linéarisant la température, nous pouvons faire apparaître un coefficient d'échange radiatif tel que $\phi_{Rout} = h_{Rout} S_{out} (T_{abs} - T_\infty)$.
- Le flux convectif échangé entre l'absorbeur et l'air ambiant : $\phi_{Cout} = h_{Cout} S_{out} (T_{abs} - T_\infty)$. $h_{Cout} = h_{fe} + h_{ne}$ est le coefficient d'échange convectif tenant compte de la convection naturelle h_{ne} et forcée h_{fe} .
- - Le flux échangé entre la surface interne S_{in} de l'absorbeur et l'air y circulant :

$$\phi_{Cin} = h_{Cin} S_{in} (T_{abs} - T_{in})$$
 h_{Cin} est un coefficient d'échange de convection forcée qui sera calculé différemment selon que le récepteur est surfacique ou volumique.

La capacité thermique de l'ensemble de l'absorbeur est définie comme $C_{abs} = \rho_{SiC} V_{SiC} C_{pSiC}$ où :

- $C_{pSiC} = 1110 + 0.15 \times T_{abs} - 4.25 \times \exp(-0.003 \times T_{abs})$ est la capacité thermique massique à pression constante du SiC.
- $\rho_{SiC} = 3160 \times (1 + \beta_{SiC} (T_{abs} - 273,15))$ est la masse volumique du SiC avec $\beta_{SiC} = (4.22 - 8.33 \cdot 10^{-4} \times T_{abs} - 3.51 \times \exp(-0.0527 \times T_{abs})) \times 10^{-6}$.

Bien que ces corrélations aient été établies pour du SiC 6H fritté (Munro 1997), les valeurs sont sensiblement identiques pour le matériau massif et pour la structure SiC 3C. Nous pouvons les utiliser sans fausser l'influence du dopage chimique sur le rendement de conversion de l'absorbeur qu'il soit surfacique ou volumique.

En menant un bilan d'énergie sur l'absorbeur, il vient la relation :

$$C_{abs} \frac{dT_{abs}}{dt} = \phi_s - \phi - \phi_{c,out} - \phi_{c,in} \quad 2.93$$

La résolution de cette équation différentielle du premier ordre peut être assurée par le biais d'un schéma d'Euler ou de Runge Kutta afin de faire ressortir l'évolution de la température de l'absorbeur au cours du temps. La température du fluide caloporteur circulant dans l'absorbeur, en l'occurrence de l'air, se détermine à partir du flux utile récupérable tel que :

$$\phi_{util} = \dot{m}_{air} c_{p,air} (T_{out} - T_{in}) = \phi_{in} \quad 2.94$$

$$T_{out} = \frac{\phi_{cin}}{\dot{m}_{air} c_{p,air}} + T_{in} \quad 2.95$$

Le débit massique de l'air $\dot{m}_{air}$ est un paramètre de simulation qui s'ajuste afin que la température de sortie de l'air soit la plus proche de celle de l'absorbeur.

2.6.3 Paramètres géométrique et corrélations de convection

Les simulations seront réalisées au chapitre 3 sur des absorbeurs surfaciques et volumiques. Il est donc nécessaire de définir dans un premier temps les paramètres géométriques pertinents. La surface extérieure de l'absorbeur sera identique pour les deux cas et correspondra à une surface cylindrique de rayon extérieur R_{out} .

Dans le cas de l'absorbeur surfacique, le rayon intérieur du cylindre creux aura pour valeur $R_{in} = R_{out} - e_{SiC}$. Le volume de carbure de silicium associé sera de $V_{SiC} = \pi(R_{out}^2 - R_{in}^2)H$ tandis que le volume occupé par l'air sera de $V_{air} = \pi R_{in}^2 H$, H représentant la hauteur du cylindre.

En ce qui concerne l'absorbeur volumique, l'intérieur d'un cylindre creux (identique à celui de l'absorbeur surfacique) sera occupé par une mousse de carbure de silicium de porosité Φ et présentant une densité linéique de cellules PPI . Le volume de carbure de silicium nécessaire à l'établissement de la capacité thermique sera modifié à la valeur $V_{SiC} = \pi(R_{out}^2 - R_{in}^2 \Phi)H$ tandis que le volume occupé par l'air sera de $V_{SiC} = \pi R_{in}^2 \Phi H$.

Les propriétés physiques de l'air (capacité thermique massique, conductivité thermique, viscosité dynamique et masse volumique) nécessaires pour appliquer les corrélations de convection forcée et naturelle sont celles proposées par Wu et ses collaborateurs (Wu et al. 2010) :

$$c_{p,air} = 1043 - 0.366 \times T_m + 9.776 \times T_m^2 - 6.595 \cdot 10^{-7} \times T_m^3 + 1.467 \cdot 10^{-10} \times T_m^4 \quad 2.96$$

$$\lambda_{air} = 0.5399 \cdot 10^{-2} + 7.617 \cdot 10^{-5} \times T_m - 1.389 \cdot 10^{-8} \times T_m^2 \quad 2.97$$

$$\mu_{air} = 2.3543 \cdot 10^{-6} + 6.2657 \cdot 10^{-8} \times T_m - 3.2398 \cdot 10^{-11} \times T_m^2 + 8.8848 \times 10^{-15} \times T_m^3 \quad 2.98$$

$$\rho_{air} = 360.45 \times T_m^{-1.0033} \quad 2.99$$

Où T_m représente la température moyenne du film d'air en contact de la paroi solide de SiC.

2.6.3.1 Convection naturelle extérieure

Le calcul du coefficient d'échange extérieur par convection naturelle s'appuiera sur les relations de Mc Adams (Mc ADAMS 1961) :

- Si $10^4 \leq G_r P_r \leq 10^9$ alors $N_u = 0.59 \times (G_r P_r)^{0.25}$.
- Si $G_r P_r \geq 10^9$ alors $N_u = 0.13 \times (G_r P_r)^{0.33}$

Où le nombre de Prandtl est donné par la relation $P_r = \mu_{air} c_{pair} / \lambda_{air}$, le nombre de Grashoff par $G_r = \rho_{air}^2 g \beta \Delta \theta H^3 / \mu_{air}^2$. $\beta = 1/T_m$ est le coefficient de dilatation volumique à pression constante faisant intervenir la température moyenne $T_m = 0,5 \times (T_{abs} + T_{amb})$. Par ailleurs, nous posons $\Delta \theta = T_{abs} - T_{amb}$ et $g = 9.81 \text{ m.s}^{-1}$.

2.6.3.2 Convection forcée extérieure

Pour le calcul du coefficient d'échange par convection forcée, les relations retenues sont celles de Martinelli:

- Si $Re \leq 40000$ alors $N_u = 0,174 \times Re^{0,628}$
- Si $Re > 40000$ alors $N_u = 0,0239 \times Re^{0,805}$

Le nombre de Reynolds $Re = \rho_{air} v_{air} \times (2R_{out}) / \mu_{air}$ nécessite que l'on impose une vitesse v_{out} de l'air.

2.6.3.3 Convection forcée à l'intérieure de l'absorbeur surfacique

Que cela soit le cas de l'absorbeur surfacique ou volumique, la vitesse de circulation de l'air à l'intérieur de celui-ci découlera du débit massique $\dot{m}_{air}$ que nous imposerons par la relation $v_{air} = \dot{m}_{air} / (\rho_{air} \pi R_{in}^2)$. Le nombre de Reynolds sera $Re = \rho_{air} v_{air} \times (2R_{in}) / \mu_{air}$ et la surface d'échange intérieure $S_{in} = 2\pi R_{in} H$.

Les corrélations retenues pour le calcul du coefficient d'échange de convection interne sont celles de Colburn et al. (Colburn 1933). En posant $L = H / (2R_{in})$, il vient :

- Si $L \geq 60$ alors $Nu = 0.023 \times Re^{0.8} \times P_r^{\frac{1}{3}}$
- Si $20 \leq L < 60$ alors $Nu = 0.021 \times Re^{0.8} \times P_r^{0.6} \times \left(1 + \frac{6}{L}\right)$
- Si $2 \leq L < 20$ alors $Nu = 0.021 \times Re^{0.8} \times P_r^{0.6} \times \left(1 + \left(\frac{6}{L}\right)^{0.7}\right)$

2.6.3.4 Convection forcée intérieure de l'absorbeur volumique

Dans le cas des mousses, nous avons choisi de retenir la corrélation établie par Huu et al. Cette dernière fait intervenir de nouveaux paramètres que sont le diamètre des cellules $d_c = 0.0254/PPI$ et le diamètre des pores d_p :

$$N_u = 0.187 \times Re^{1.1} \quad 2.100$$

Le calcul du diamètre des pores et de la surface intérieure d'échange dépend de la porosité Φ de la mousse tel que :

- Si $\Phi > 0.9$ alors $d_p = d_c / (4.4 - 2.5\Phi)$ et $S_{in} = (13.503 - 13.503\Phi) / d_p$
- Si $\Phi < 0.9$ alors $d_p = d_c / \left(3.65 - \frac{5}{3\Phi}\right)$ et $S_{in} = (4.017 - 2.963\Phi) / d_p$

Le nombre de Reynolds se calcule à partir de la vitesse de circulation de l'air, de la porosité et du diamètre des pores tel que :

$$Re = \frac{\rho_{air} v_{air} d_p}{\mu_{air} \Phi} \quad 2.101$$

Avec $v_{air} = \dot{m}_{air} / (\rho_{air} \pi R_{in}^2)$. Enfin le coefficient d'échange convectif volumique est donné par la relation :

$$h_{vi} = \frac{\lambda_{air} N_u}{d_p^2}$$

Partie 3 : Résultats

3.1	CHOIX DES POTENTIELS INTERATOMIQUES.....	76
3.1.1	Description des potentiels interatomiques	76
3.1.1.1	Potentiel de Tersoff	76
3.1.1.2	Potentiel MEAM.....	78
3.1.1.3	Potentiel de Vashishta	81
3.1.1.4	Potentiel de Lennard-Jones	83
3.1.2	Études préliminaires	84
3.1.2.1	Minimisation de l'énergie et paramètre de maille	86
3.1.2.2	Conservation de l'énergie et stabilité du système	87
3.1.2.3	Fonction de distribution radiale	88
3.1.2.4	Dispersion des phonons.....	89
3.1.2.5	Densité d'état phononique et température de correction.....	91
3.1.2.6	Bilan des études préliminaires.....	94
3.1.3	Optimisation du potentiel de Vashishta	95
3.1.3.1	Modulation du paramètre de maille.....	95
3.1.3.2	Interaction coulombienne longue distance	96
3.1.4	Conclusion.....	98
3.2	PROPRIETES THERMO-RADIATIVES DU SiC 3C	100
3.2.1	Protocol de simulation.....	100
3.2.1.1	Temps d'équilibrage du système	100
3.2.1.2	Temps d'acquisition des mesures.....	101
3.2.1.3	Dimension de la boîte	103
3.2.1.4	Conclusion.....	104
3.2.2	Fonction diélectrique IR en fonction de la température	105
3.2.3	Fonction diélectrique en fonction du dopage et de la température	107
3.2.3.1	Etude de convergence	108
3.2.3.2	Fonction diélectrique en fonction du dopage à 300 K.....	109
3.2.3.3	Paramètre de Lorentz en fonction du dopage et de la température	111
3.2.4	Absorptivité et émissivité du 3C-SiC.....	112
3.2.4.1	Spectre de réflectance et d'absorptance.....	112
3.2.4.2	Emissivité et absorptivité hémisphérique	113
3.3	PROPRIETES THERMO-RADIATIVE DU SiC 6H	114
3.3.1	Etudes préliminaires	114
3.3.1.1	Structure cristallographique et paramètres de maille.....	114
3.3.1.2	Dispersion des phonons et convergence des résultats	115
3.3.1.3	Conservation de l'énergie et dispersion des phonons.....	115
3.3.1.4	Optimisation de la structure	116
3.3.1.5	Densité d'état phononique et température de correction.....	116
3.3.2	Fonction diélectrique en fonction du dopage et de la température	117
3.3.2.1	Étude de convergence	117

3.3.2.2	Fonction diélectrique en fonction de la température	119
3.3.2.3	Paramètre de Lorentz en fonction du dopage à 300K.....	119
3.3.2.4	Paramètre de Lorentz en fonction du dopage et de la température	120
3.3.3	Absorptivité et émissivité du 6H-SiC.....	121
3.4	ÉTUDE DU TiC-SiC.....	123
3.4.1	Études préliminaires	123
3.4.1.1	Conservation de l'énergie et stabilité du système	124
3.4.1.2	Analyse structurale	124
3.4.2	Effet du ratio V_{TiC}/V_{SiC}	127
3.4.2.1	DOS et correction de la température	128
3.4.2.2	Fonction diélectrique évaluée à 1500K	129
3.4.2.3	Propriétés radiatives.....	132
3.4.2.4	Conclusion.....	133
3.4.3	Étude préliminaire, dispersion de nanoparticule de TiC dans la matrice de SiC	134
3.4.3.1	DOS et correction de la température	135
3.4.3.2	Fonction diélectrique évaluée à 1500K	135
3.4.3.3	Propriétés radiatives.....	136
3.4.3.4	Conclusion.....	137
3.4.4	Effet de la distance, et de l'orientation de deux nanoparticules de TiC.....	138
3.4.4.1	Choix du protocole de simulation.....	139
3.4.4.2	Fonction diélectrique évaluée à 1500K	141
3.4.5	Répartition aléatoire des nanoparticules de TiC	142
3.4.5.1	Fonction diélectrique fonction de la température.	142
3.4.5.2	Propriétés thermo-radiatives.....	143
3.4.5.3	Conclusion.....	144
3.5	PERFORMANCE DE LA CENTRALE SOLAIRE	145
3.5.1	Mise en place des corrélations décrivant les paramètres thermo-radiatifs du SiC.....	145
3.5.2	Simulation de la montée en température de l'absorbeur surfacique	147
3.5.2.1	Cas du SiC 3C.....	147
3.5.2.2	Comparaison SiC 3C et 6H.....	150
3.5.3	Simulation de la montée en température de l'absorbeur volumique.....	151
3.5.3.1	Cas du SiC 3C.....	151
3.5.3.2	Comparaison SiC 3C et 6H.....	153
3.5.4	Comparaison Absorbeur surfacique et volumique.....	154

3.1 Choix des potentiels interatomiques

Dans cette section, nous présenterons les différents potentiels interatomiques étudiés durant nos travaux. Les études préliminaires nous permettront de choisir les potentiels interatomiques à utiliser pour évaluer les propriétés thermo-radiatives de différents polytypes du SiC. Dans un premier temps, nous donnerons une description détaillée des possibles potentiels interatomiques et fournirons les paramétrisations choisies et optimisées. Par la suite, nous présenterons les résultats des études préliminaires obtenus pour chaque cas. Enfin, nous montrerons comment remonter aux propriétés thermo-radiatives du SiC.

3.1.1 Description des potentiels interatomiques

3.1.1.1 Potentiel de Tersoff

Le potentiel de Tersoff est un potentiel à N-corps, qui permet de bien rendre compte des liaisons covalentes et tétraédriques de type : Si-Si, Si-C, Si-H_x, etc. Le terme du N-corps est introduit par un terme angulaire moyen privilégié. En associant ce terme angulaire avec un potentiel de pair très cohésif, il est possible de bien reproduire l'ordre à courte portée et de bien évaluer l'énergie cohésive de divers polytypes. Le potentiel de Tersoff est massivement utilisé pour décrire les polytypes de SiC (Devanathan, Diaz de la Rubia, et Weber 1998; Devanathan, Weber, et Gao 2001; Porter et al. 1997; Tang et Yip 1995; Yan, Hu, et Jónsson 1994).

L'expression générale du potentiel de Tersoff peut s'écrire sous la forme :

$$E = \sum_i E_i = \frac{1}{2} \sum_{j \neq i} V(r_{ij}) \quad 3.1$$

Où E_i est l'énergie potentielle totale d'un atome se trouvant au i . $V(r_{ij})$ est lui donné par la relation 3.2, ci-dessous :

$$V(r_{ij}) = f_c(r_{ij})[V_R(r_{ij}) + b_{ij}V_A(r_{ij})] \quad 3.2$$

Avec f_c la fonction de coupure variant de manière continue entre 0 à 1 autour de la position $(S_{ij} + R_{ij})/2$ dans la sphère des premiers voisins. La fonction de coupure est définie par :

$$f_c(r_{ij}) = \begin{cases} 1, & r_{ij} < R_{ij} \\ \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \cos((r_{ij} - R_{ij})/(S_{ij} - R_{ij})), & R_{ij} < r_{ij} < S_{ij} \\ 0, & r_{ij} > S_{ij} \end{cases} \quad 3.3$$

Où i et j représentent l'atome de type 1 ou l'atome de type 2, r_{ij} est la distance entre ces deux atomes, et $S_{ij} = \sqrt{S_i S_j}$ et $R_{ij} = \sqrt{R_i R_j}$ sont respectivement les positions intérieures et extérieures. S_{ij} et R_{ij} définissent la distance de coupure autour de $\frac{(S_{ij} - R_{ij})}{2}$ pour les atomes situés dans la sphère des premiers voisins.

Le premier et deuxième terme entre crochets de la relation 3.2 sont respectivement les parties répulsive et attractive. Ces derniers sont exprimés sous une forme similaire à celui du potentiel de Morse, qui est approprié pour les systèmes multi-corps :

$$V_R(r_{ij}) = A_{ij} \exp[-\lambda_{ij}(r_{ij})] \quad 3.4$$

$$V_A(r_{ij}) = -B_{ij} \exp[-\mu_{ij}(r_{ij})] \quad 3.5$$

Le coefficient b_{ij} permet de mesurer l'ordre de liaison décrivant la coordination des atomes i et j . Il est défini par la relation 3.6, ci-dessous :

$$b_{ij} = \chi_{ij} \left(1 + \beta_i^{n_i} \xi_{ij}^{n_i}\right)^{-1/(2n_i)} \quad 3.6$$

Avec,

$$\xi_{ij} = \sum_{k \neq i, j} f_c(r_{ik}) g(\theta_{ijk}) \exp[v_{ij}^m (r_{ij} - r_{ik})^m] \quad 3.7$$

Le terme $g(\theta_{ijk})$ est celui qui contient les informations sur les interactions à trois corps, il est exprimé par la relation 3.8, ci-dessous

$$g(\theta_{ijk}) = \gamma_{ik} \left[1 + \frac{c_{ik}^2}{d_{ik}^2} - \frac{c_{ik}^2}{d_{ik}^2 + (h_{ik} - \cos(\theta_{ijk}))^2} \right] \quad 3.8$$

θ_{ijk} est l'angle de liaison entre la liaison ij et tout atome à k ($\neq i, j$) lié à l'atome i formant la liaison ik , et les constantes γ_{ik} , c_{ik} , d_{ik} , et h_{ik} sont des paramètres de fit.

Le tableau 3-1 recense les paramétrisations du potentiel de Tersoff utilisés dans nos travaux. Les paramètres utilisés pour décrire les liaisons Si-Si, C-C et Si-C sont issus des travaux de Tersoff (1989), ceux utilisés pour les interactions Si-N et N-N proviennent des travaux de Brito et ses collaborateurs (de Brito Mota, Justo, et Fazzio 1998). Pour la description des liaisons C-N et Si-N, nous avons utilisés la loi de mélange du potentiel de Tersoff :

$$\begin{aligned} A_{ij} &= \sqrt{A_i A_j} & B_{ij} &= \sqrt{B_i B_j} & R_{ij} &= \sqrt{R_i R_j} \\ D_{ij} &= \sqrt{D_i D_j} & \lambda_{ij} &= \frac{\lambda_i + \lambda_j}{2} & \mu_{ij} &= \frac{\mu_i + \mu_j}{2} \end{aligned} \quad 3.9$$

La paramétrisation du potentiel de Tersoff pour les liaisons N-N, Si-N et C-N servira pour l'étude du SiC dopé N, correspondant à un dopage de type n , où les porteurs de charge libre seront des électrons. Cette paramétrisation du potentiel de Tersoff pour l'étude des interactions Si-C-N, a été utilisé par Matsungana et ses collaborateurs pour étudier les systèmes amorphes du Si-C-N (Matsunaga et al. 1999).

Tableau 3-1 : Paramétrisation du potentiel de Tersoff. Les cellules grises indiquent que les paramètres dépendent du type de liaison ternaire observée (A-A-B) paramètres de A, (B-B-A) paramètres de B, pour les autres liaisons les paramètres valent zéro.

Paramètres	Si-Si	C-C	Si-C	N-N	Si-N	C-N
A [eV]	1830.80	1393.60	1597.31	6368.14	3414.50	2979.03
B [eV]	471.18	346.74	395.15	511.76	491.05	421.22
λ [$\text{\AA}^{-1}$]	2.4799	3.4879	2.9839	5.43673	3.958	4.462
μ [$\text{\AA}^{-1}$]	1.7322	2.2119	2.9839	2.7	2.216	2.456
χ	1.0	1.0	0.9976	1.0	1.0	0.65
β	1.10E-06	1.57E-07		5.298E-3		
u [$\text{\AA}^{-1}$]	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
m	3.0	3.0	3.0	3.0	3.0	3.0
n	0.78734	0.72751		1.33041		
c	100390	38049		20312		
d	16.217	4.348		25.5103		
$\cos(\theta)$	-0.59825	-0.57058		-0.56239		
R [$\text{\AA}$]	2.700	1.800	2.204	1.800	2.205	1.800
S [$\text{\AA}$]	3.000	2.100	2.510	2.100	2.510	2.100
γ	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0

3.1.1.2 Potentiel MEAM

Le potentiel « Modified Embedded Atom Method (MEAM) » a été développé par Baskes (1992). Ce potentiel correspond à une version modifiée du potentiel « Embedded Atom Method (EAM) » communément utilisé pour les métaux. Les paramètres du MEAM sont obtenus en utilisant une méthode similaire à celle de la théorie fonctionnelle de la densité d'états (DFT).

Le potentiel MEAM a été utilisé pour déterminer les énergies de formation des défauts dans le 3C-SiC (Huang et al. 1995) et énergies de formation des polytypes 4H- et 6H-SiC à partir du 3C-SiC (Kang et al. 2014), pour estimer les propriétés thermomécaniques du 3C-SiC (Szpunar et al. 2018) ou encore pour évaluer la dépendance en température de la conductivité thermique du SiC (Wang et al. 2021).

L'énergie totale de configuration d'un cristal, dans le cadre du potentiel MEAM, est définie comme la somme des contributions directes de tous les atomes :

$$E = \sum_i \left\{ F_i(\bar{\rho}_i) + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \phi_{ij} r_{ij} \right\} \quad 3.10$$

La première partie de la relation 3.10 correspond à une énergie d'encastrement d'un atome qui dépend de son environnement. La seconde partie correspond au potentiel d'interaction de pair. L'énergie d'incorporation $F_i(\bar{\rho}_i)$ est définie comme suit:

$$F_i(\bar{\rho}_i) = A_i E_i^0 \bar{\rho}_i \ln \bar{\rho}_i \quad 3.11$$

Où $\bar{\rho}_i$ est la densité électronique au tour de l'atome i , E_i^0 l'énergie de sublimation de l'atome i dans la structure de référence (généralement la structure diamant), et A_i un paramètre de fit. La densité électronique est donnée par la relation, ci-dessous :

$$\bar{\rho}_i = \frac{\bar{\rho}_i^{(0)}}{\rho_i^0} \exp \left(-\frac{1}{2} \sum_{k=1}^3 \left(\frac{\bar{\rho}_i^{(k)} t_i^{(k)}}{\bar{\rho}_i^{(0)}} \right)^2 \right) \quad 3.12$$

Où $\bar{\rho}_i^{(k)}$ est la densité électronique partielle, $t_i^{(k)}$ le facteur de pondération moyen de la densité électronique, et ρ_i^0 l'échelonnement de la densité électronique en fonction de la composition, dont l'équation est définie par la relation 3.13, ci-dessous :

$$\rho_i^0 = \rho_{i,0} Z_{i,0} \exp \left(-\frac{1}{2} \sum_{k=i}^3 \frac{s^{(k)} t_i^{(k)}}{Z_{i,0}^2} \right) \quad 3.13$$

Où $Z_{i,0}$ est la coordination des premiers voisins de la structure de référence, $s^{(k)}$ le facteur géométrique, et $\rho_{i,0}$ est un paramètre de fit. Le facteur de pondération moyen de la densité électronique est donné par la relation 3.14, ci-dessous :

$$t_i^{(k)} = \frac{\sum_{j \neq i} t_{0,j}^{(k)} \rho_j^{(0)} S_{ji}}{\sum_{j \neq i} \rho_j^{(0)} S_{ji}} \quad 3.14$$

Où S_{ji} est la fonction de filtrage et $t_{0,j}^k$ un paramètre de fit. La densité électronique partielle est donnée par les relations 3.15 à 3.18 , ci-dessous :

$$\bar{\rho}_i^{(0)} = \sum_{j \neq i} \rho_j^{(0)} S_{ji} \quad 3.15$$

$$\left(\bar{\rho}_i^{(1)} \right)^2 = \sum_{\alpha=1}^3 \left[\sum_{j \neq i} x_{ij}^{\alpha} \rho_j^{(1)} S_{ji} \right]^2 \quad 3.16$$

$$\left(\bar{\rho}_i^{(2)} \right)^2 = \sum_{\alpha,p=1}^3 \left[\sum_{j \neq i} x_{ij}^{\alpha} x_{ij}^p \rho_j^{(2)} S_{ji} \right]^2 - \frac{1}{3} \left[\sum_{j \neq i} \rho_j^{(2)} S_{ji} \right]^2 \quad 3.17$$

$$\left(\bar{\rho}_i^{(2)} \right)^2 = \sum_{\alpha,p,q=1}^3 \left[\sum_{j \neq i} x_{ij}^{\alpha} x_{ij}^p x_{ij}^q \rho_j^{(3)} S_{ji} \right]^2 \quad 3.18$$

Où α , p et q valent respectivement 1, 2 et 3. Les densités atomiques et électroniques sont définies par la relation 3.19, ci-dessous :

$$\rho_i^{(k)} = \rho_{i,0} \exp \left[-\beta_i^{(k)} \left(\frac{R}{R_i^0} - 1 \right) \right] \text{ avec } k = 0, 1, 2, 3 \quad 3.19$$

Où R_i^0 est la distance des premiers voisins dans la structure de référence, et $\beta_i^{(k)}$ un paramètre de fit. La normalisation des coordonnées x_{ij}^m est donnée par la relation 3.20, ci-dessous :

$$x_{ij}^1 = \frac{x_j - x_i}{r_{ij}}; \quad x_{ij}^2 = \frac{y_j - y_i}{r_{ij}}; \quad x_{ij}^3 = \frac{z_j - z_i}{r_{ij}} \quad 3.20$$

Où r_{ij} est la distance entre l'atome i et l'atome j . La fonction de filtrage est définie par $S_{ij} = \prod_{k \neq i,j} S_{jki}$ et par la relation 3.21, ci-dessous :

$$S_{jki} = \begin{cases} 0 \\ \left(1 - \left(\frac{C_{max} - C}{C_{max} - C_{min}}\right)^4\right)^2 & \text{pour } \begin{cases} C \leq C_{min} \\ C_{min} \leq C \leq C_{max} \\ C \geq C_{max} \end{cases} \\ 1 \end{cases} \quad 3.21$$

Où C_{max} et C_{min} sont des paramètres de fit, et C est défini en fonction des distances interatomiques par la relation 3.22, ci-dessous :

$$C = 1 + 2 \frac{r_{jk}^2 r_{ji}^2 + r_{ki}^2 r_{ji}^2 - r_{ji}^4}{r_{ji}^4 - (r_{ji}^2 - r_{ki}^2)^2} \quad 3.22$$

. Le facteur de pondération moyen de la densité électronique permet de prendre en compte les effets des électrons des divers atomes se trouvant dans les systèmes à plusieurs corps. La fonction de filtrage a été introduite pour tenir en compte des contributions relatives des atomes localisés dans différentes positions du système, elle peut aussi être considérée comme une fonction de coupure.

Le potentiel d'interaction de pair, correspondant au deuxième terme de la relation 3.10, dérive de l'équation d'état universelle définie par les relations 3.23 et 3.24 données ci-dessous :

$$E_i^u(R) = -E_i^0 \left[1 + \alpha_i \left(\frac{R}{R_i^0} - 1 \right) \exp \left[-\alpha_i \left(\frac{R}{R_i^0} - 1 \right) \right] \right] \quad 3.23$$

$$E_i(R) = \frac{1}{2} \{ F_i(\bar{\rho}_j) F_j(\bar{\rho}_i) Z_{ij0} \Phi_{ij}(R) \} \quad 3.24$$

Où E^0 est l'énergie de cohésion, R^0 la distance d'équilibre des premiers voisins, α et Φ_{ij} sont respectivement définis par les suivantes :

$$\alpha = \sqrt{\frac{9B\Omega}{E^0}} \quad 3.25$$

$$\Phi_{ij}(R) = \frac{1}{Z_{ij0}} \{ 2E_i^u(R) - F_i(\bar{\rho}_j) - F_j(\bar{\rho}_i) \} S_{ji} \quad 3.26$$

Où B est le module d'élasticité isostatique et Ω le volume atomique d'équilibre de la structure de référence.

Le tableau 3-2 recense la paramétrisation du potentiel MEAM pour la description des liaisons Si-Si, C-C et Si-C déterminée par Kang et al. (2014), la paramétrisation pour la description des liaisons Ti-Ti, C-C et Ti-C déterminés par Kim et Lee (2008).

Tableau 3-2 : Paramétrisation du potentiel MEAM. L'énergie de cohésion E^0 , la distance d'équilibre des premiers voisins R^0 et le module d'élasticité isostatique B sont respectivement exprimés en eV, Å et dyne.cm⁻².

Système monoatomique				Système binaire (A-B)		
Paramètres	Si-Si	C-C	Ti-Ti	Paramètres	Si-C	Ti-C
E^0	-4.63	-7.37	-4.87	structure	type ZnS	type NaCl
R^0	2.35	1.54	2.92	E^0	-6.38	-6.90
B	0.99	4.45	1.10	R^0	1.89	2.10
A	0.58	1.18	0.66	B	2.30	2.42
ρ_0	1.88	6.00	1.00	d	0.00	0.00
$\beta^{(0)}$	3.55	4.25	2.70	$C_{\min}$ (A-B-A)	2.00	0.64
$\beta^{(1)}$	2.50	2.80	1.00	$C_{\min}$ (B-A-B)	0.64	0.64
$\beta^{(2)}$	0.00	2.00	3.00	$C_{\min}$ (A-A-B)	1.41	1.20
$\beta^{(3)}$	7.50	5.00	1.00	$C_{\min}$ (B-B-A)	1.41	1.20
$t_0^{(1)}$	1.80	3.20	6.80	$C_{\max}$ (A-B-A)	2.80	1.44
$t_0^{(2)}$	5.25	1.44	-2.00	$C_{\max}$ (B-A-B)	1.00	2.80
$t_0^{(3)}$	-2.61	-0.98	-12.00	$C_{\max}$ (A-A-B)	2.80	2.80
$C_{\min}$	1.41	1.41	1.00	$C_{\max}$ (B-B-A)	2.80	2.80
$C_{\max}$	2.80	2.80	1.44	ρ_0^A/ρ_0^B	0.31	0.17

3.1.1.3 Potentiel de Vashishta

Les liaisons chimiques complexes dans le SiC ont des caractères à la fois ionique et covalent (respectivement 12 et 88%). Les transferts de charge entre les atomes Si et C résultent d'interactions coulombiennes entre les ions. Il est donc nécessaire, pour bien décrire ces liaisons, de prendre en compte les interactions coulombiennes dans le potentiel de pair. Raison pour laquelle, Vashishta et al. ont construit un potentiel interatomique à N-corps, prenant à la fois les interactions coulombiennes dans le potentiel de pair et le caractère covalent de flexion et étirement des liaisons.

Le potentiel de Vashishta est capable de bien reproduire les propriétés du SiC soumis à des charges mécanique (Branicio et al. 2018; Li, Yao, et Zhang 2018). Il permet aussi de reproduire l'amorphisation du SiC sous l'effet de la nano-indentation (Szulafarska et al. 2004, 2005, 2007). Rino et al. (2004) ont pu évaluer l'ordre à courte et moyenne distance du SiC amorphe avec la simulation DMC en utilisant le potentiel de Vashishta. Zhao et al. (2020) ont pu évaluer l'effet de la déformation élastoplastique induit par l'amorphisation sous nano-indentation du SiC en utilisant ce potentiel interatomique. L'étude de la transformation structurale du SiC sous pression a pu être réalisé grâce au potentiel de Vashishta (Zhao et al. 2020). Domingues et al. (2018) ont d'ailleurs pu évaluer les propriétés optiques du SiC sous pression et à différentes

températures à l'aide de ce potentiel. Les diverses études réalisées à partir du potentiel de Vashishta témoignent de la capacité qu'a ce potentiel interatomique à décrire les interactions interatomiques du SiC.

Le potentiel interatomique de Vashishta est constitué d'un terme de pair et d'un terme à trois corps. L'énergie potentiel totale du système est définie comme suit :

$$V = \sum_{i < j} V_{ij}^{(2)}(r_{ij}) + \sum_{i, j < k} V_{jik}^{(3)}(r_{ij}, r_{ik}) \quad 3.27$$

Le potentiel d'interaction de pair inclut l'effet de taille stérique des ions, les effets de transfert de charge conduisant à des interactions de Coulomb, les interactions charge-dipôle dues à la polarisabilité électronique des ions, les interactions dipôle-dipôle induit et les interactions attractives de Van der Waals. Le terme à deux corps est donné par la relation 3.28, ci-dessous :

$$V_{ij}^{(2)}(r_{ij}) = \frac{H_{ij}}{r_{ij}^{\eta_{ij}}} + \frac{Z_i Z_j}{r_{ij}} e^{-r_{ij}/\lambda} - \frac{D_{ij}}{2r_{ij}^2} e^{r_{ij}/\xi} - \frac{W_{ij}}{r_{ij}^6} \quad 3.28$$

Où H_{ij} est la force de la répulsion stérique, Z_i est la charge effective (en unité de charge électronique), D_{ij} est la force d'attraction de la charge-dipôle induit, W_{ij} est la force d'interaction de van der Waals, η_{ij} est l'exposant du terme de répulsion stérique, r_{ij} est la distance entre le $i^{ième}$ atome à la position r_i et le $j^{ième}$ atome à la position r_j , λ et ξ sont respectivement les distances sur lesquelles s'exercent les interactions coulombiennes et les interactions charge- dipôle.

Les termes du potentiel à trois corps permettent de décrire les transformations structurales sous pression et le comportement du matériau sous fusion. Le potentiel à trois corps peut s'écrire comme le produit d'un terme de dépendance spatiale et d'un terme de dépendance angulaire. Le potentiel à trois est défini par la relation 3.29, ci-dessous :

$$V_{jik}^{(3)}(r_{ij}, r_{ik}) = R^{(3)}(r_{ij}, r_{ik}) P^{(3)}(\theta_{jik}) \quad 3.29$$

Avec,

$$R^{(3)}(r_{ij}, r_{ik}) = B_{jik} \exp\left(\frac{\gamma}{r_{ij} - r_0} + \frac{\gamma}{r_{ik} - r_0}\right) (r_0 - r_{ij})(r_0 - r_{ik}) \quad 3.30$$

$$V_{ij}^{(2 \text{ shifted})}(r_{ij}) = \begin{cases} V_{ij}^{(2)}(r_{ij}) - V_{ij}^{(2)}(r_c) - (r_{ij} - r_c) \left(\frac{dV_{ij}^{(2)}(r_{ij})}{dr} \right)_{r=r_c}, & r_{ij} \leq r_c \\ 0, & r_{ij} > r_c \end{cases} \quad 3.31$$

$$P^{(3)}(\theta_{jik}) = \frac{(\cos(\theta_{jik}) - \cos \bar{\theta}_{jik})^2}{1 + C_{jik} (\cos(\theta_{jik}) - \cos \bar{\theta}_{jik})^2} \quad 3.32$$

Où B_{jik} est la force d'interaction, θ_{jik} l'angle formé par r_{ij} et r_{ik} , C_{jik} et $\bar{\theta}_{jik}$ des constantes. Le tableau 3-3 recense la paramétrisation du potentiel de Vashishta pour la description des interactions interatomiques du SiC.

Tableau 3-3 : Paramétrisation du potentiel de Vashishta.

Paramètres	Si-Si	C-C	Si-C
H [eV.Å ^η]	23.67291	471.74538	447.09026
D [e ² .Å ³]	2.1636	0.0	1.0818
W [e.Å ⁶]	0.0	0.0	61.4694
η	7	7	9
Z [e]	1.201	-1.201	0.°0
λ [Å]	5.0	5.0	5.0
ξ [Å]	3.0	3.0	3.0
r _c [Å]	7.35	7.35	7.35
B [eV]	0.0	0.0	9.003
θ [°]	0.0	0.0	109.47
C	0.0	0.0	5.0
γ [Å]	0.0	0.0	1.0
r ₀ [Å]	0.0	0.0	2.9

3.1.1.4 Potentiel de Lennard-Jones

Classiquement le potentiel de Lennard-Jones décrit l'interaction de deux atomes au sein d'un gaz monoatomique rare. Il peut cependant être utilisé pour décrire l'interaction entre molécules. Dans ce cas de figure, le potentiel permet de donner une description approximative du potentiel d'interaction en fonction des distances interatomiques :

$$\Phi(r_{ij}) = 4\varepsilon_{ij} \left[\left(\frac{\sigma_{ij}}{r_{ij}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma_{ij}}{r_{ij}} \right)^6 \right] \quad 3.33$$

Où σ et ε sont les paramètres du potentiel de Lennard-Jones. Le terme à la puissance six est le terme d'attraction de Van der Waals. Celui à la puissance douze correspond au terme répulsif pour les courtes distances. Les paramètres du potentiel de Lennard-Jones ont été évalués de manière empirique pour divers atomes. Dans le cas d'interactions de pair diatomique, les paramètres du potentiel sont évalués à partir de la loi de mélange de Lorentz-Berthelot :

$$\sigma_{AB} = \frac{\sigma_{AA} + \sigma_{BB}}{2} \quad 3.34$$

$$\varepsilon_{AB} = \sqrt{\varepsilon_{AA}\varepsilon_{BB}} \quad 3.35$$

Dans le cadre notre étude, nous utiliserons le potentiel de Lennard-Jones uniquement pour avoir une première approche du TiC-SiC, dont les propriétés sont encore très peu connues. Les paramètres du potentiel de Lennard-Jones qui seront utilisés lors de nos travaux, sont répertoriés dans le tableau 3-4.

Tableau 3-4 : Paramétrisation du potentiel de Lennard-Jones (Arkundato et al. 2020)

Paramètres	Si-C	Si-Ti	C-C	C-Ti
σ [Å]	3.6285	3.8130	3.4310	3.6155
ϵ [eV]	0.0089	0.0175	0.0046	0.0090

3.1.2 Études préliminaires

Dans cette section, nous allons présenter et commenter les résultats issus des études préliminaires de DM. Ces études ont pour objectif de vérifier que les simulations sont correctement réalisées et que les résultats obtenus pour chaque potentiel interatomique sont en accord avec les résultats de la littérature. La maille conventionnelle du SiC et du TiC est représentée sur les [figures 3-1-\[a-d\]](#). Les boîtes de simulation utilisées pour le cas du SiC et du TiC sont respectivement représentées dans les [figures 3-2-\[a-b\]](#). Les images des différentes structures qui seront présentées tout le long de ce manuscrit ont été réalisées avec Ovito. Ce dernier est un programme open source développé par Stukowski, qui permet de visualiser et d'analyser les structures cristallographiques obtenues à partir de simulations DM (Stukowski 2010).

Les étapes opérationnelles sont les suivantes :

1. Vérification que la minimisation de l'énergie du système permet de bien évaluer l'énergie de cohésion ainsi que le paramètre de maille. Les valeurs obtenues sont confrontées aux valeurs issues de la littérature associée. Les simulations ont été réalisées avec un pas de temps $dt = 0.3 \text{ fs}$ pour tous les potentiels. Ce pas de temps permet d'avoir une bonne conservation de l'énergie et de bien décrire les vibrations atomistiques (Domingues et al. 2018).
2. Vérification de la bonne conservation de l'énergie totale dans l'ensemble microcanonique. L'étude de la conservation de l'énergie permet de vérifier que les systèmes sont stables.
3. Analyse de la fonction de distribution radiale (notion qui sera rappelée dans la section 3.1.2.3) obtenue pour chaque système. Cette étude permet d'avoir une idée de l'état physique du système (liquide, amorphe ou cristallin).
4. Analyse de convergence en fonction de la répétition de la maille primitive. En particulier :
 - Nous présenterons les courbes de dispersion des phonons obtenues pour chaque potentiel interatomique. Ces courbes de dispersion seront confrontées aux courbes obtenues par la méthode ab-initio et par l'expérimentation. Le potentiel interatomique qui reproduira le mieux les phonons optiques sera sélectionné pour étudier les propriétés thermo-radiatives du SiC.

- En plus de l'étude sur la dispersion des phonons, nous présenterons les résultats de la DOS obtenue pour chaque potentiel. Ces DOS permettront par la suite de déterminer la correction à apporter aux températures de simulation pour être en accord avec les températures réelles.

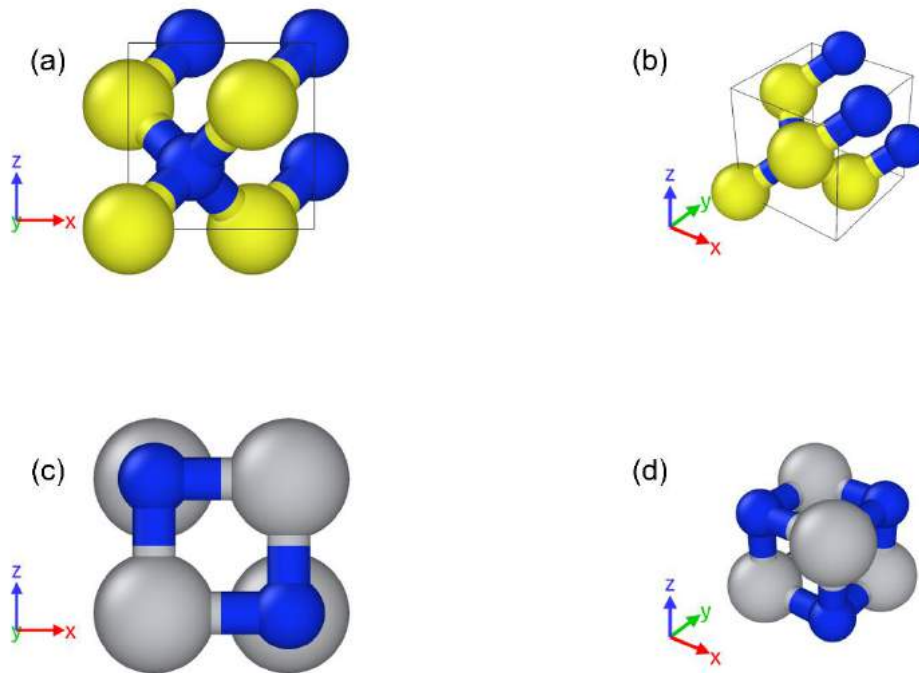


Figure 3-1 : Image plan (a) et 3D (b) de la maille conventionnelle de la structure SiC 3C de type Zinc-blende (ZnS). Image plan (c) et 3D (d) de la maille conventionnelle de la structure TiC-β de type NaCl. Les sphères bleues correspondent aux atomes de carbone, les jaunes aux atomes de silicium et les grises aux atomes de titane.

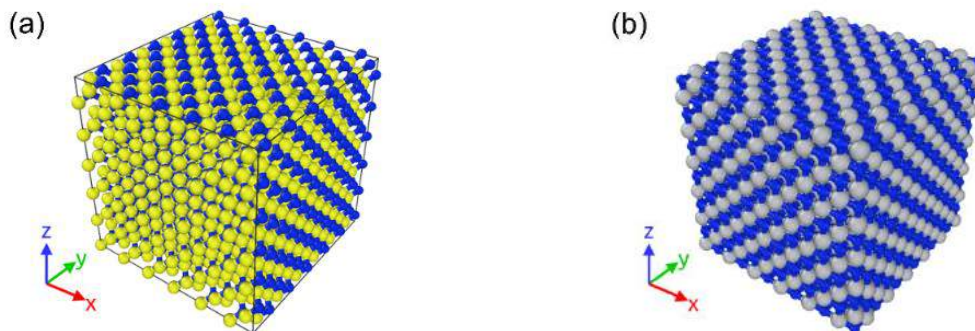


Figure 3-2 : Image 3D de la boîte de simulation de la structure SiC 3C dont la maille conventionnelle a été répétée six fois dans les trois directions de l'espace (a), même chose pour la structure TiC-β. La notation suivante : 6x6x6 indique que la maille conventionnelle a été répétée six fois dans la direction x, y et z. Cette notation sera utilisée pour définir les dimensions des échantillons étudiés.

3.1.2.1 Minimisation de l'énergie et paramètre de maille

Le tableau 3-5 recense les énergies de cohésion et les paramètres de maille recensés dans la littérature pour chaque potentiel interatomique. Les [figures 3-3-\[a-d\]](#) correspondent aux résultats issus de nos simulations. La minimisation de l'énergie du système est réalisée en utilisant la méthode des gradients conjugués (CG) développée par Polak et Ribiere (Polak et Ribiere 1969). L'énergie de cohésion d'un système correspond au minimum de la fonction d'énergie. Le paramètre de maille du système est évalué au niveau du minimum de la fonction d'énergie du système.

Tableau 3-5 : Énergie de cohésion et paramètre de maille provenant de la littérature.

Paramètres	Tersoff 89	MEAM SiC	Vashishta	Expér. SiC	MEAM TiC	Expér. TiC
$E_c [eV]$	-6.155	-6.375	-6.341	-6.340	-6.900	-6.900
$a [\text{\AA}]$	4.320	4.359	4.358	4.359	4.420	4.330

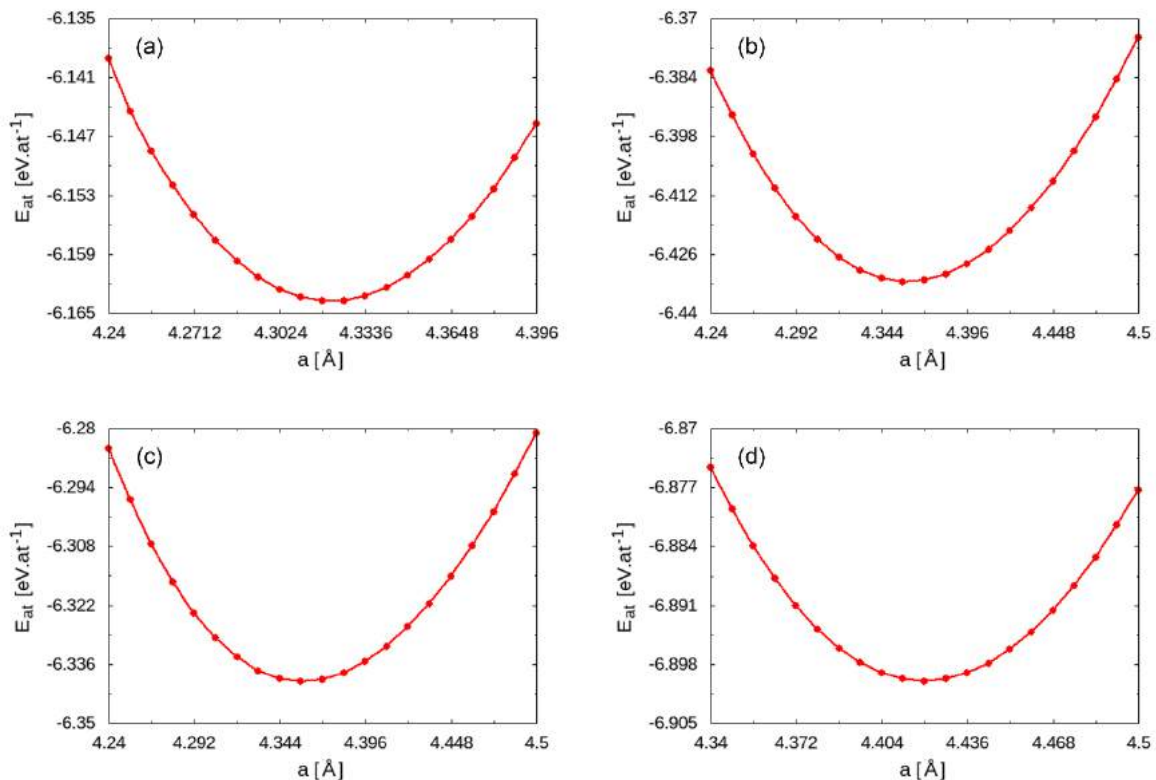


Figure 3-3 : Évolution de l'énergie atomique en fonction du paramètre de maille lors de la minimisation de l'énergie du système SiC-3C simulé avec le potentiel de Tersoff (a), avec le potentiel MEAM (b), avec le potentiel de Vashishta (c) et du système TiC- β (d) simulé avec le potentiel MEAM.

Les [figures 3-3-\[a-c\]](#) correspondent respectivement à l'étude de minimisation de l'énergie du système SiC-3C dont les interactions atomiques sont décrites par le potentiel de Tersoff, le potentiel MEAM et le potentiel de Vashishta. La [figure 3-3-d](#) correspond à l'étude de minimisation de l'énergie du système TiC- β dont les

interactions atomiques sont décrites par le potentiel MEAM. Les énergies de cohésion et les paramètres de mailles de nos simulations sont bien en accords avec les résultats de la littérature. Ce bon accord indique que les potentiels interatomiques sont bien paramétrés dans nos simulations. Cette étude montre que le potentiel de Vashishta est celui qui reproduit le mieux l'énergie de cohésion du SiC-3C, et que le potentiel MEAM est celui qui reproduit le mieux son paramètre de maille.

3.1.2.2 Conservation de l'énergie et stabilité du système

Pour cette étude, les simulations ont été réalisées dans une boîte de simulation de taille 6x6x6 en suivant le protocole défini ci-dessous avec $dt = 0.3fs$:

1. Application d'un ensemble nvt pendant 60 ps .
2. Application d'un ensemble nve pendant 90 ps .

En DM, on considère que l'énergie d'un système est conservée si la différence entre la valeur absolue de l'énergie du début $E_{t_0}^{(nve)}$ et celle de la fin $E_{t_f}^{(nve)}$ de l'ensemble nve est inférieure à $1 \times 10^{-6} eV$.

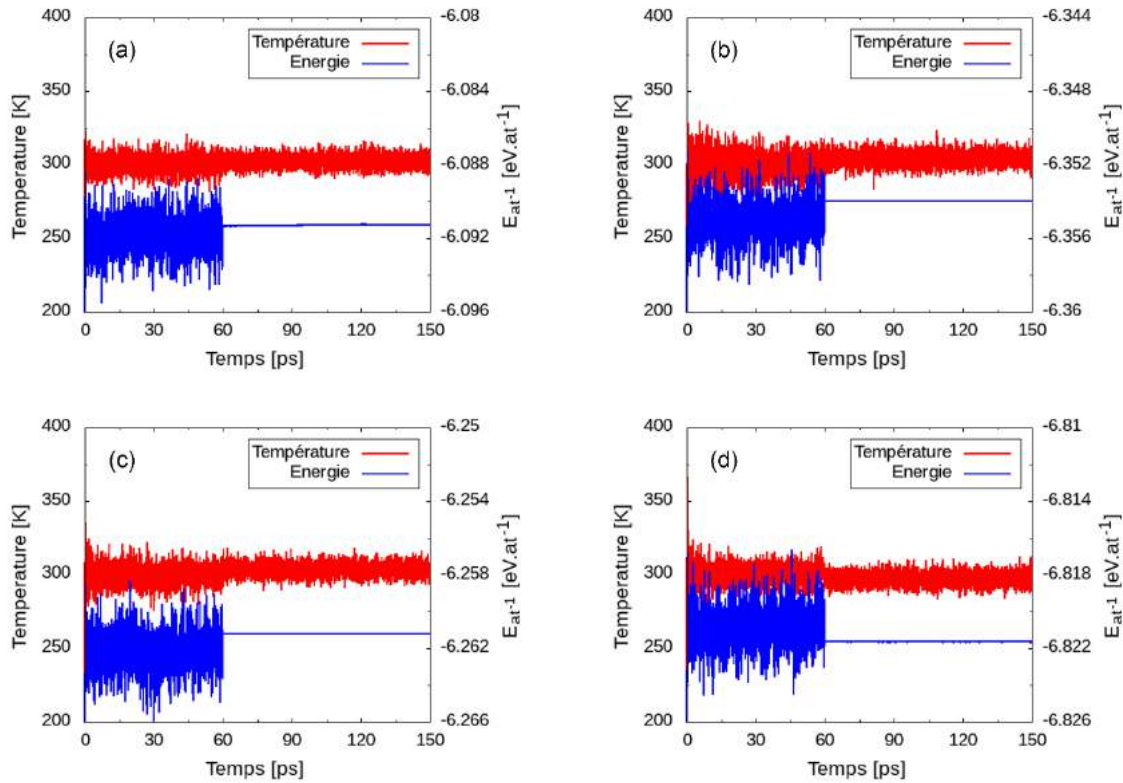


Figure 3-4 : Profil de température (rouge) et d'énergie (bleu) du système SiC 3C simulé avec le potentiel de Tersoff (a), avec le potentiel MEAM (b), avec le potentiel de Vashishta (c) et du système TiC- β (d) simulé avec le potentiel MEAM.

Le système simulé avec le potentiel de Tersoff ([figure 3-4-a](#)) présente une faible déviation de l'énergie dans l'ensemble de nve , de plus l'écart entre $E_{t_0}^{(nve)}$ et $E_{t_f}^{(nve)}$ est légèrement supérieure (tableau 3-6) à la limite autorisée pour une bonne conservation de l'énergie. De ce fait, on considère que le système SiC 3C dont les interactions atomiques sont décrites par le potentiel de Tersoff n'est pas stable pour une température de simulation de 300 K .

En revanche le système SiC 3C dont les interactions sont décrites par le potentiel MEAM (figure 3-4-b) et par le potentiel de Vashishta (figure 3-4-c) présentent une énergie bien conservée avec des écarts d'énergie entre le début et la fin de l'ensemble *nve* nettement inférieure à la limite autorisée (tableau 3-6). Il en est de même pour le système TiC- β dont les interactions atomiques sont décrites par le potentiel MEAM (figure 3-4-d). Ces résultats indiquent que le pas de temps et les potentiels interatomiques sont correctement définis pour simuler ces systèmes.

Tableau 3-6 : Écart d'énergie entre l'énergie initiale et finale de l'ensemble *nve*.

Écart d'énergie	Tersoff	MEAM	Vashishta	MEAM-TIC
$ E_{60} - E_{150} $ [eV]	8.25×10^{-5}	9×10^{-7}	2×10^{-7}	1×10^{-7}

3.1.2.3 Fonction de distribution radiale

La fonction de distribution radiale décrit dans un système de particules (atomes, molécules, colloïdes, etc.), comment la densité varie en fonction de la distance par rapport à une particule de référence. La formule de la fonction de distribution radiale est donnée par la relation suivante :

$$g(r) = 4\pi r^2 \rho dr \quad 3.36$$

Où ρ est la densité du nombre d'atomes, r le rayon de la sphère d'observation par rapport à la particule de référence.

Les systèmes que nous étudierons dans cette thèse sont tous cristallins. Ces types de systèmes sont représentés par une fonction de distribution radiale contenant plusieurs pics distincts caractéristiques de l'ordre à courte et longue portée.

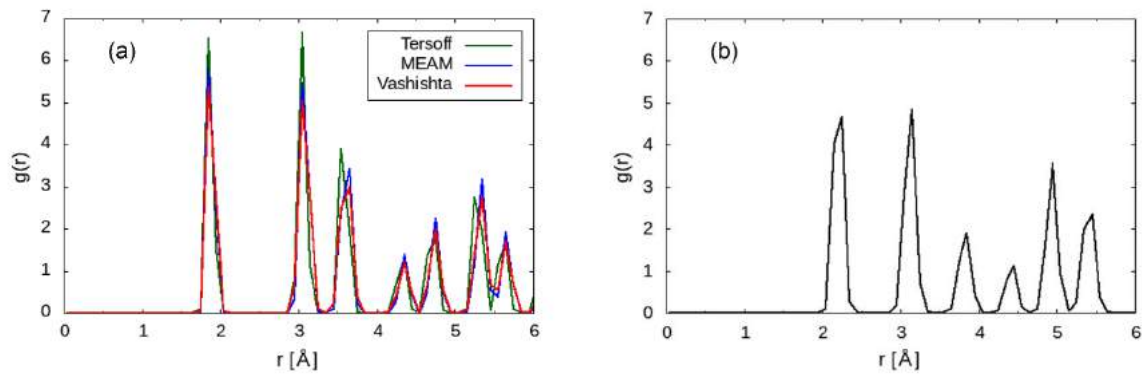


Figure 3-5 : Fonction de distribution radiale du système SiC 3C (a) simulé avec le potentiel de Tersoff (vert), avec le potentiel MEAM (bleu), avec le potentiel de Vashishta (rouge) et du système TiC- β (b) simulé avec le potentiel MEAM.

La position du premier pic de la fonction de distribution radiale indique le rayon de coupure des premiers voisins. La position du deuxième pic indique le rayon de coupure des deuxièmes voisins et ainsi de suite pour les autres pics. Les résultats de l'étude du SiC 3C (figure 3-5-a) indiquent que les rayons de coupure des voisins sont identiques peu importe le potentiel interatomique utilisé.

3.1.2.4 Dispersion des phonons

Les deux premières parties ont permis de vérifier que les potentiels interatomiques sont bien définis et que le pas de temps de simulation dt choisi permet d'assurer la stabilité des systèmes.

Dans cette partie, nous allons nous intéresser aux courbes de dispersion des phonons. Dans un premier temps nous allons déterminer la taille minimum à partir de laquelle les résultats convergent. Par la suite nous comparerons les résultats simulés avec ceux de la littérature.

Les [figures 3-6-\[a-d\]](#) montrent les différentes courbes de dispersion des phonons réalisées pour différentes tailles de boîte de simulation. Cette étude montre que les résultats convergent à partir d'une boîte de taille 3x3x3. En effet, nous constatons que les points obtenus pour les boîtes de taille 3x3x3, 4x4x4 et 5x5x5 se superposent et cela pour tous les potentiels interatomiques étudiés.

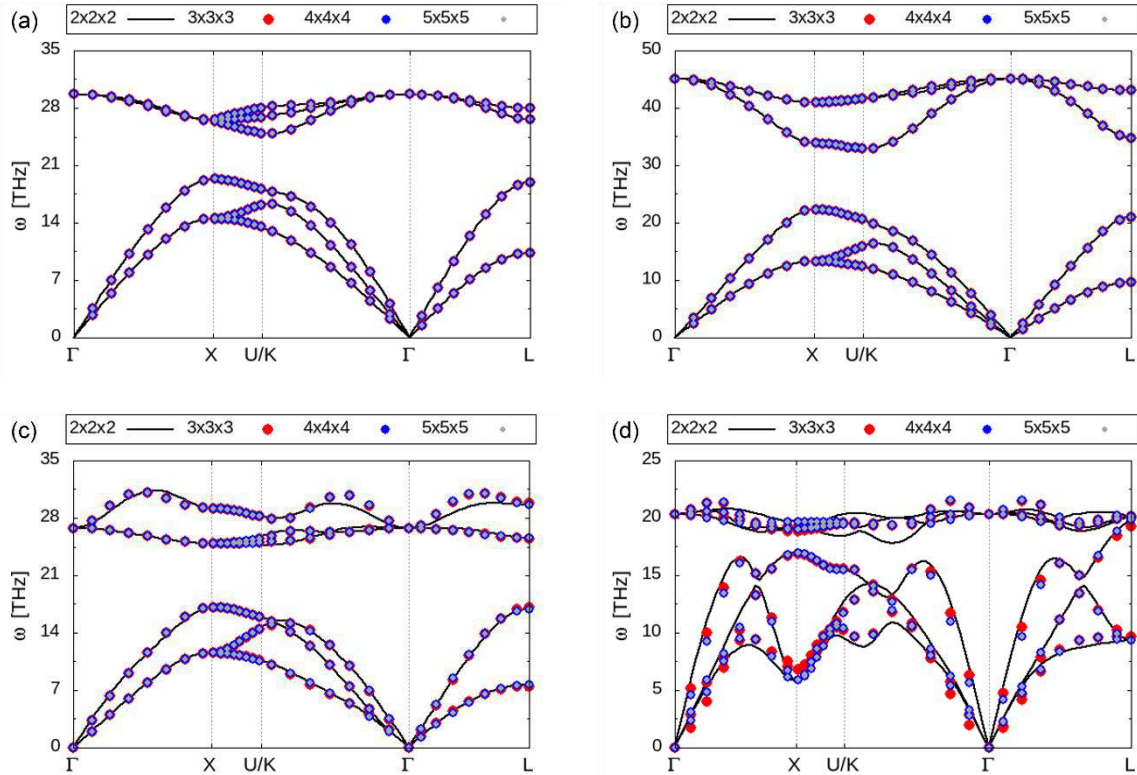


Figure 3-6 : Courbes de dispersion des phonons harmoniques obtenues pour le système SiC 3C simulé avec le potentiel de Tersoff (a), avec le potentiel MEAM (b), avec le potentiel de Vashishta (c) et du système TiC- β (d) simulé avec le potentiel MEAM. Les traits pleins correspondent à la simulation réalisée dans une boîte de taille 2x2x2, les points rouges à la simulation réalisée dans une boîte de taille 3x3x3, les bleus à une boîte de taille 4x4x4 et les grises à une boîte de taille 5x5x5.

Nous allons ensuite comparer nos simulations avec les résultats de la littérature. Dans les [figures 3-7-\[a-d\]](#), les courbes de dispersion des phonons obtenues par DM ab-initio sont issues des travaux de Varadachari et Bhowmick (Varadachari et Bhowmick 2009) pour le SiC 3C et de ceux de Bağcı et ses collaborateurs pour le TiC- β (Bağcı et al. 2009). Les points expérimentaux sont issus des travaux de Serrano et de ses collaborateurs pour le SiC 3C (Serrano et al. 2002) et de Pintschovius et de ses collaborateurs (Pintschovius, Reichardt, et Scheerer 1978) pour le TiC- β .

Les courbes de dispersion des phonons issues de la littérature (expérimentales et simulations *ab-initio*) pour le SiC 3C présentent des branches LO et TO qui sont découplées dans toute la zone de Brillouin. Ce découplage des modes est appelé « LO-TO splitting ». Ce phénomène est dû au décalage de la fréquence du mode LO vers des fréquences plus élevées que celle du mode TO.

En effet, lorsque des atomes chargés vibrent dans un réseau cristallin, un moment dipolaire de transition M est généré pour les modes vibrationnels qui sont actifs dans l'absorption infrarouge. Le phonon qui accompagne un tel changement de dipôle est appelé « phonon polaire ».

Ces dipôles génèrent un champ électrique macroscopique (située au point Γ dans la zone de Brillouin) qui se couple par rétroaction avec les modes LO du phonon polaire, dont le moment de transition M est dans la direction de propagation du phonon q ($M \parallel q$). Sous l'effet de ces forces électrostatiques auto-générées, la fréquence de vibration du mode LO est décalée vers des fréquences plus élevées que celle du mode TO ($M \perp q$), dont la fréquence est déterminée par l'interaction à courte portée dans le réseau cristallin. Le phénomène LO-TO splitting peut être observé dans les spectres Raman des phonons polaires « infra-réactifs ».

Les courbes de dispersion des phonons obtenues avec le potentiel Tersoff ([figure 3-7-a](#)) présentent une dégénérescence des branches optiques. Cette dégénérescence n'est pourtant pas observée avec les résultats de la littérature où les branches longitudinales et transverses optiques sont découplées. Nous notons aussi que la fréquence des modes transverses acoustiques est surestimée.

Dans le cas du potentiel MEAM ([figure 3-7-b](#)), les branches longitudinales et transverses optiques sont bien découplées hormis pour le point Γ où les branches optiques dégènèrent. Cependant, la fréquence des modes optiques est très surestimée par rapport aux résultats de la littérature. La même surestimation a été observée pour les modes acoustiques.

Les branches optiques observées avec le potentiel de Vashishta sont bien découplées ([figure 3-7-c](#)) hormis pour le point Γ où les branches optiques dégènèrent. Nous notons également une légère surestimation de la fréquence des modes acoustiques.

Des trois potentiels interatomiques présentés pour décrire les interactions interatomiques du SiC, le potentiel de Vashishta est celui qui reproduit au mieux les courbes de dispersion des phonons du SiC.

En ce qui concerne le TiC ([figure 3-7-d](#)), le potentiel MEAM montre de nettes différences sur toute la zone de Brillouin par rapport aux courbes issues de simulations *ab initio*. Cela est vrai en particulier pour les modes acoustiques à l'exception de la zone autour de Γ . Ce potentiel ne permet donc pas de décrire correctement les courbes de dispersion des phonons du TiC- β .

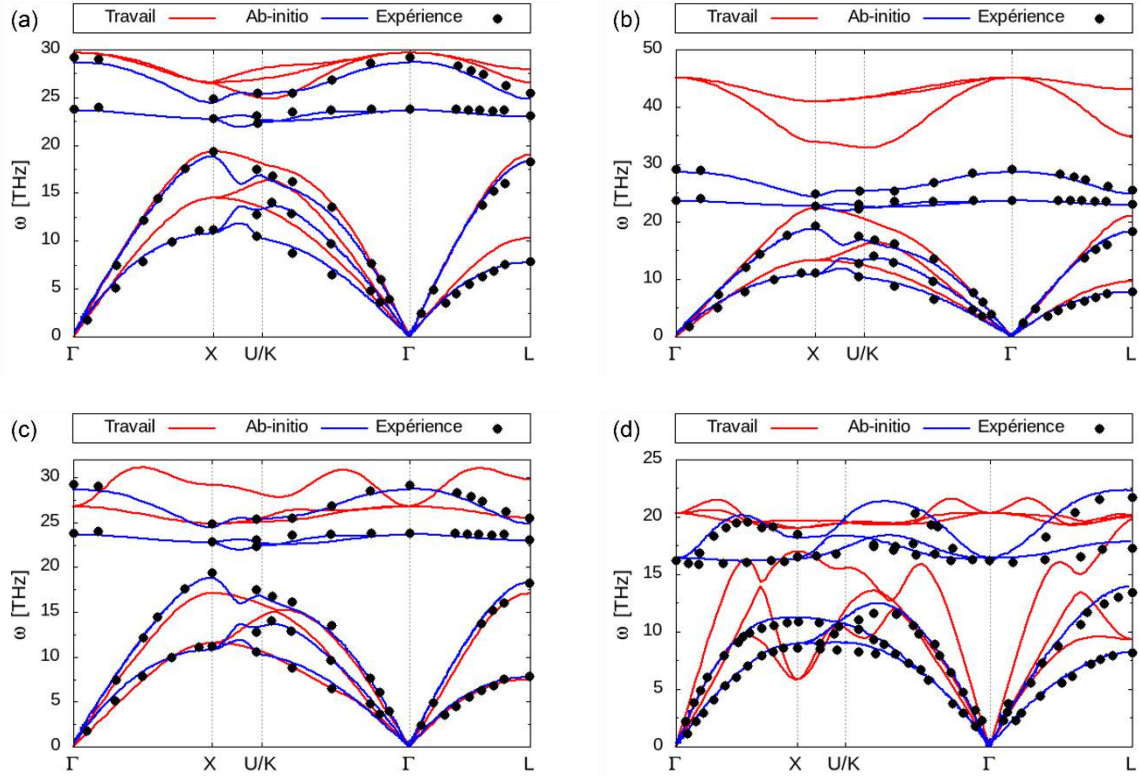


Figure 3-7 : Courbes de dispersion des phonons harmoniques obtenues pour le système SiC 3C simulé avec le potentiel de Tersoff (a), avec le potentiel MEAM (b), avec le potentiel de Vashishta (c) et du système TiC- β (d) simulé avec le potentiel MEAM. Les courbes rouges correspondent aux résultats de nos simulations, les bleues aux simulations ab-initio (Bağcı et al. 2009; Varadachari et Bhowmick 2009) et les points noirs aux valeurs expérimentales (Pintschovius et al. 1978; Serrano et al. 2002).

3.1.2.5 Densité d'état phononique et température de correction

Pour calculer la DOS à partir de la DM, nous avons suivi le protocole suivant :

1. Application d'un thermostat à 300 K pendant 60 ps.
2. Application d'un ensemble *nve* pendant 90 ps.
3. Récupération des vitesses chaque 3.072 ps.
4. Calcul de la DOS à partir des vitesses sauvegardées.

Les DOS issues de la littérature proviennent du livre « Phonon Dispersion Relations in Insulators » (Bilz et Kress 1979) pour le cas du SiC 3C et des travaux de Bağcı et ses collaborateurs (Bağcı et al. 2009) pour le cas du TiC- β .

Pour obtenir une DOS mieux décrite, il faut augmenter la taille du système (ou faire plusieurs moyennes). La [figure 3-8](#) illustre parfaitement ce propos, car on note que la courbe obtenue avec une boîte de taille 25x25x25 est plus lisse que celle obtenue avec une boîte de taille 6x6x6. Les différentes DOS présentés par la suite dans ce manuscrit pour le système SiC 3C et pour le système TiC- β ont été réalisés dans des boîtes de tailles 25x25x25.

Comme on peut s'y attendre en regardant les DOS, celle obtenue avec le potentiel de Tersoff ([figure 3-9](#)) est en désaccord avec la DOS issue de la littérature. Mais au-delà du désaccord attendu, il est surprenant de constater la présence d'état dans la zone de fréquences comprise entre 17 et 22 THz. En fait, cela semble être un problème du potentiel avec la température, car lorsqu'on essaye de calculer le DOS

à 0.1 K, cette dernière prend la forme attendue avec une zone interdite (comprise entre 17 et 24 THz).

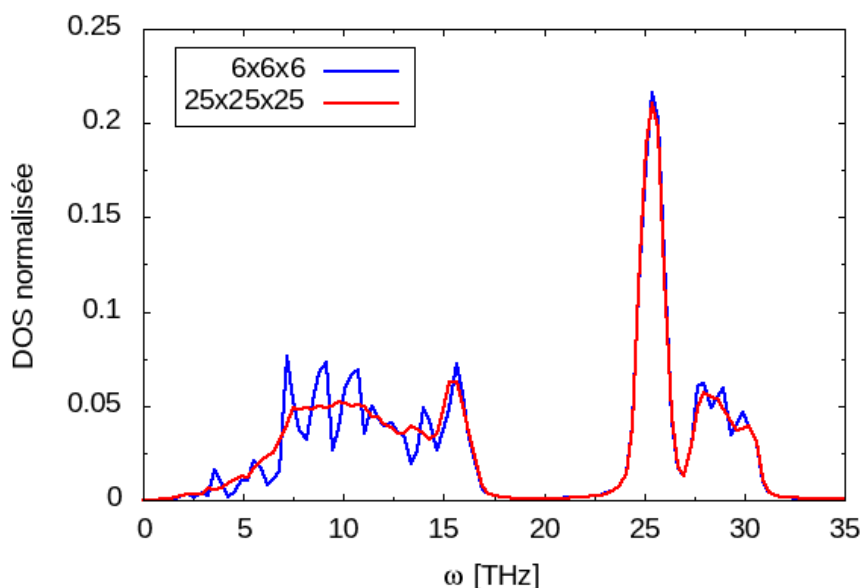


Figure 3-8 : Densité d'état phononique (DOS) obtenue pour le système SiC 3C simulé avec le potentiel de Vashishta dans une boîte de taille 6x6x6 contenant 1728 atomes (bleu) et de taille 25x25x25 contenant 120000 atomes (rouge).

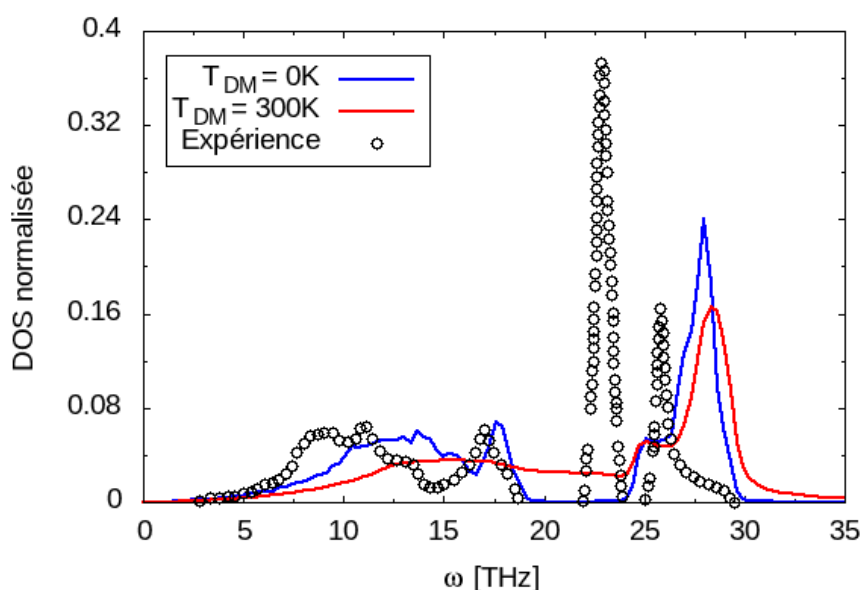


Figure 3-9 : Densité d'état phononique obtenue pour le système SiC 3C simulé avec le potentiel de Tersoff thermostaté à 0.1 K (bleu) et à 300 K (rouge). Les points correspondent au DOS issue de la littérature (Bilz et Kress 1979).

La densité d'états phononique obtenu avec le potentiel MEAM ([figure 3-10-a](#)) est en accord avec les observations faites sur les courbes de dispersion des phonons. La DOS obtenue avec le potentiel MEAM est en désaccord avec celle issue de la littérature.

Tout comme nous avons pu le remarquer en ce qui concerne les courbes de dispersion des phonons, le potentiel de Vashishta est le potentiel d'interaction qui reproduit le mieux la DOS du SiC.

Le potentiel MEAM ne permet pas de bien reproduire la DOS du TiC ([figure 3-10-b](#)). Mais contrairement aux résultats obtenus pour le SiC simulé avec le potentiel MEAM, les fréquences de la DOS du TiC ne sont pas surestimées.

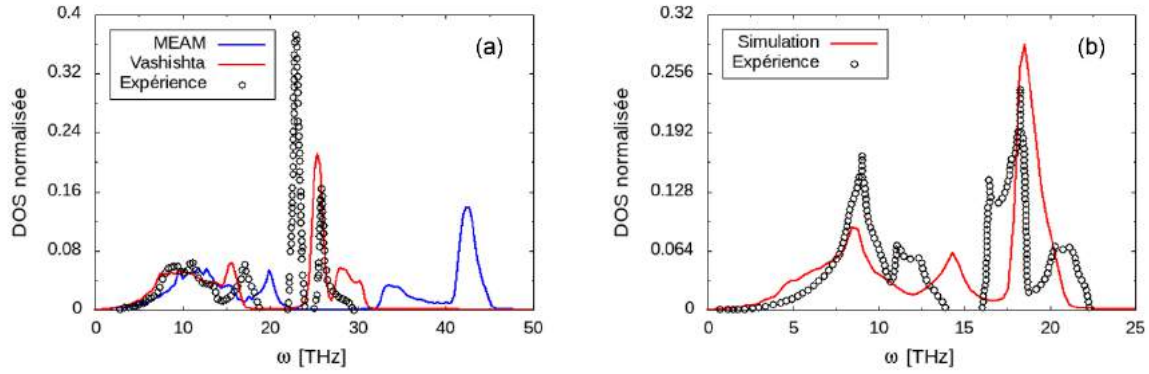


Figure 3-10 : Densité d'état phononique obtenue pour le système SiC 3C (a) simulé avec le potentiel MEAM (bleu), avec le potentiel de Vashishta (rouge) et pour le système TiC- β (b) simulé avec le potentiel MEAM. Les points correspondent au DOS issue de la littérature (Bağcı et al. 2009; Bilz et Kress 1979).

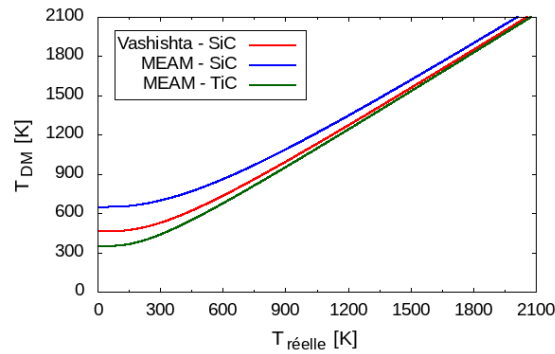


Figure 3-11 : Correction de la température de simulation par rapport à la température réelle évaluée pour le système SiC 3C simulé avec le potentiel de Vashishta (rouge), le potentiel MEAM (bleu) et pour le système TiC- β (vert) simulé avec le potentiel MEAM.

Les corrections à apporter à la température de simulation sont représentées sur la [figure 3-11](#). Ces corrections ont été déterminées à partir des DOS. L'écart entre la température de simulation et la température réelle s'amenuise pour les températures élevées. Le système SiC 3C dont les interactions atomiques sont décrites par le potentiel MEAM est celui qui présente le plus grand écart entre la température de simulation et la température réelle. Le tableau 3-7 recense les corrections de la température de simulation pour une température réelle de 300 K pour les différents potentiels interatomiques.

Tableau 3-7 : Température de simulation pour une étude à température réelle de 300 K

Paramètre	Tersoff (300K)	Tersoff (0K)	MEAM	Vashishta	MEAM TiC
T_{DM} [K]	600	545	696	526	436

3.1.2.6 Bilan des études préliminaires

Les travaux préliminaires menés sur le potentiel Vashishta pour la structure SiC et le MEAM pour le TiC montrent que ceux-ci sont viables, si on se réfère aux résultats de la littérature, pour simuler les propriétés radiatives de ces deux matériaux.

Les simulations menées sur des structures de SiC montrent que le potentiel de Vashishta est celui qui reproduit au mieux les modes optiques sur les courbes de dispersion et sur la DOS. Le potentiel de Tersoff ne prend pas bien en compte quant à lui les effets anharmoniques.

Néanmoins nous avons observé deux différences majeures entre la dispersion simulée avec le potentiel de Vashishta et celles de la littérature :

1. Les modes optiques sont légèrement décalés vers les hautes fréquences, ce qui indique que le potentiel de Vashishta a tendance à légèrement surestimer les modes optiques.
2. Les branches longitudinales et transverses optiques sont dégénérées au point de haute symétrie Γ .

La section suivante est consacrée à l'optimisation du potentiel de Vashishta afin d'améliorer l'accord entre les résultats simulés et les résultats de la littérature.

3.1.3 Optimisation du potentiel de Vashishta

3.1.3.1 Modulation du paramètre de maille

La solution proposée pour répondre à la problématique de la surestimation des branches optiques se base sur les résultats expérimentaux et les observations d'Olego et de ses collaborateurs (Olego, Cardona, et Vogl 1982). Ces derniers ont montré que les fréquences des modes optiques et acoustiques du SiC augmentent lorsque le matériau est soumis à une pression. Or l'application d'une pression sur un matériau engendre par définition une compression de ce dernier ce qui se caractérise à l'échelle atomique par la diminution du paramètre de maille. Par conséquent, la diminution du paramètre de maille du SiC entraîne une augmentation des fréquences optiques. En suivant une réflexion inverse, l'augmentation du paramètre de maille permettrait de réduire les fréquences des modes optiques. Nous avons donc déterminé en augmentant progressivement le paramètre maille celui qui permet de bien reproduire les fréquences des branches optiques.

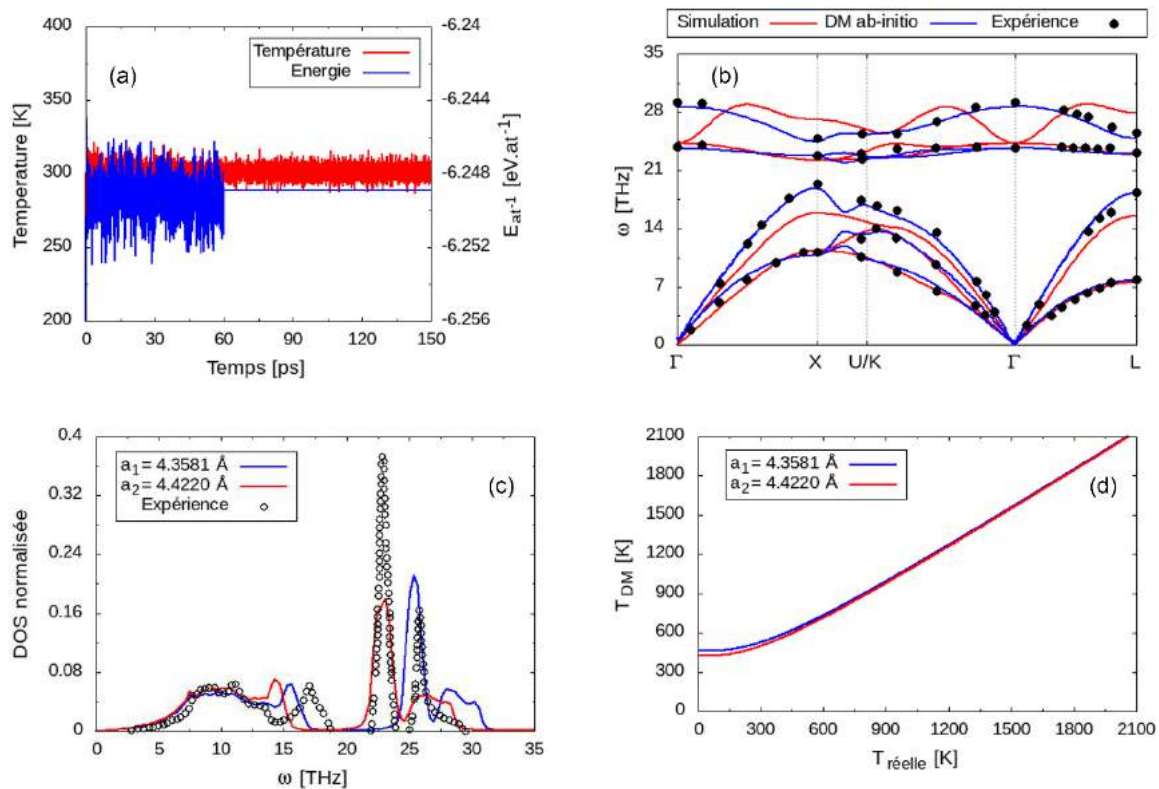


Figure 3-12 : Profil de température (rouge) et d'énergie (bleu) du système SiC 3C simulé avec le potentiel Vashishta avec un paramètre de maille de 4.422 Å (a). Courbes de dispersion des phonons harmoniques (b) obtenues pour le même système dans les mêmes conditions (rouge). Densité d'état phononique (c) obtenue pour un SiC 3C avec un paramètre de maille de 4.3581 Å (bleu) et de 4.422 Å (rouge). Correction de la température de simulation par rapport à la température réelle (d) évaluée pour le système SiC 3C avec un paramètre de maille de 4.3581 Å (bleu) et de 4.422 Å (rouge).

Le système SiC 3C dont le paramètre de maille a été modifié présente toujours une bonne stabilité. En effet, l'énergie du système avec un paramètre de maille de 4.422 Å est bien conservée dans l'ensemble *nve* ([figure 3-12-a](#)).

On note une nette amélioration des branches optiques en augmentant légèrement le paramètre de maille (augmentation d'environ 1.5%). La [figure 3-12-b](#) montre une superposition totale des branches TO simulées avec celles issues de la littérature. La branche LO est mieux estimée mais ne superpose pas totalement avec les branches de littérature. Ce dernier résultat est plus vrai pour le point central de la zone de Brillouin Γ . On note cependant que la modification du paramètre de maille entraîne une légère sous-estimation des fréquences des modes acoustiques.

La DOS évaluée avec le nouveau paramètre de maille présente un meilleur accord avec la littérature que pour celle évaluée avec le paramètre de maille de 4.3581 Å ([figure 3-12-c](#)). La sous-estimation des fréquences des modes acoustiques est plus perceptible avec la DOS. On note que la DOS évaluée avec le paramètre de maille de 4.3581 Å présente des états de basse fréquence qui s'étendent plus loin que pour le cas avec un paramètre de maille de 4.422 Å.

La correction à apporter à la température de simulation pour une température réelle donnée identique pour les deux échantillons (4.3581 Å et 4.422 Å). Les profils de température se superposent pour les deux cas étudiés ([figure 3-12-d](#)).

3.1.3.2 Interaction coulombienne longue distance

La dégénérescence, des branches longitudinales et transverses optiques est induite par la troncature du potentiel de Vashishta à 7.35Å. La description de modes optiques proches du point Γ nécessite la prise en compte des interactions interatomiques avec une plus grande portée.

Pour mieux estimer les modes optiques du SiC, nous avons essayé deux méthodes :

- L'augmentation du rayon de coupure r_c .
- L'ajout d'un terme coulombien longue portée dans le potentiel interatomique

La première méthode consiste uniquement augmenter directement dans le potentiel de Vashishta la portée des interactions coulombiennes. La deuxième méthode consiste à ajouter un terme coulombien longue distance avec le potentiel de Vashishta pour description des interactions atomiques du SiC. Cet ajout a été défini de sorte que les interactions coulombiennes définies dans le potentiel de Vashishta ne viennent pas s'ajouter avec celles du terme coulombien longue distance. Pour ce faire, le terme coulombien longue distance a été définie à partir d'une distance supérieure à 7.35Å.

L'ajout du terme coulombien longue distance a été réalisé sous LAMMPS à partir de la commande « Kspace ». Cette commande permet d'évaluer les interactions coulombiennes longue distance dans l'espace de Fourier (appelé réseau réciproque). Les interactions coulombiennes ne se limitent plus aux premiers voisins comme c'est le cas du potentiel de Vashishta. Dans cette approximation, chaque charge du système interagit avec les charges d'un réseau infini d'images périodiques dans le domaine de simulation. Le solveur utilisé pour réaliser cette approximation est très important puisqu'il définit le temps de simulation (qui peut être très important). Nous avons utilisé le solveur nommé « ppm » (particle-particle particle mesh) présent sous LAMMPS. Ce solveur a été développé par Hockney et Eastwood (Hockney et Eastwood 1988). Ces derniers ont défini une méthode qui fait correspondre la charge des atomes à un maillage 3d. L'équation de Poisson est résolue en utilisant une transformée de Fourier rapide (Fast Fourier Transform FFT en anglo-saxon). Les

champs électriques sont par la suite interpolés sur les nœuds du maillage et renvoyés aux atomes. Le solveur PPPM calcule selon une loi $N \log N$ (N étant le nombre d'atomes dans le système) grâce aux algorithmes FFT. Il est donc presque toujours le choix le plus rapide mais reste quand même très coûteux en temps. A titre indicatif, la simulation d'une boîte de dimension $15 \times 15 \times 15$ dans un ensemble canonique (nvt) de 60 ps puis dans un ensemble microcanonique (nve) de 180 ps prendra 30 minutes avec un potentiel de Vashishta simple en utilisant 140 processeurs. Cela prendra 16 heures avec 360 processeurs pour un potentiel de Vashishta tenant compte des interactions coulombiennes longue portée.

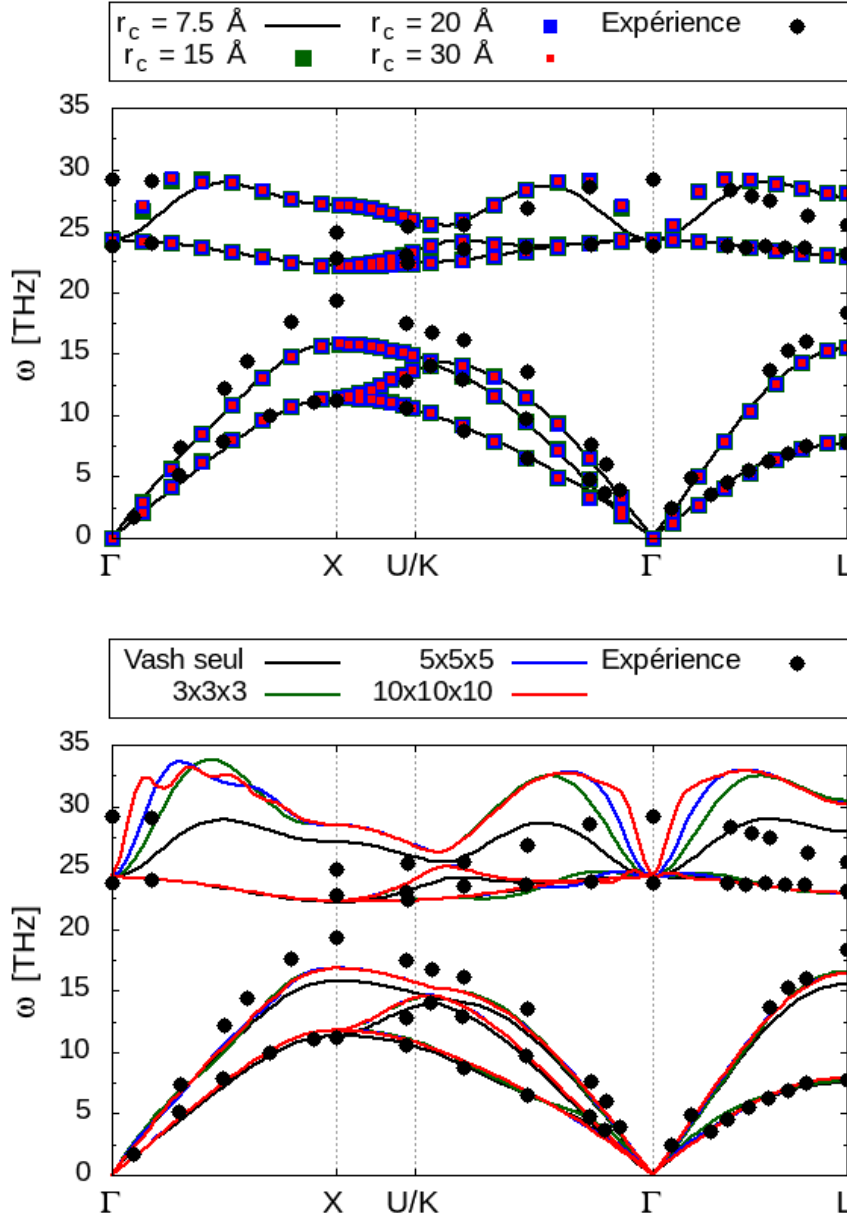


Figure 3-13 : (a) Courbes de dispersion des phonons harmoniques pour un système SiC 3C de taille $6 \times 6 \times 6$ simulé avec le potentiel de Vashishta seul avec un rayon de coupure de 7.5 Å (traits noirs), de 15 Å (points verts), de 20 Å (points bleus) et de 30 Å (point rouge). (b) Courbes de dispersion des phonons harmoniques pour un système SiC 3C de taille $6 \times 6 \times 6$ simulé avec le potentiel de Vashishta seul (traits noirs), avec ajout du terme coulombien longue distance pour une boîte de taille $3 \times 3 \times 3$ (traits verts), de taille $5 \times 5 \times 5$ (traits bleus) et de taille $10 \times 10 \times 10$ (traits rouges).

L'augmentation du rayon de coupure permet d'améliorer la description du découplage des fréquences LO et TO (LO-TO splitting) comme le montre la [figure 3-13-a](#). Les valeurs convergent à partir d'un rayon de coupure de 15 Å. En effet la superposition des points indique qu'à partir d'un rayon de coupure de 15 Å, le potentiel de Vashishta seul ne permet pas de bien évaluer le découplage des modes optiques autour du point Γ .

La [figure 3-13-b](#) montre l'effet de la taille de la boîte de simulation sur les courbes de dispersion des phonons et en particulier sur le découplage des modes optiques. Sur cette figure, les traits noirs correspondent aux courbes de dispersion des phonons obtenues en utilisant une boîte de simulation de dimension 6x6x6 avec un potentiel de Vashishta simple (sans ajout des interactions coulombiennes longue portée). Nous pouvons voir qu'en ajoutant les interactions coulombiennes longue portée avec une boîte de dimension 3x3x3 (lignes vertes), la branche du mode longitudinal optique s'étant déjà plus loin par rapport au cas précédent. Cela dit, nous avons noté une surestimation de la fréquence par rapport à l'expérience. Nous notons également que l'augmentation du volume de la boîte de simulation permet d'étendre la distance de projection de la branche du mode longitudinal optique.

3.1.4 Conclusion

Les études préliminaires nous ont permis de valider le bon fonctionnement de nos simulations de DM. En effet, nous avons pu reproduire les résultats obtenus dans la littérature. L'étude de la conservation de l'énergie a montré que mis à part le potentiel de Tersoff, tous les potentiels interatomiques permettaient d'assurer la stabilité des systèmes simulés.

Les résultats obtenus avec le potentiel de Vashishta en termes d'énergie de cohésion, de paramètre de maille, de dispersion des phonons et de DOS, montrent que c'est le potentiel qui reproduit le mieux les interactions interatomiques du SiC. C'est pour cette raison que nous avons choisi d'utiliser ce potentiel pour simuler par DM les propriétés thermo-radiatives du SiC. L'étude de l'optimisation du potentiel de Vashishta a montré que la modification du paramètre de maille permet d'avoir des résultats en accord avec les valeurs issues de la littérature. C'est la raison pour laquelle nous privilégierons un paramètre de maille $a = 4.422\text{\AA}$ pour l'étude en température des propriétés radiatives de la structure 3C-SiC.

Nous avons aussi montré que l'augmentation du rayon de coupure r_c permet d'aller dans la bonne direction pour avoir le LO-TO splitting au centre de la zone de Brillouin. La contrepartie étant un coup en temps de calcul plus important. L'ajout du terme coulombien longue portée permet de considérablement étendre la branche du mode longitudinal optique. Nous avons noté que plus la boîte de simulation est grande, plus le terme coulombien longue portée reproduit bien le découplage des modes transverses et longitudinaux optiques autour du point Γ .

Dans le cadre de l'étude sur le dopage, nous utiliserons un potentiel interatomique mixte ou hybride, pour décrire les différentes interactions interatomiques. C'est ainsi que pour le cas du dopage du SiC avec de l'azote, le potentiel de Vashishta décrira les liaisons Si-Si, C-C, Si-C et le potentiel de Tersoff décrira les interactions N-N, Si-N et C-N.

Dans le cas de l'introduction de nanoparticules de TiC dans une matrice de SiC, le potentiel de Vashishta décrira les liaisons Si-Si, C-C, et Si-C. Le potentiel MEAM décrit quant à lui les interactions Ti-Ti, C-C et Ti-C. A la frontière entre la nanoparticule de TiC et la matrice de SiC, les interactions entre les différents atomes composant les deux matériaux seront décrites par le potentiel de Lennard-Jones. Cette étude nous permettra d'avoir juste une première approche par DM de l'introduction de nanoparticules de TiC dans le SiC.

Dans une perspective ultérieure, il serait envisageable et nécessaire d'améliorer le potentiel MEAM pour le TiC. Cela impliquerait d'affiner les paramètres du potentiel. Cependant, pour les besoins de cette thèse où le TiC n'est traité que pour des inclusions dans une matrice de SiC, nous pouvons le considérer comme un problème de second ordre.

3.2 Propriétés thermo-radiatives du SiC 3C

La fonction diélectrique IR et la fréquence des paramètres de Lorentz présentées dans les résultats ont été obtenue en faisant l'égalité entre la fonction diélectrique obtenu par la DM définie par la relation 2.88 et le modèle de Lorentz définie par la relation 2.31.

3.2.1 Protocol de simulation

L'évaluation de la fonction diélectrique dans l'infrarouge IR par DM n'est possible que grâce à la détermination des densités de courants (dérivant des polarisations) du système. Pour bien évaluer ces densités de courants, il faut tout d'abord équilibrer le système via un thermostat à la température voulue. Les densités de courants sont par la suite enregistrées durant un certain temps dans l'ensemble microcanonique. Nous avons donc évalué le temps minimum d'équilibrage du système et le temps minimum d'acquisition des mesures permettant d'avoir des résultats qui convergent. Nous avons également évalué l'impact de la taille du système sur la convergence des résultats.

3.2.1.1 Temps d'équilibrage du système

L'étude du temps de la mise à l'équilibre thermique du système a été réalisée sur deux échantillons de dimension $10 \times 10 \times 10$ à des températures différentes. Le premier échantillon a été équilibré à 300 K le second à 1500 K . Les mesures ont été réalisées pendant 120 ps (ensemble *nve*).

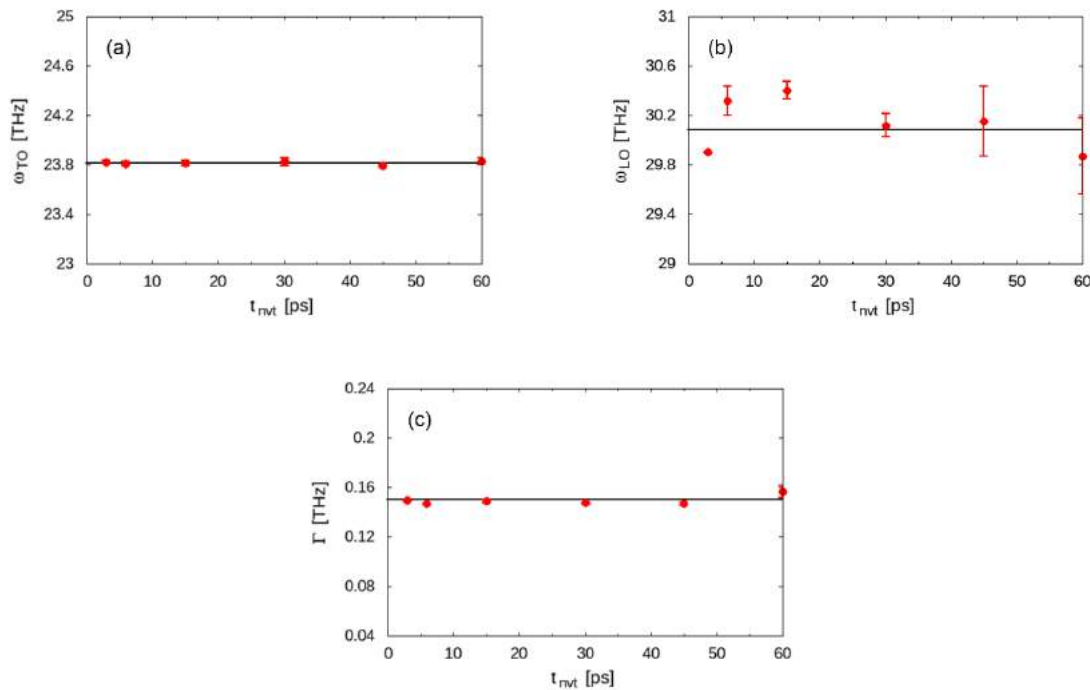


Figure 3-14 : Paramètres de Lorentz en fonction du temps de la mise à l'équilibre thermique, mode TO (a), mode LO (b) et coefficient d'amortissement (c). Système thermostaté à 300 K , acquisition des mesures pendant 120 ps .

Les figures [3-14-a](#) et [3-14-c](#) montrent que les fréquences du mode TO et du coefficient d'amortissement ne dépendent pas du temps de la mise à l'équilibre thermique du système. On note cependant que la fréquence du mode LO fluctue légèrement autour d'une fréquence donnée ([figure 3-14-b](#)). On peut donc dire que le temps de la mise à l'équilibre n'a pas d'impact sur la convergence des résultats.

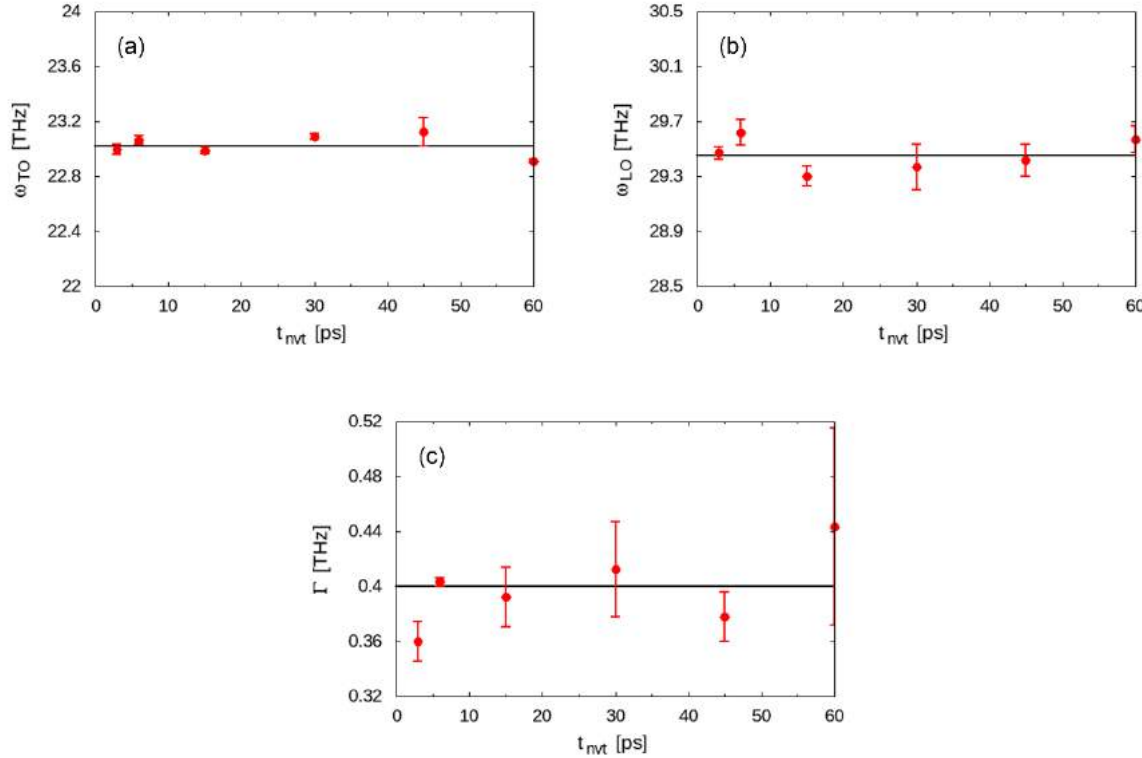


Figure 3-15 : Paramètres de Lorentz en fonction du temps de la mise à l'équilibre thermique, mode TO (a), mode LO (b) et coefficient d'amortissement (c). Système thermostaté à 1500 K, acquisition des mesures pendant 120 ps.

Les résultats du système thermostaté à 1500 K ([figure 3-15](#)) vont dans le même sens que ceux du système à thermostaté 300 K. En effet, les fréquences des paramètres Lorentz n'évoluent pas avec le temps de la mise à l'équilibre thermique.

L'étude de convergence associée au temps de l'équilibrage thermique du système indique que les résultats ne dépendent pas du temps d'application du *nvt*. Nous avons cependant appliqué de *nvt* suffisamment long pour assurer que le système est bien à la température désirée.

3.2.1.2 Temps d'acquisition des mesures

L'étude du temps d'acquisition des mesures a aussi été réalisée sur deux échantillons de dimension 10x10x10 avec les mêmes températures que l'étude précédente.

La figure [3-16-b](#) montre clairement que le mode LO dépend du temps d'acquisition des mesures. Il faut au moyen 120 ps pour une convergence de la fréquence du mode LO pour un système thermostaté à 1500 K. A contrario, la fréquence du mode TO et celle du coefficient d'amortissement ne dépendent pas du temps d'acquisition des mesures (figures [3-16-a](#) et [3-16-c](#)).

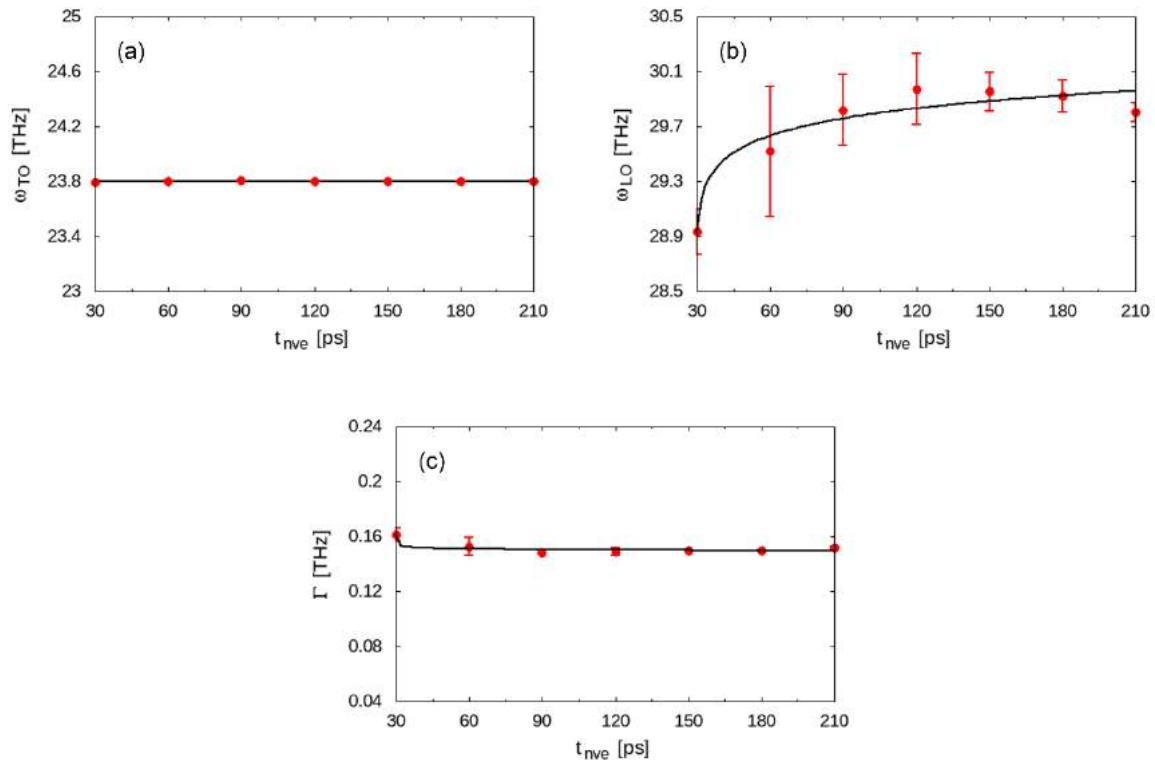
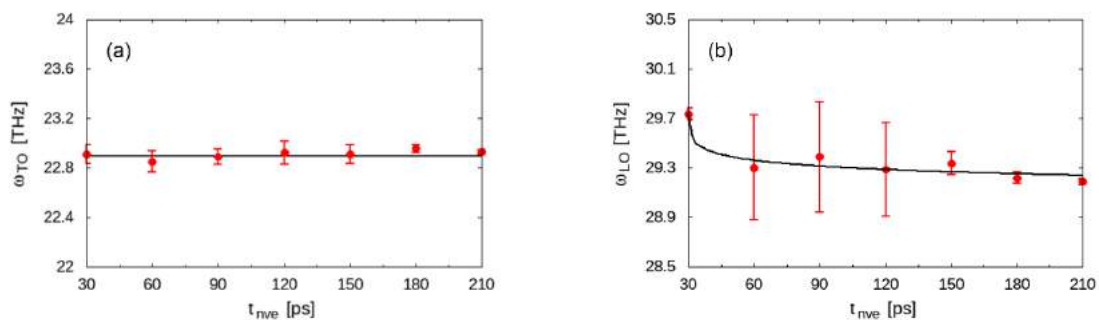


Figure 3-16 : Paramètres de Lorentz en fonction du temps de la mise à l'équilibre thermique, mode TO (a), mode LO (b) et coefficient d'amortissement (c). Système thermostaté à 1500 K pendant 30 ps.

Les figures [3-17-b](#) et [3-17-c](#) montrent que le mode LO et le coefficient d'amortissement convergent pour un temps d'acquisition de 120 ps. Ces résultats ainsi que les résultats de l'échantillon thermostaté à 300 K indiquent qu'il faut en moyen un temps d'acquisition des mesures de 120 ps pour avoir des résultats qui convergent dans une gamme de température compris entre 300 et 1500 K.

Le protocole qui sera appliqué sera le suivant :

1. Mise en place de la boîte simulation
2. Application d'un thermostat à la température désirée pendant 30 ps.
3. Application d'un ensemble nve pendant 120 ps.
4. Enregistrement des vitesses des particules tous les 10 pas de temps.



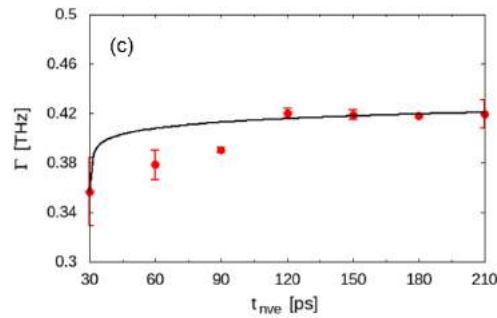


Figure 3-17 : Paramètres du modèle de Lorentz en fonction du temps d'acquisition des mesures, mode TO (a), mode LO (b) et coefficient d'amortissement (c). Simulation réalisée avec une boîte de dimension 10x10x10 thermostatée à 1500 K pendant 30 ps.

3.2.1.3 Dimension de la boîte

Les résultats de l'étude de l'influence du volume de la boîte sur les paramètres de Lorentz sont présentés sur la [figure 3-18](#) pour l'échantillon à 300 K et sur la [figure 3-19](#) pour l'échantillon à 1500 K. Les valeurs en abscisse correspondent au nombre de répétitions de la maille conventionnelle dans les trois directions de l'espace. L'étude montre que la dimension de la boîte de simulation n'a pas d'influence sur les paramètres de Lorentz.

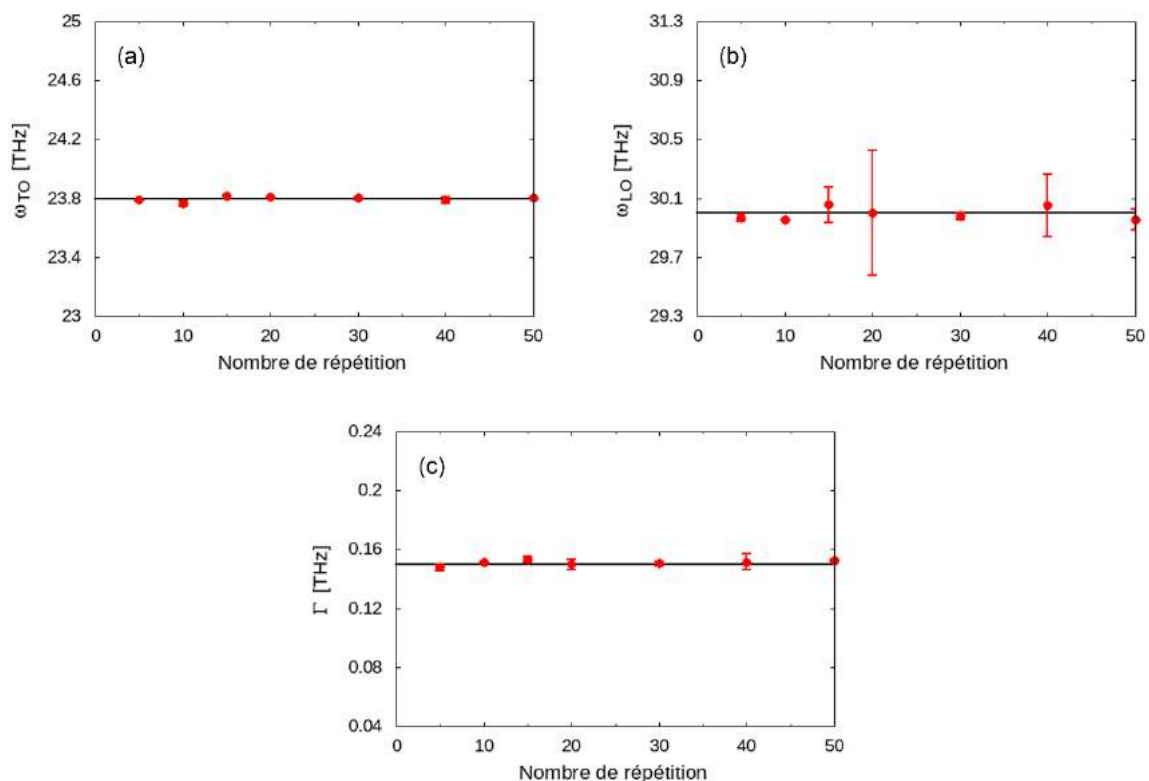


Figure 3-18 : Paramètres du modèle de Lorentz en fonction du volume de la boîte de simulation, mode TO (a), mode LO (b) et coefficient d'amortissement (c). Échantillons équilibrés à 300 K.

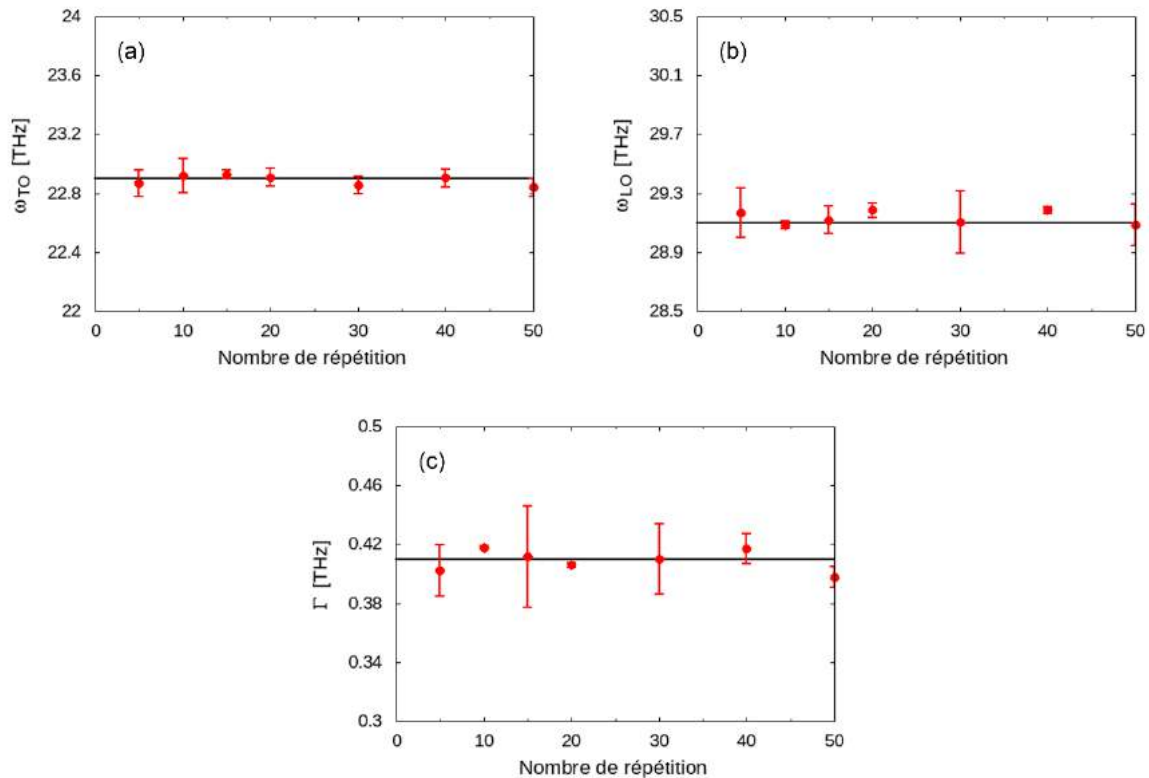


Figure 3-19 : Paramètres du modèle de Lorentz en fonction du volume de la boîte de simulation, mode TO (a), mode LO (b) et coefficient d'amortissement (c). Échantillons équilibrés à 1500 K.

3.2.1.4 Conclusion

L'étude de convergence menée précédemment nous a permis de définir le protocole minimisant le temps de calcul et permettant d'évaluer la fonction diélectrique dans la gamme de températures comprise entre 300 K et 1500 K. Nous avons par ailleurs observé que déjà avec des boîtes petits (5x5x5) on obtient les paramètres du modèle de Lorentz à convergence. Il est tout de même plus judicieux de simuler des systèmes de grande taille afin d'avoir une meilleure statistique d'ensemble et ainsi améliorer le fit de la fonction diélectrique dans l'infrarouge IR obtenue par DM avec un modèle de Lorentz.

3.2.2 Fonction diélectrique IR en fonction de la température

L'étude de l'évolution de la fonction diélectrique en fonction de la température a été réalisée en suivant le protocole construit à partir de l'étude de convergence. Nous avons évalué la fonction diélectrique pour cinq valeurs de température : 300, 600, 900, 1200 et 1500 K. Les températures de simulation correspondant à ces températures sont répertoriées dans tableau 3-8.

Tableau 3-8 : Correction de la température de simulation.

$T_{réelle}[K]$	300	600	900	1200	1500
$T_{DM}(4.422 \text{ \AA})[K]$	497	713	978	1259	1547

La [figure 3-20-a](#) correspond à la partie imaginaire de la fonction diélectrique dans l'IR évaluée par DM. Nous pouvons voir que le pic de la partie imaginaire est moins intense à mesure que la température est importante. L'augmentation de la température a aussi comme conséquence de déplacer la position du pic de la partie imaginaire et la position de changement de signe de la partie réelle de la fonction diélectrique vers les basses fréquences ([figure 3-20-b](#)). Cela implique que les fréquences transverse et longitudinale optiques diminuent avec la température.

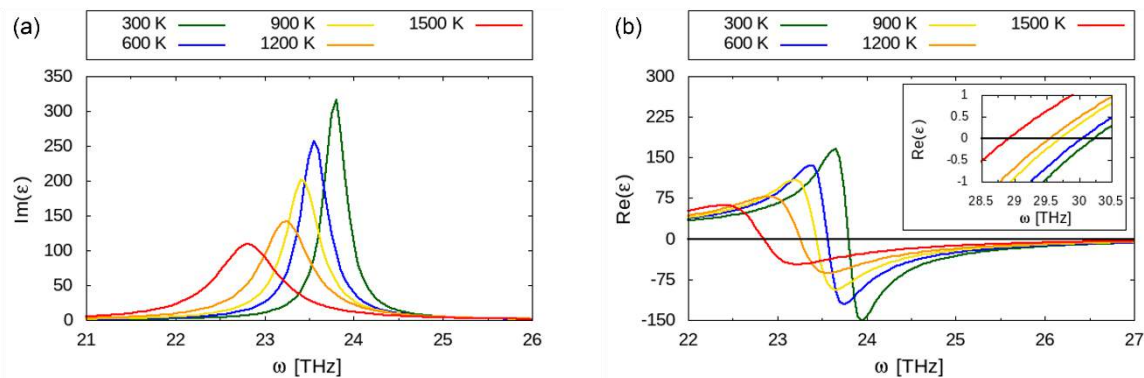


Figure 3-20 : Partie imaginaire de la fonction diélectrique (a), partie réelle de la fonction diélectrique (b). Les courbes vertes correspondent au système simulé à une température réelle de 300K, les bleues à 600K, les jaunes à 900K, les oranges à 1200K et les rouges à 1500K.

Les [figures 3-21-\[a-c\]](#) montrent l'évolution de la fréquence des paramètres du modèle de Lorentz en fonction de la température. Les points expérimentaux sont issus des travaux d'Olego et Cardona (Olego et Cardona 1982). Les points verts proviennent des travaux de Domingues et ses collaborateurs (Domingues et al. 2018).

La [figure 3-21-a](#) montre que nos simulations reproduisent parfaitement l'évolution de la fréquence transverse optique en fonction de la température. La superposition des points expérimentaux avec nos simulations indique un très bon accord entre les valeurs simulées et les valeurs mesurées. L'amélioration par rapport aux calculs de la littérature est due à la différence entre les paramètres de maille. Le paramètre de la maille de Domingues, étant plus petit ($a=4.3705 \text{ \AA}$), conduit à des phonons optiques plus grands.

La fréquence longitudinale optique visible sur la [figure 3-21-b](#) est légèrement surévaluée par rapport à l'expérience, mais comme dans le cas de TO, nos simulations améliorent la précision de l'évaluation de la fréquence du mode LO par rapport aux résultats de la littérature. Il en va de même pour le coefficient de dépréciation présenté dans la [figure 3-21-c](#). Cette étude montre que la méthodologie suivie permet de simuler correctement par DM, l'évolution de la fonction diélectrique avec la température.

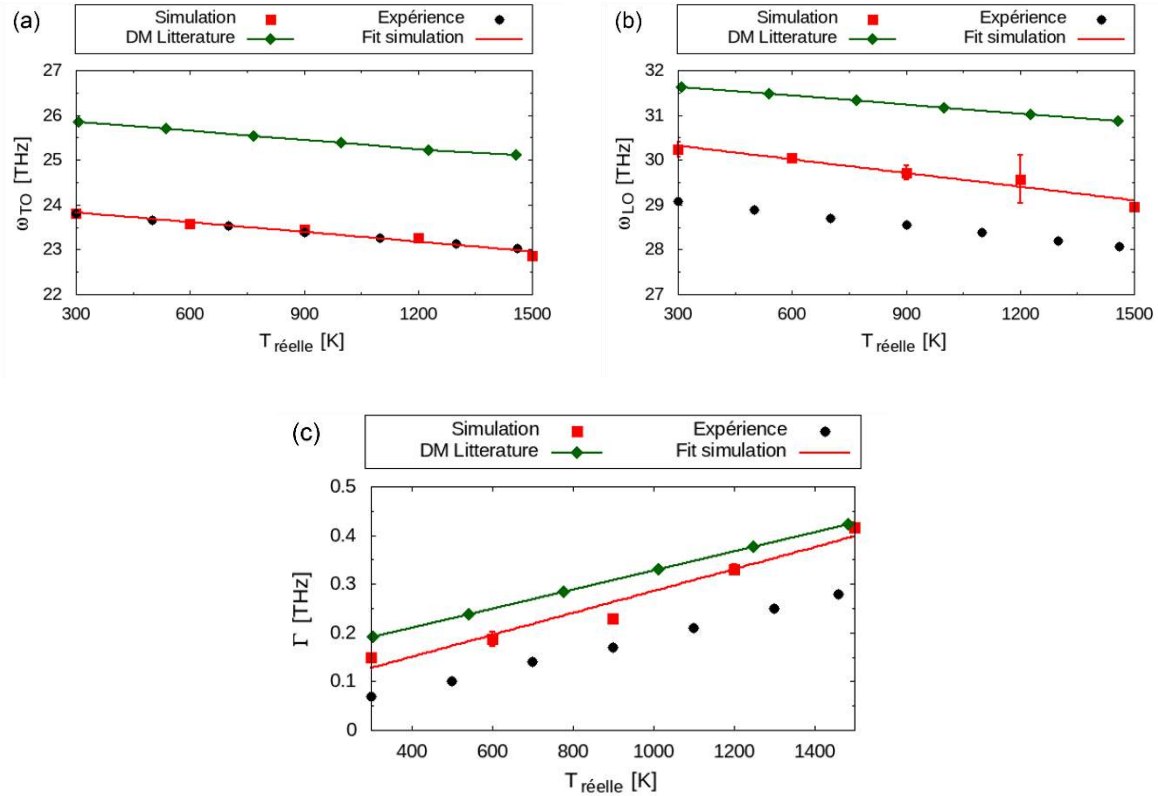


Figure 3-21 : Paramètres du modèle de Lorentz en fonction de la température, mode TO (a), mode LO (b) et coefficient d'amortissement (c). Les points noirs correspondent aux données expérimentales Olego et Cardona 1982 (Olego et Cardona 1982), les traits rouges aux simulations avec un paramètre de maille de 4.422Å et les verts aux simulations de DM dans la littérature (Domingues et al. 2018) avec paramètre de maille 4.3705 Å.

3.2.3 Fonction diélectrique en fonction du dopage et de la température

Dans cette section, nous présenterons tout d'abord les résultats des études préliminaires de DM. Ces études préliminaires ont pour but de vérifier que les systèmes de SiC dopé sont stables et que la structure ne s'amorphise pas lors des simulations.

Par la suite, nous présenterons les résultats obtenus pour la fonction diélectrique pour différents niveaux de dopage. Nous comparerons les valeurs obtenues pour les paramètres de Lorentz que sont ω_{TO} , ω_{LO} et Γ en fonction de la concentration des porteurs de charge libre, avec celles issues de l'expérience. Enfin, nous terminerons par une étude sur l'influence couplée du dopage et de la température sur la fonction diélectrique. L'introduction d'atomes d'azote (N) dans le SiC étant une procédure simple et bien maîtrisée expérimentalement, nous avons opté pour un dopage de ce type. Les interactions entre le SiC et les atomes dopants seront décrites par le potentiel de Tersoff. Le tableau 3-1, récence la paramétrisation du potentiel de Tersoff pour les liaisons atomiques N-N, Si-N et C-N. La concentration en atome dopant est donnée par la relation :

$$n_{at} = \frac{N_{dop}}{V} [cm^{-3}] \quad 3.37$$

Où N_{dop} est le nombre d'atomes dopants et V le volume du système. Le modèle de Drude défini précédemment (relation 2.26) nécessite de connaître la concentration électronique. Cette dernière peut être calculée à partir de la relation la liant à la concentration en atomes dopants et aux charges effectives des atomes.

$$n_e = |(e_{sub} - e_{dop})| \times n_{at} \quad 3.38$$

Où e_{sub} est la charge effective de l'atome substitué par l'atome dopant et e_{dop} la charge effective de l'atome dopant. La charge effective de l'azote est récupérée des travaux de Drissi et El Yahyaoui (Drissi et El Yahyaoui 2017). Les caractéristiques physiques des atomes dopants du SiC évaluées par DM ab-initio sont répertoriées dans le tableau 3-9.

Tableau 3-9 : Caractéristiques physiques évaluées par DM ab-initio des atomes de substitution dans le SiC : d correspond à la distance de liaison entre l'atome substitué et ses premiers voisins, E_B est l'énergie de liaison et E_g l'énergie de gap, T_c est la température de Curie, q correspond à la charge effective (la charge négative indique l'apport d'électron et la charge positive indique l'apport de trou).

Atome dopant	d [Å]	E_B [eV]	E_g [eV]	T_c [K]	q [e]
Azote (N)	1.75	-4.33	2.60	280.84	-1.70
Aluminium (Al)	1.90	-1.51	2.32	110.04	0.08

3.2.3.1 Etude de convergence

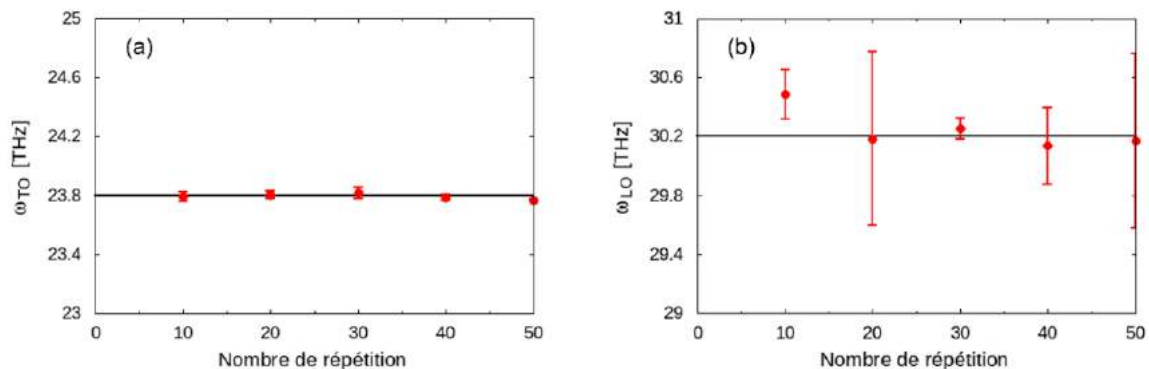
Dans cette section, nous présenterons pour une densité électronique de $5.78 \times 10^{18} \text{cm}^{-3}$, une étude de convergence des paramètres du modèle de Lorentz avec la taille de la boîte de simulation simulée. Le tableau 3-10 recense les différentes tailles de boîte étudiées et le nombre d'atomes à substituer pour satisfaire à la concentration électronique fixée. Le protocole des simulations de DM est le suivant :

1. Mise en place de la boîte de simulation.
2. Substitution d'un nombre N_{dop} d'atome C par des atomes N pour atteindre la concentration électronique désirée.
3. Mise à l'équilibre du système à la température de consigne pendant 30 *ps*.
4. Acquisition des mesures dans l'ensemble microcanonique pendant 90 *ps*.

Tableau 3-10 : Dimensions et volumes des boîtes de simulations, nombre d'atome substitué satisfaisant une concentration électronique de $5.78 \times 10^{18} \text{cm}^{-3}$.

Échantillon	Dimension	Volume [$\text{\AA}^3$]	N_{dop}	N_{tot}
1	10x10x10	8.647×10^4	1	8000
2	20x20x20	6.917×10^5	8	64000
3	30x30x30	2.335×10^6	27	216000
4	40x40x40	5.534×10^6	64	512000
5	50x50x50	1.081×10^7	125	1000000
6	60x60x60	1.868×10^7	216	1728000
7	70x70x70	2.966×10^7	343	2744000

Les résultats présentés sur les [figures 3-22-\[a-c\]](#) montrent que les paramètres de Lorentz ne varient pas avec le volume de la boîte. Cette étude montre que la fonction diélectrique évaluée pour une concentration électronique donnée ne varie pas avec le volume de la boîte de simulation choisie. Cette information indique qu'il nous est possible de réaliser des simulations de système faiblement dopé à condition d'avoir un volume suffisamment grand.



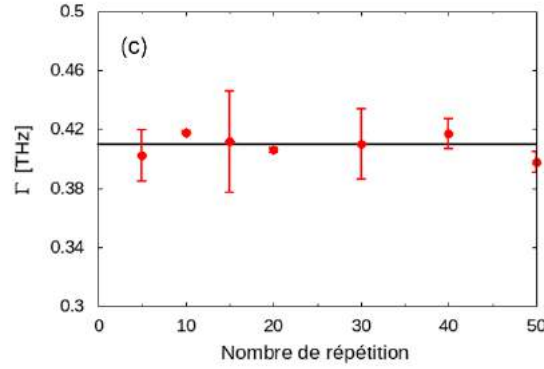


Figure 3-22 : Paramètres de Lorentz en fonction du volume de la boîte de simulation, mode TO (a), mode LO (b) et coefficient d'amortissement (c). Système dopé à l'azote avec une concentration électronique de $5.78 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ thermostaté à 300 K.

3.2.3.2 Fonction diélectrique en fonction du dopage à 300 K

Cette étude a été réalisée sur sept échantillons dans une boîte de dimension 70x70x70. Le tableau 3-11 recense les densités électroniques des différents échantillons étudiés. Les simulations ont été réalisées en suivant le protocole suivant :

1. Mise en place de la boîte de simulation de dimension 70x70x70 du système 3C-SiC.
2. Substitution d'un nombre N_{dop} d'atome C par des atomes N pour atteindre la concentration électronique désirée.
3. Application d'un ensemble nvt à 300 K pendant 30 ps.
4. Application d'un ensemble nve pendant 120 ps.

Les points expérimentaux sont issus des travaux de Yugami et de ses collaborateurs (Yugami et al. 1987). Nous avons préféré pour cette étude évaluer les paramètres du modèle de Lorentz en nombre d'onde, car la sensibilité du dopage y est plus visible.

Tableau 3-11 : Caractéristiques des échantillons dopés.

Échantillon	$n_e [\text{cm}^{-3}]$	$n_{at} [\text{cm}^{-3}]$	N_{dop}
1	9.00×10^{17}	1.80×10^{18}	53
2	2.00×10^{18}	4.00×10^{18}	119
3	4.00×10^{18}	8.00×10^{18}	237
4	5.78×10^{18}	1.16×10^{19}	343
5	1.00×10^{19}	2.00×10^{19}	593
6	1.50×10^{19}	3.00×10^{19}	890
7	5.00×10^{19}	1.00×10^{20}	2966

La [figure 3-23-a](#) montre un bon accord entre les valeurs simulées et celles de l'expérience. Comme l'expérience le confirme, la fréquence du mode TO n'évolue pas avec le dopage.

Le dopage d'un matériau semi-conducteur peut entraîner une interaction entre les plasmons et les phonons LO (Elliott 2005; Jacoboni et Lugli 1989; Kimoto et Cooper 2014). En effet, de même que les modes LO, les plasmons peuvent générer un champ électrique macroscopique capable de se coupler à celui généré par les modes LO. Le couplage entre un plasmon et un phonon LO crée de nouveaux modes de vibration qui présentent un caractère mixte avec des dominances plasmons ou phonons en fonction de la densité des porteurs de charges libres. Ces modes de couplages sont appelés mode LOPC (de l'anglais Longitudinal Optical mode and Plasmon Coupling).

Le mode LOPC du SiC a été intensivement étudié dans la littérature, soit par spectroscopie RAMAN (Chafai et al. 2001; Harima et al. 1995; Nakashima et al. 2004, 2005, 2008; Narita et al. 2004; Yugami et al. 1987), soit par spectroscopie infrarouge (Sunkari et al. 2005).

La [figure 3-23-b](#) montre un bon accord entre la simulation et l'expérience. Cet accord indique que la méthodologie que nous avons employée, utilisant des charges effectives pour le calcul de densité de courant par la DM, permet de reproduire l'effet de l'interaction entre les plasmons et les modes LO. Pour mémoire les charges effectives de Si et C sont définies dans le tableau 3-3 et valent respectivement $1.201e^-$ et $-1.201e^-$, et la charge de l'azote définie dans le tableau 3-9 vaut $-1.7e^-$. Notre méthode a cependant une limite de validité, car nous constatons un décrochage entre nos simulations et la tendance attendue par l'expérience. L'étude du dopage du 3C-SiC par DM classique ne peut excéder une concentration électronique limite de $5.78 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$.

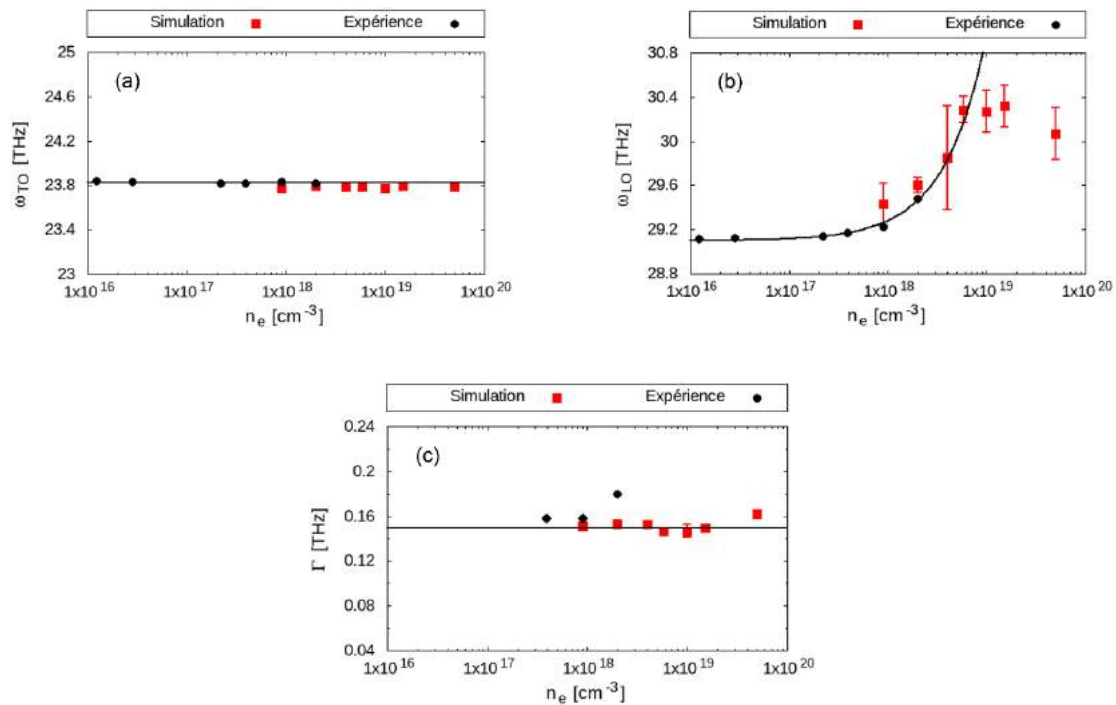


Figure 3-23 : Paramètre de Lorentz à 300 K en fonction du dopage, mode TO (a), mode LO (b) et coefficient d'amortissement (c). Les points noirs correspondent aux données expérimentales, les rouges aux simulations, le trait noir correspond à la tendance d'évolution obtenue expérimentalement.

3.2.3.3 Paramètre de Lorentz en fonction du dopage et de la température

L'échantillon dopé présente un comportement identique à celui observé avec l'échantillon non dopé. Les fréquences optiques diminuent avec la température alors que le coefficient d'amortissement augmente avec celle-ci ([figures 3-24-\[a-b\]](#)).

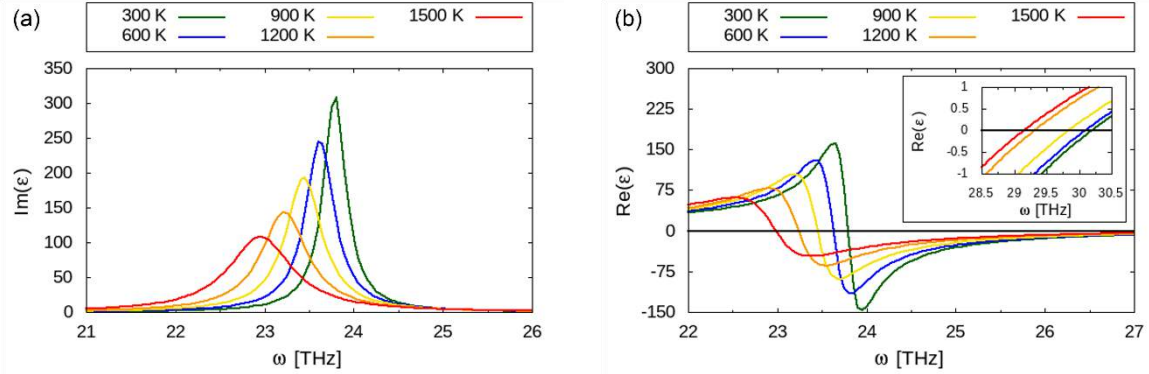


Figure 3-24 : Partie imaginaire (a) et partie réelle (b) de la fonction diélectrique calculée pour SiC 3C dopé ($n_e = 5,78 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$).

Les [figures 3-25-\[a-c\]](#) montrent que le dopage n'a pas réelle effet sur les paramètres de Lorentz. En effet on constate que les courbes se superposent avec une marge d'erreur de quelque dixième de THz pour une température donnée. Cette première observation indique que la fonction diélectrique IR n'est pas affectée par le dopage chimique dans cette gamme de concentration électronique (du non dopé à $5.78 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$)

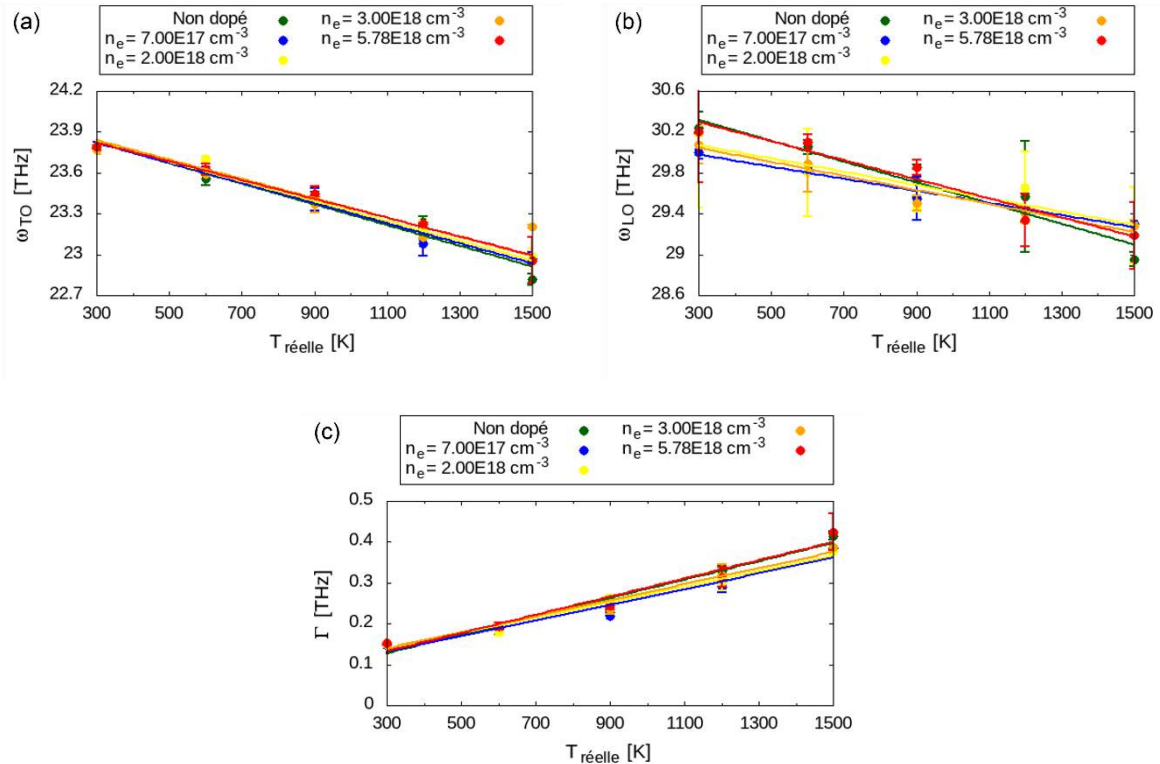


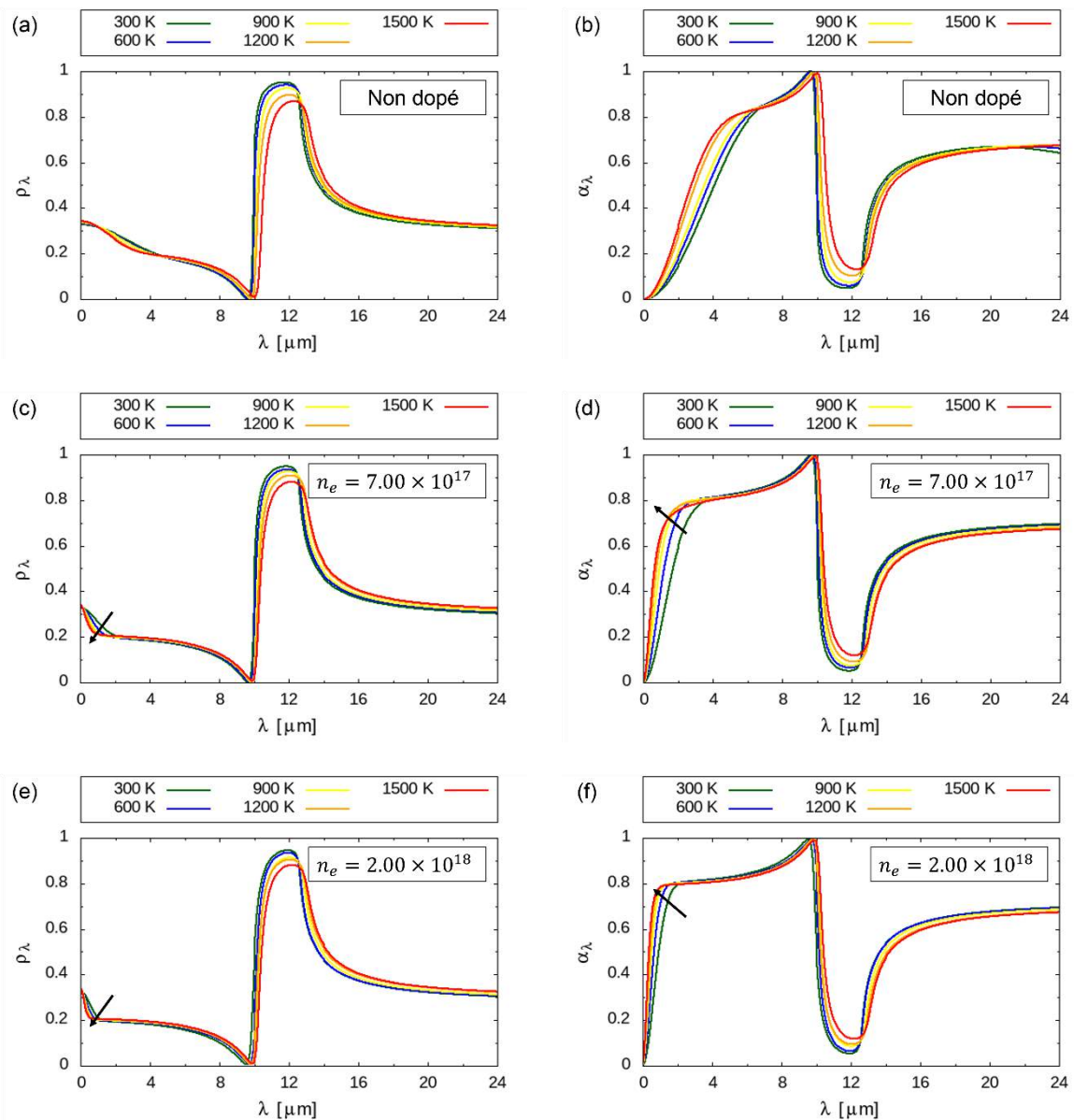
Figure 3-25 : Evolution des paramètres du modèle de Lorentz en fonction de la température et du dopage, mode TO(a), mode LO (b) et coefficient d'amortissement (c).

3.2.4 Absorptivité et émissivité du 3C-SiC

3.2.4.1 Spectre de réflectance et d'absorptance

Les [figures 3-26-\[a-i\]](#) correspondent aux spectres de réflectance et d'absorptance en fonction de la température et de la longueur d'onde des différents échantillons de SiC 3C étudiés. Les résultats indiquent que l'augmentation de la température entraîne une diminution de la réflectivité et une augmentation de l'absorptivité dans le domaine du visible et de l'infrarouge.

L'échantillon non dopé présente une réflectance quasi nulle dans le domaine du visible ([figure 3-26-b](#)). Cette dernière augmente au fur et à mesure que le dopage du SiC est important. Par opposition, on observe une diminution de la réflectance dans le domaine du visible pour les échantillons dopés. Ces résultats semblent indiquer que le dopage permet d'améliorer l'absorptivité hémisphérique du SiC dans le domaine du visible.



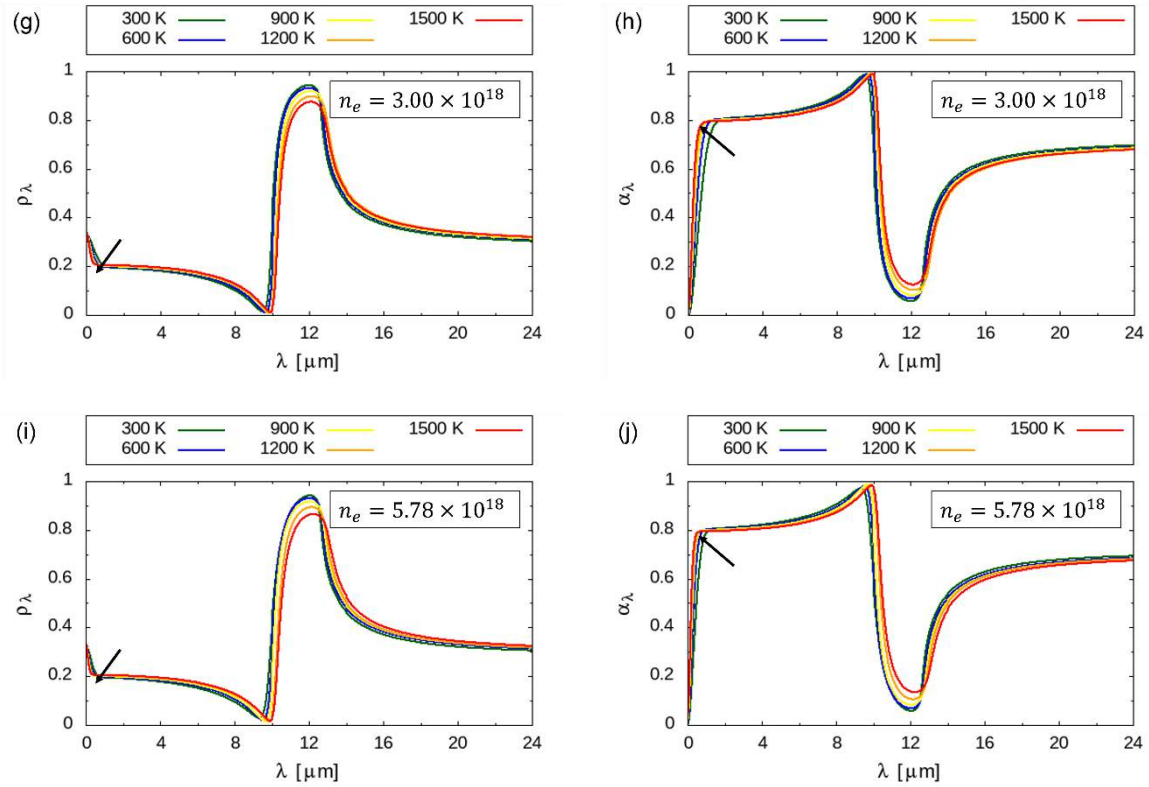


Figure 3-26 : Spectre de réflectance (a, c, e, g et i) et d'absorptance (b, d, f, h et i) obtenus pour le SiC 3C à différentes températures et pour différents niveaux de dopage.

3.2.4.2 Emissivité et absorptivité hémisphérique

Les figures 3-27-[a-b] correspondent respectivement aux évolutions de l'émissivité et absorptivité hémisphérique en fonction de la température et du dopage. On constate que l'échantillon non dopé présente une émissivité hémisphérique plus faible que les échantillons dopés (figure 3-27-a). Les courbes d'émissivité des échantillons dopés se confondent. Ces résultats indiquent que le dopage dans une gamme de concentration comprise entre 7.00×10^{17} et $5.78 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ n'a pas d'effet sur l'émissivité. On note cependant que les échantillons dopés présentent une absorptivité dans le domaine du visible plus importante que l'échantillon non dopé (figure 3-27-b). L'échantillon fortement dopé présente la meilleure absorptivité.

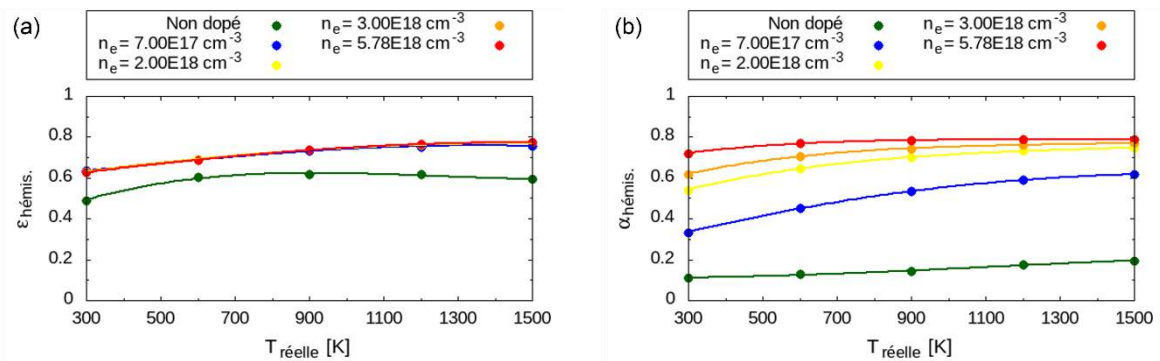


Figure 3-27 : Émissivité monochromatique (a) et absorptivité monochromatique (b) du SiC 3C en fonction du dopage et de la température.

3.3 Propriétés thermo-radiative du SiC 6H

3.3.1 Etudes préliminaires

Dans cette section, nous allons présenter les résultats de simulations menées sur des structures 6H-SiC destinées à valider la démarche suivie précédemment et à vérifier la stabilité des systèmes.

3.3.1.1 Structure cristallographique et paramètres de maille

La structure SiC 6H est une structure anisotrope. Le paramètre de maille suivant l'axe $\vec{z}$ est différent du paramètre de maille suivant les axes $\vec{x}$ et $\vec{y}$ (figures 3-28-[a-b]). Par convention, le paramètre de maille associé à l'axe $\vec{z}$ est nommé c et celui perpendiculaire à l'axe $\vec{z}$ est nommé a .

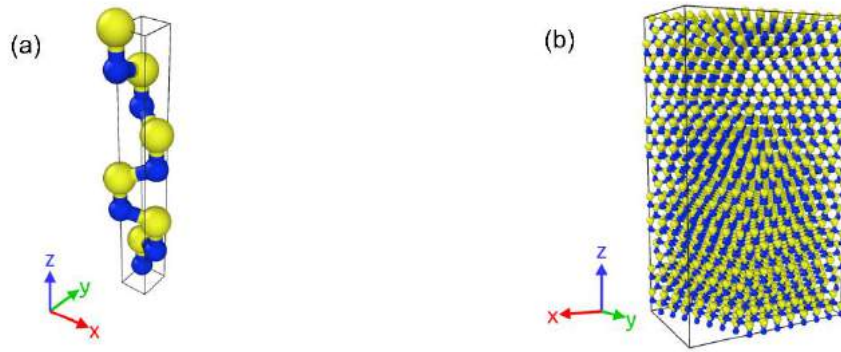


Figure 3-28 : Image de la maille conventionnelle de la structure SiC 6H (a) et d'une boîte de dimension 8x8x4 (b).

Les figures 3-29-[a-b] montrent l'évolution de l'énergie atomique du système en fonction des paramètres de maille de la structure SiC 6H lors de la minimisation de l'énergie du système. Les résultats indiquent que les paramètres de maille dont l'énergie est minimisée valent respectivement 3.07 Å et 15.1 Å. Ces résultats sont accords avec les résultats expérimentaux données par Feitknecht (Feitknecht 1971), où les paramètres de maille valent respectivement 3.073 Å et 15.118 Å.

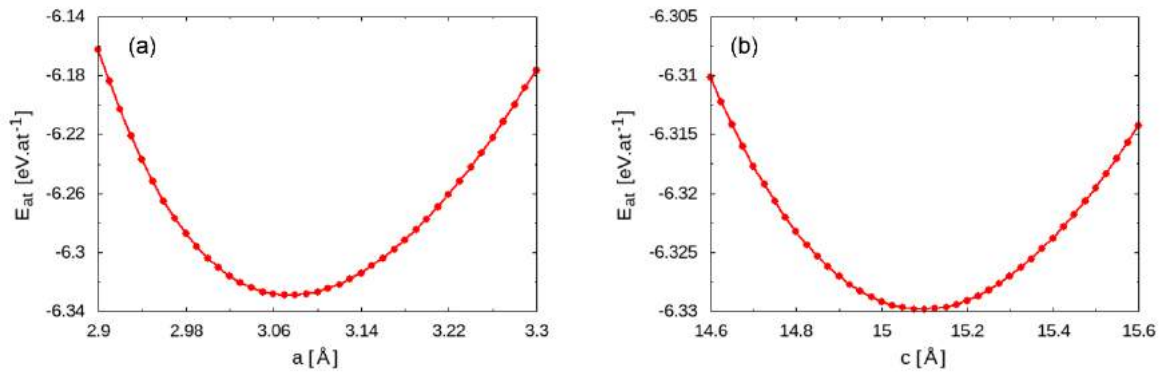


Figure 3-29 : Minimisation de l'énergie du système, paramètres de maille a (a) et c (b).

3.3.1.2 Dispersion des phonons et convergence des résultats

Nous avons évalué la convergence des résultats des courbes de dispersion des phonons du SiC 6H, afin de déterminer la taille de boîte minimum permettant de bien évaluer les modes optiques. Pour ce faire, nous avons simulé les courbes de dispersion des phonons de différentes boîtes de simulation. La superposition des courbes de dispersion des phonons ([figure 3-30](#)) indique que les résultats convergent à partir d'une boîte de dimension 4x4x2.

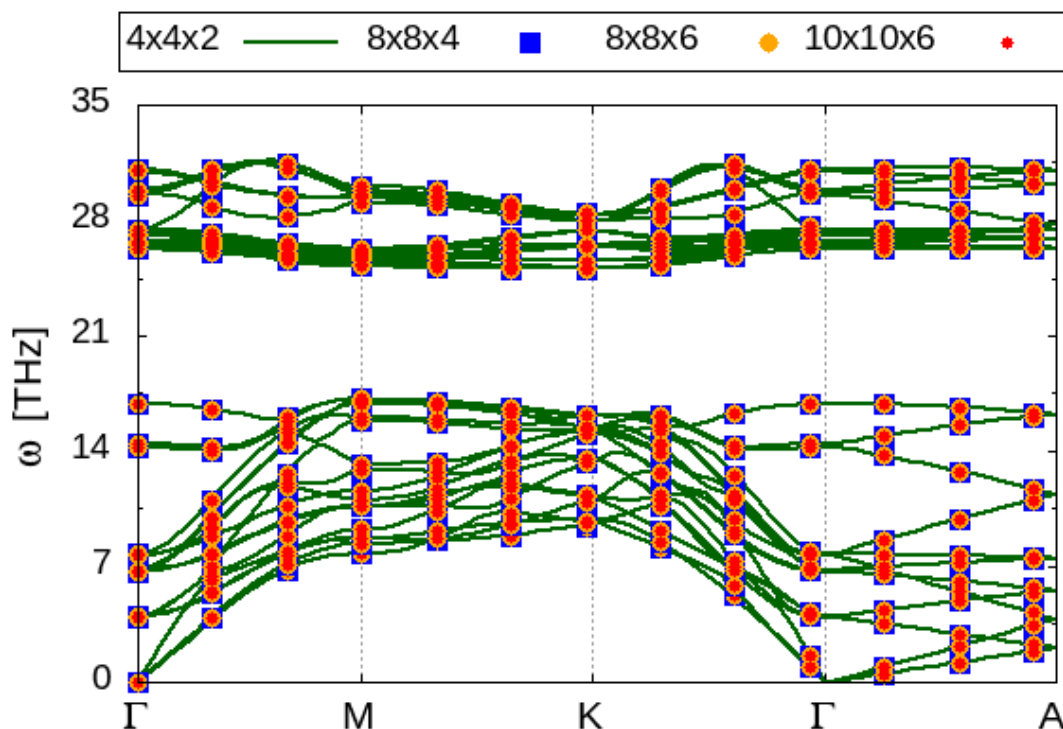


Figure 3-30 : Courbes de dispersion des phonons harmoniques pour un système SiC 6H de différentes dimensions.

3.3.1.3 Conservation de l'énergie et dispersion des phonons

La [figure 3-31-a](#) montre que le système 6H-SiC simulé avec le potentiel de Vashishta est stable puisque l'énergie du système est bien conservée dans l'ensemble microcanonique.

Les courbes de dispersion des phonons (figures [3-31-b](#) et [3-32-b](#)) simulées par DM ab-initio sont issues des travaux de Protik et de ses collaborateurs (Protik et al. 2017) et les points expérimentaux des travaux de Dorner et de ses collaborateurs (Dorner et al. 1998).

Les courbes de dispersion des phonons issues de nos simulations surestiment la fréquence des modes optiques ([figure 3-32-b](#)). Pour cette étude, nous avons utilisé les paramètres de maille calculés avec la minimisation de l'énergie du système. Il nous faut donc déterminer les paramètres de maille qui vont permettre de recalibrer les branches optiques à de meilleures fréquences.

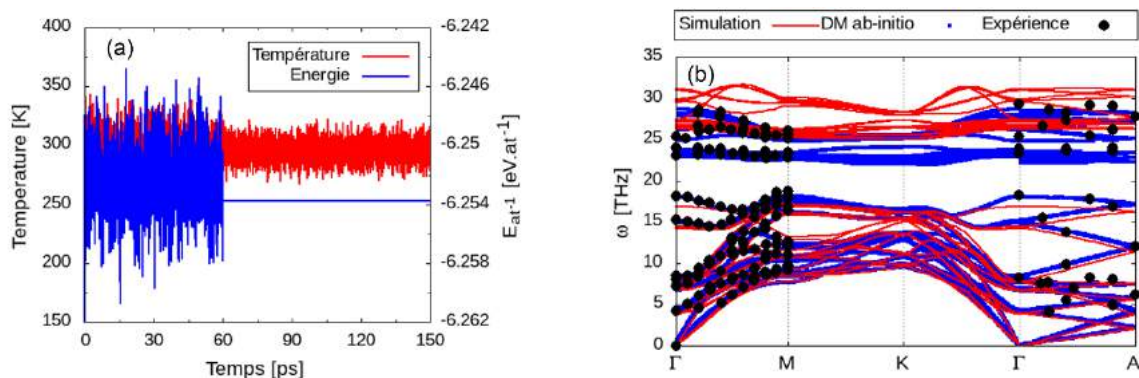


Figure 3-31 : (a) Profil de température (rouge) et d'énergie (bleu) du système. Courbes de dispersion des phonons harmoniques simulées (rouges), issues de la littérature par la DM ab-initio (bleus), expérimentales (points noirs).

3.3.1.4 Optimisation de la structure

La [figure 3-32-b](#) montre que la modification des paramètres de maille permet de recaler correctement les branches optiques aux bonnes fréquences. Les nouveaux paramètres de maille de la structure valent respectivement 3.1314Å et 15.3639Å. Les erreurs relatives de ces nouveaux paramètres de mailles par rapport aux paramètres précédents sont estimées respectivement à 2% et à 1.7%. On note aussi que le nouveau système présente une bonne stabilité avec une énergie bien conservée dans l'ensemble microcanonique ([figure 3-32-a](#)).

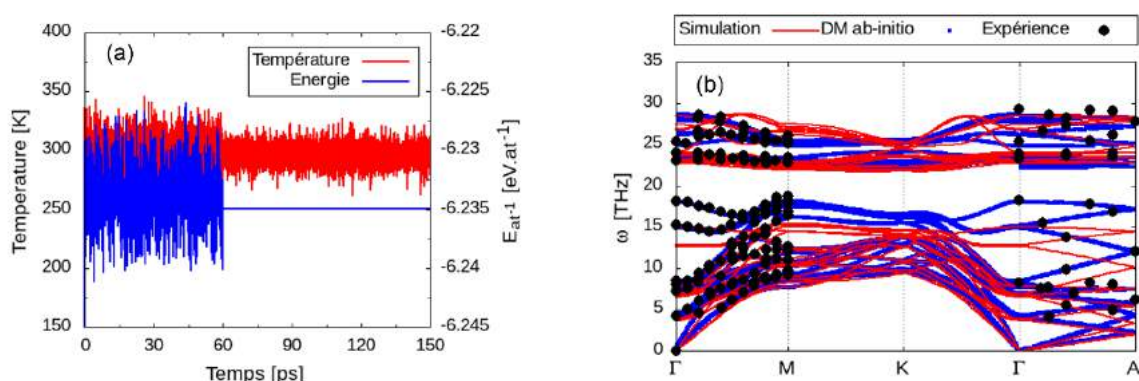


Figure 3-32 : (a) Profil de température (rouge) et d'énergie (bleu) du système. (b) Courbes de dispersion des phonons harmoniques simulées (rouges), issues de la littérature par la DM ab-initio (bleus), expérimentales (points noirs).

3.3.1.5 Densité d'état phononique et température de correction

La [figure 3-33-a](#) correspond à la comparaison entre la DOS évaluée pour le SiC 3C et celle évaluée pour le SiC 6H. On note que les courbes se superposent quasiment totalement, la seule différence c'est que les modes optiques du SiC 6H sont légèrement vers les faibles fréquences. Ce comportement a aussi été observé expérimentalement (Feng 2004).

Les DOS étant relativement identiques, il en vient que la correction à apporter à la température de simulation pour une température donnée est la même pour les deux structures ([figure 3-33-b](#)).

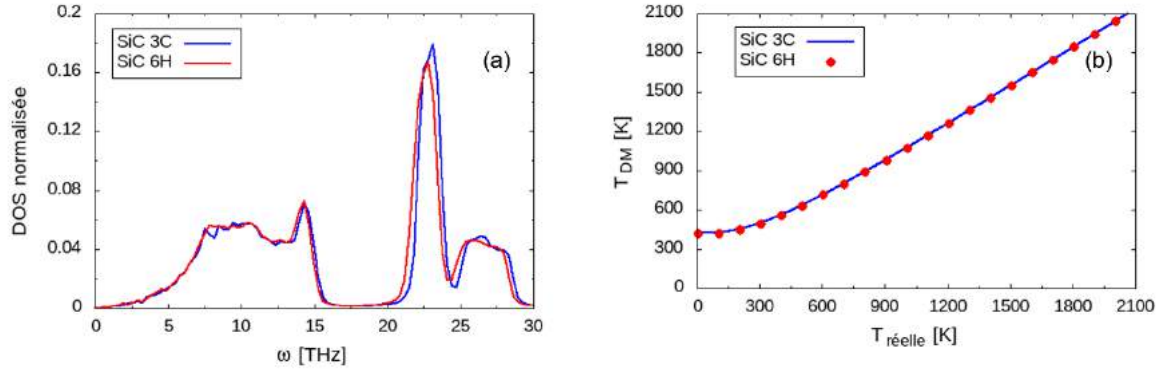


Figure 3-33 : Densité d'état phononique (a) et correction de la température de simulation par rapport à la température réelle (b).

3.3.2 Fonction diélectrique en fonction du dopage et de la température

La structure 6H-SiC étant anisotrope, la fonction diélectrique se compose d'une partie perpendiculaire et d'une partie parallèle à l'axe $\vec{z}$:

$$\varepsilon_{\perp,\parallel}(\omega) = \varepsilon_{\perp,\parallel}^{\infty} \left[1 + \frac{\omega_{\perp,\parallel}^2 - \omega_{(TO)\perp,\parallel}^2}{\omega_{(TO)\perp,\parallel}^2 - \omega^2 - \Gamma_{\perp,\parallel} j \omega} \right] \quad 3.39$$

Les valeurs des constantes diélectriques à haute fréquence de la structure SiC 6H perpendiculaire et parallèle à l'axe c valent respectivement 6.52 et 6.7 (Patrick 1968). Dans notre étude, nous n'évaluerons que la partie perpendiculaire à l'axe z . Nous justifions ce choix par le fait que dans les mousses de SiC faisant office d'absorbeur volumique, les interactions faisceau-matière ont lieu principalement suivant l'axe perpendiculaire à l'axe z . De plus, les mesures expérimentales du dopage du SiC 6H ont été réalisées sur la partie perpendiculaire. Contrairement au SiC 3C, la fonction diélectrique du SiC 6H est moyennée que suivant deux directions de l'espace .

3.3.2.1 Étude de convergence

L'étude de convergence a été réalisée sur cinq échantillons dont les dimensions sont données dans le tableau 3-12. Les simulations ont été réalisées suivant le protocole ci-dessous :

1. Mise en place de la boîte de simulation.
2. Mise à l'équilibre du système par un thermostat à la température de consigne pendant 30 *ps*.
3. Enregistrement des densités de courant dans un ensemble microcanonique pendant 90 *ps*.

Tableau 3-12 : Dimension et volume des échantillons étudiés.

Échantillon	Dimension	Volume [$\text{\AA}^3$]	Nombre d'atome
1	12x12x4	86776	6912
2	20x20x6	361568	28800
3	40x40x10	2410452	192000
4	60x60x20	10847036	864000
5	80x80x20	19283619	1536000

Les résultats présentés dans les [figures 3-34-\[a-c\]](#) indiquent que le volume de la boîte de simulation n'a pas d'effet sur les fréquences des modes optiques et du coefficient d'amortissement. En effet, on observe que les fréquences des paramètres de Lorentz des différents échantillons fluctuent des mêmes valeurs.

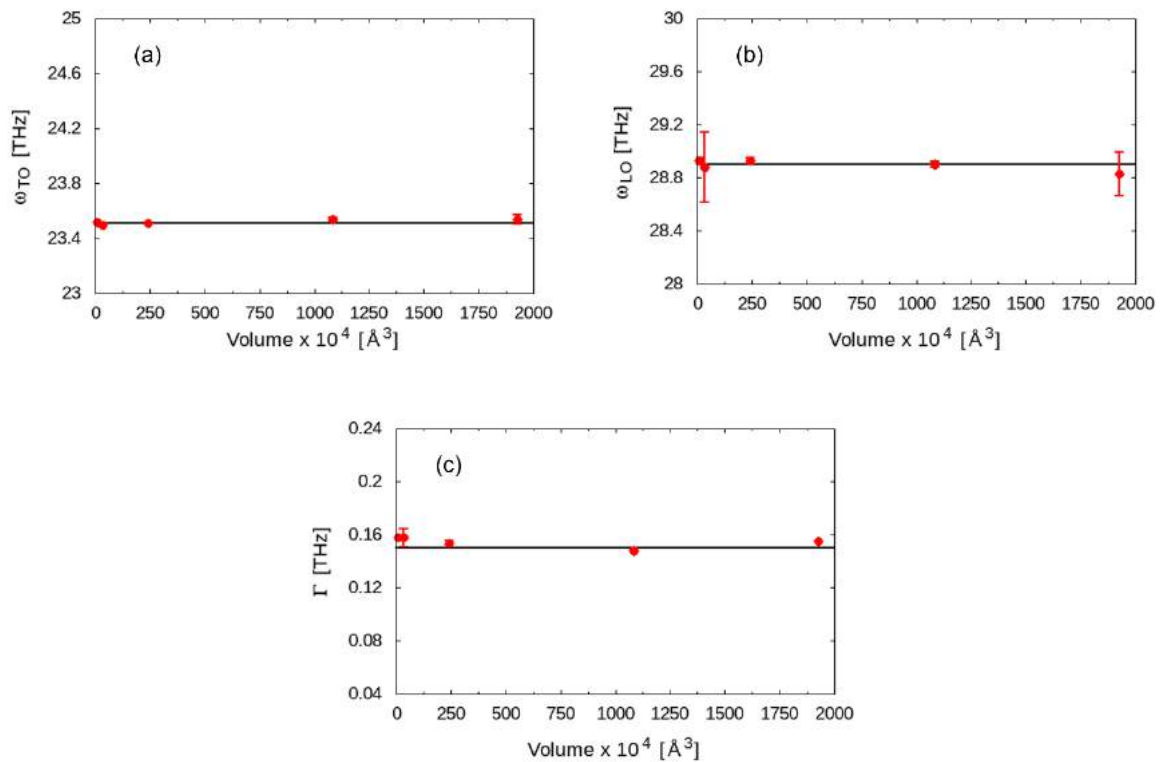


Figure 3-34 : Paramètres de Lorentz en fonction du volume de la boîte de simulation, mode TO (a), mode LO (b) et coefficient d'amortissement (c).

3.3.2.2 Fonction diélectrique en fonction de la température

Les [figures 3-35-\[a-b\]](#) correspondent respectivement à la partie imaginaire et réelle de la fonction diélectrique du SiC 6H non dopé évaluée à différentes températures. Comme pour le cas du SiC 3C non-dopé et dopé, l'intensité du pic de la partie imaginaire de la fonction diélectrique s'atténue au fur et à mesure que la température augmente. De même, les fréquences transverse et longitudinale diminuent avec la température.

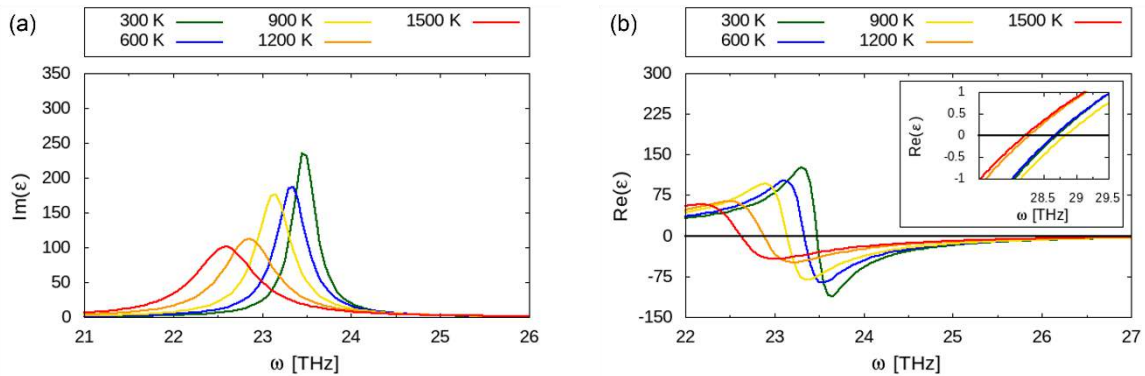
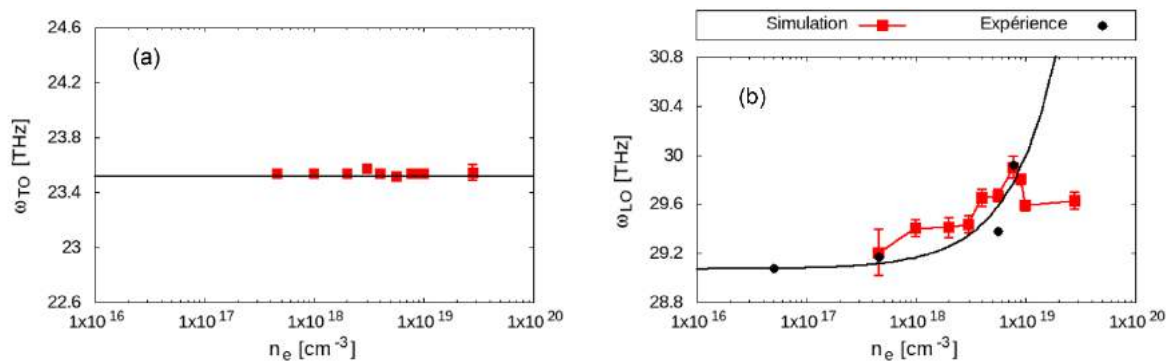


Figure 3-35 : Partie imaginaire (a) et partie réelle (b) de la fonction diélectrique calculée pour le SiC 6H non dopé.

3.3.2.3 Paramètre de Lorentz en fonction du dopage à 300K

Les points expérimentaux présentés sur la sont issus des travaux de Harima et Nakashima et leurs collaborateurs (Harima et al. 1995; Nakashima et al. 2004). Tout comme le cas du SiC 3C, la fréquence transverse optique ne varie pas avec le dopage. Il en va de même en ce qui concerne le coefficient d'amortissement, sa valeur ne varie pas avec la concentration électronique.

La [figure 3-36-b](#) montre que nos simulations reproduisent bien l'évolution de la fréquence du mode LO en fonction de la densité électronique. Cependant, on note comme pour le cas du SiC 3C un décrochage des valeurs par rapport à la tendance attendue. Ce décrochage arrive un peu plus loin pour le cas du SiC 6H par rapport au SiC 3C. Les points de décrochage respectifs des structures sont $5.78 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ et $7.70 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$. La DM classique ne permet pas d'évaluer les propriétés radiatives du SiC 6H à partir de ce point décrochage sans doute du fait des fortes interactions électron-phonon.



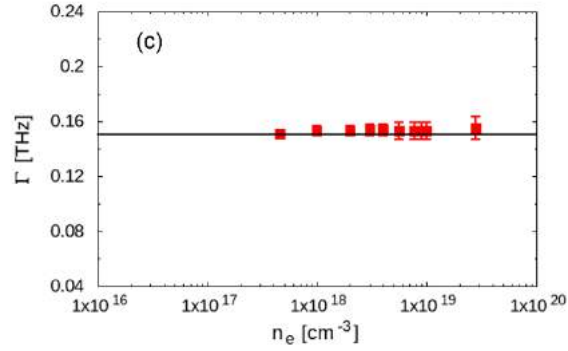


Figure 3-36 : Paramètre de Lorentz évaluée à une température réelle de 300 K en fonction du dopage, mode TO (a), mode LO (b) et coefficient d'amortissement (c).

3.3.2.4 Paramètre de Lorentz en fonction du dopage et de la température

Les figures 3-37-[a-b] montrent que les fréquences des modes TO et LO diminuent linéairement avec la température. La figure 3-37-c, elle, montre que la fréquence du coefficient d'amortissement augmente linéairement avec la température. Ces observations indiquent que le dopage du SiC 6H n'a pas d'effet sur l'évolution des paramètres de Lorentz avec la température. Le mode LO est bien plus sensible au doping (figure 3-37-b)

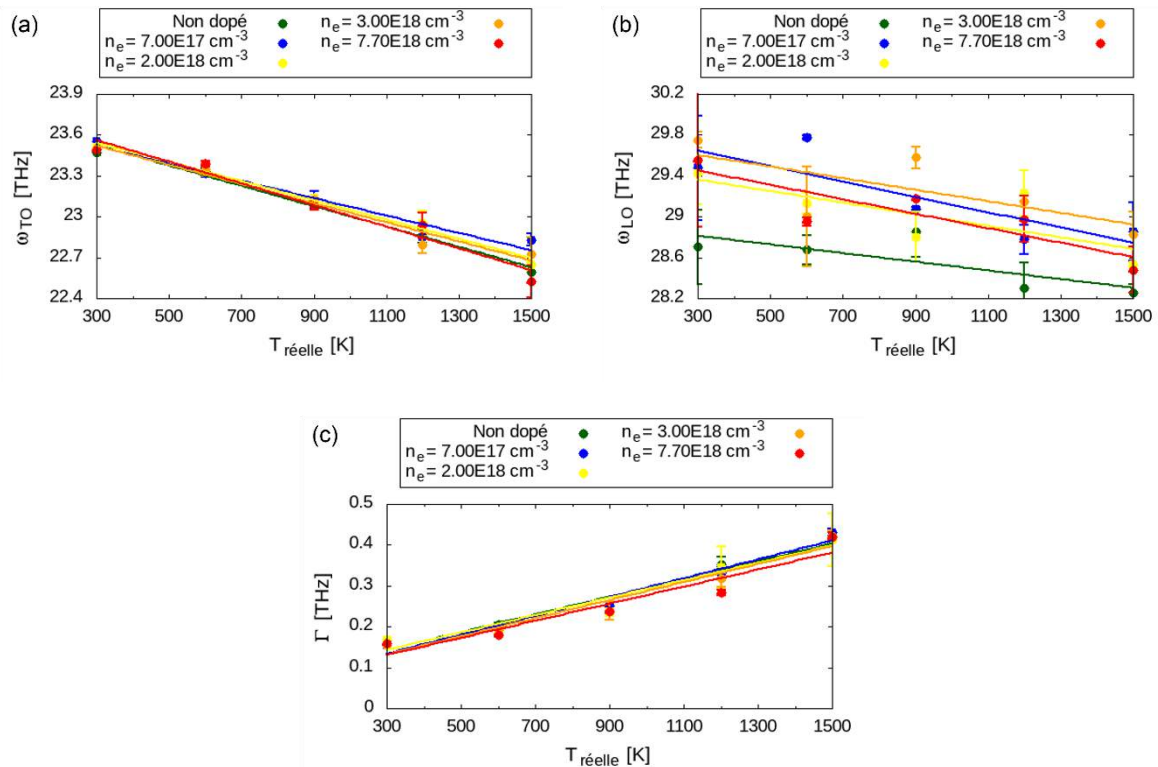
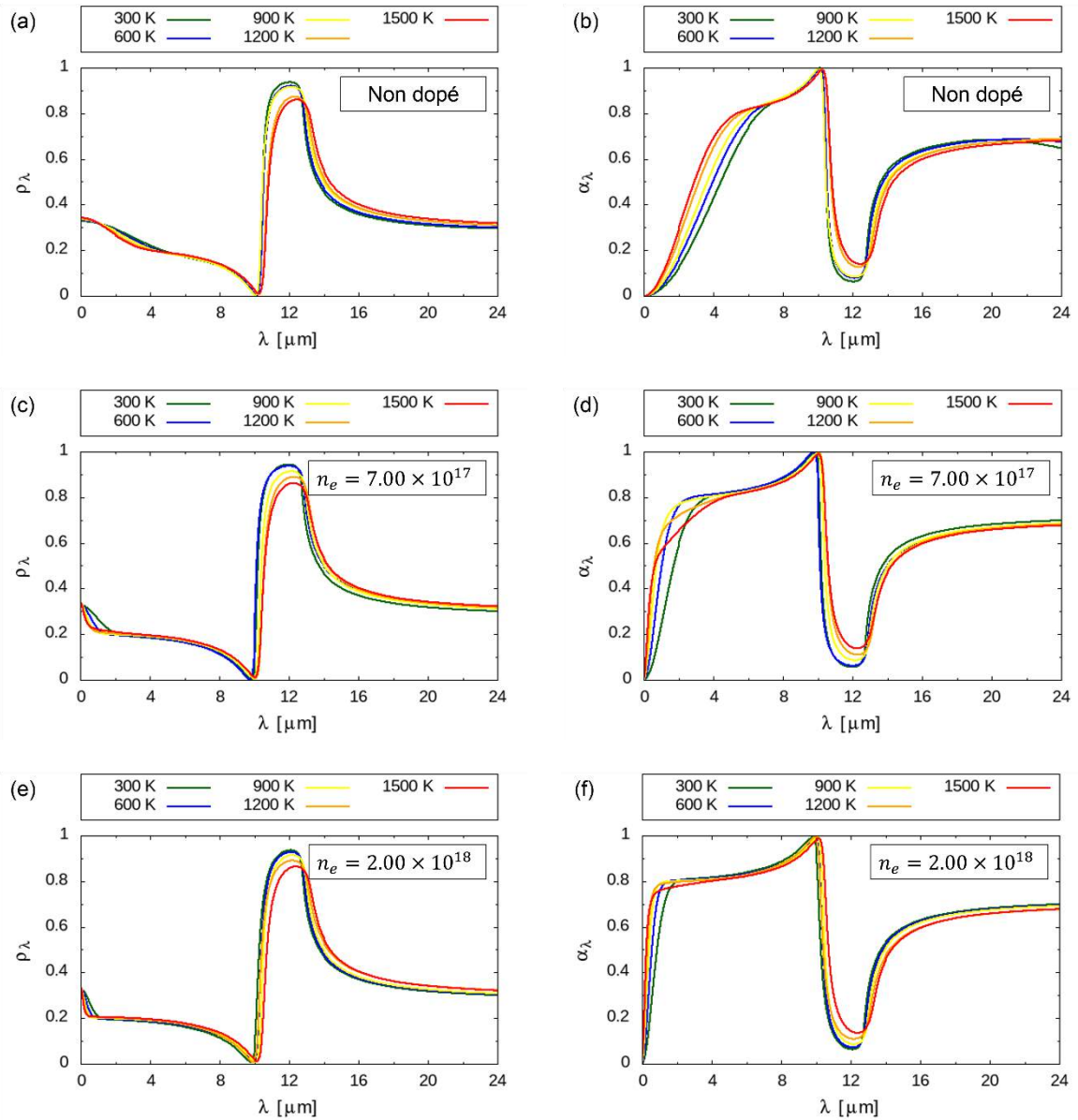


Figure 3-37 : Paramètres du modèle de Lorentz en fonction de la température et du dopage, mode TO (a), mode LO (b) et coefficient d'amortissement (c).

3.3.3 Absorptivité et émissivité du 6H-SiC

Les paramètres du modèle de Lorentz obtenues par DM nous ont permis en les combinant avec un modèle de Drude de reconstruire la fonction diélectrique sur l'ensemble du spectre. La fonction diélectrique qui en découle nous a ensuite permis de calculer les propriétés thermo-radiatives de quatre échantillons dopés.

Les résultats présentés sur les [figures 3-38-\[a-i\]](#) nous amènent aux mêmes observations que pour le 3C-SiC dopé. A savoir que le dopage du 6H-SiC ne permet que d'augmenter son absorptivité dans le domaine de visible et du proche infrarouge. Autrement dit le dopage chimique ne permet pas de moduler la sélectivité spectrale du carbure de silicium quelque soit sa structure cristallographique.



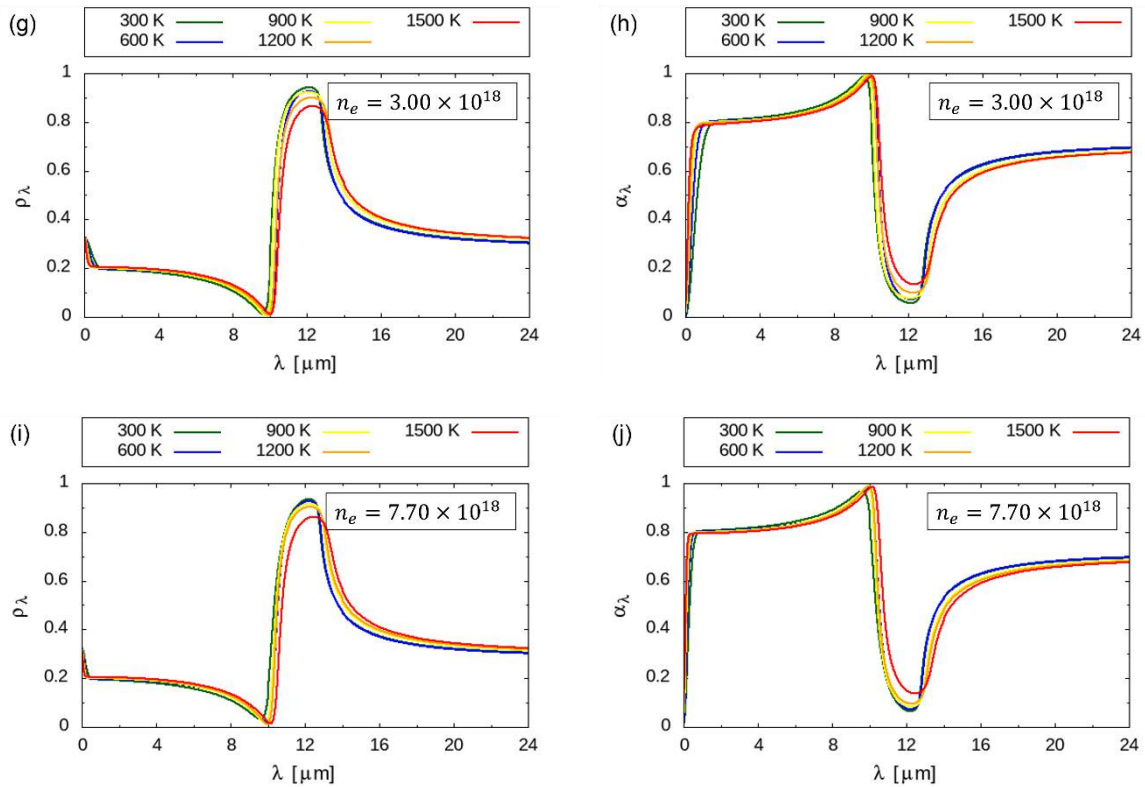


Figure 3-38 : Spectre de réflectance (a, c, e, g et i) et d'absorptance (b, d, f, h et i) obtenus pour le SiC 6H à différentes températures et pour différents niveaux de dopage.

La superposition des courbes d'émissivité des échantillons dopés (figure 3-39-a) indique que l'émissivité ne varie pas dans une gamme de concentration comprise entre 7.00×10^7 et $7.70 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$. On note cependant que l'échantillon non dopé présente une émissivité plus faible que ceux des échantillons dopés. La figure 3-39-b montre que le dopage permet de fortement moduler l'absorptivité dans le domaine du visible du SiC 6H. Il semble tout de même que la densité électronique de $7.7 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ correspond au seuil de dopage pour lequel l'absorptivité du SiC ne varie plus

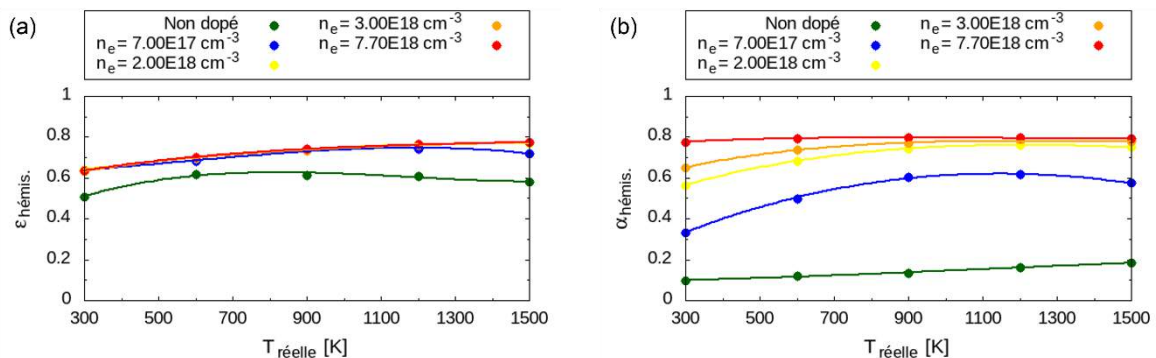


Figure 3-39 : Émissivité monochromatique (a) et absorptivité monochromatique (b) du SiC 6H en fonction du dopage et de la température.

3.4 Étude du TiC-SiC

3.4.1 Études préliminaires

Nous allons vérifier dans un premier temps que les simulations de DM sont correctement réalisées pour le composé TiC-SiC. Les interactions interatomiques sont décrites par un potentiel hybride couplant trois potentiels interatomiques. Le potentiel de Vashishta sera utilisé pour décrire les liaisons Si-Si, C-C, et Si-C se trouvant dans la matrice du SiC ([figure 3-40-c](#)). Le potentiel MEAM permettra de décrire les liaisons Ti-Ti, C-C et Ti-C des particules composant la nanoparticule de TiC ([figure 3-40-d](#)). Les liaisons à l'interface de la nanoparticule de TiC et de la matrice de SiC, seront décrites par le potentiel Lennard-Jones. Étant donné la complexité du potentiel interatomique (général), il est primordial de vérifier avant toute chose que le système simulé par DM soit stable.

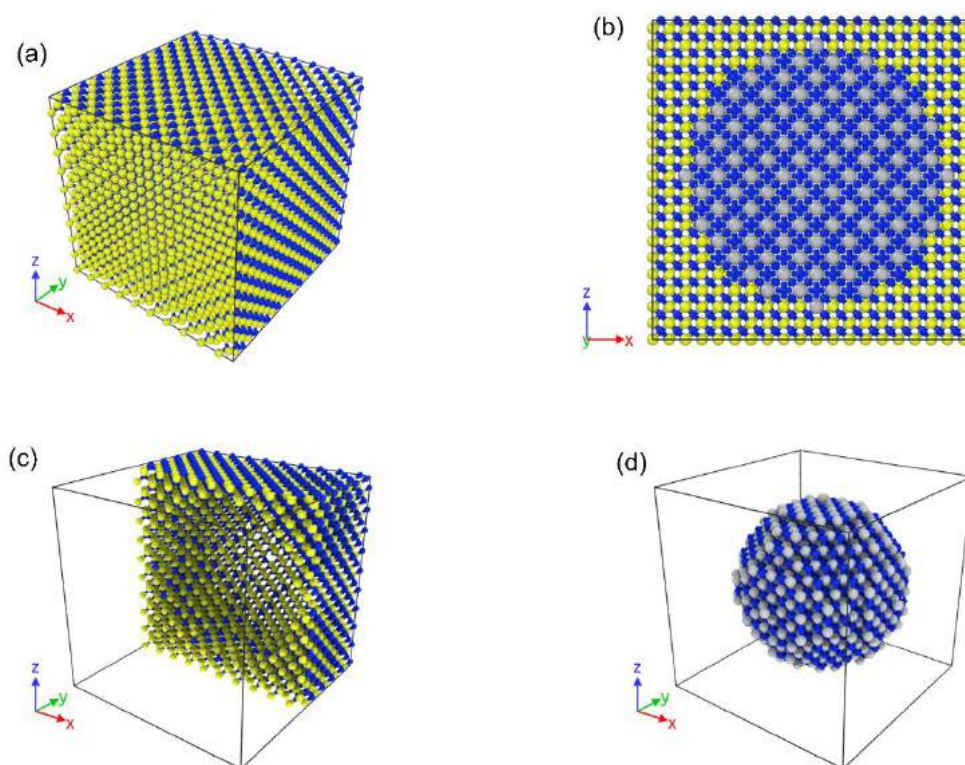


Figure 3-40 : Image de la boîte de simulation de dimension $44.2 \times 44.2 \times 44.2 \text{ \AA}^3$ (a), coupe de la boîte suivant l'axe $\hat{y}$ (b), coupe de la matrice de SiC (c), nanoparticule de TiC (d). Les sphères jaunes, bleues et grises correspondent respectivement aux atomes de silicium, de carbone et de titane

Les premières simulations ont été réalisées dans une boîte de volume $44.2 \times 44.2 \times 44.2 \text{ \AA}^3$ ([figure 3-40-a](#)). Les atomes de la matrice de SiC sont disposés selon une structure cristallographique de type Zinc-blende, les atomes de la nanoparticule de TiC sont répartis selon une structure de type NaCl. Dans un premier temps, la nanoparticule de TiC présentant la forme d'une sphère sur la [figure 3-40-d](#), a été positionnée au centre de matrice de SiC ([figure 3-40-b](#)). Nous avons procédé à différentes simulations en faisant varier le rayon de la sphère de la nanoparticule de TiC. Les simulations ont été réalisées sur cinq échantillons. L'échantillon 1, 2, 3, 4 et

5 correspondent respectivement à des rayons de 8.84, 11.05, 13.26, 15.47 et 17.68 Å. Cette étude avait pour objectif de déterminer le rayon minimum permettant d'avoir un TiC stable dans le SiC.

3.4.1.1 Conservation de l'énergie et stabilité du système

L'étude de la conservation de l'énergie a été réalisée en suivant le protocole décrit ci-dessous :

1. Mise en place de la boîte de simulation et positionnement des particules.
2. Mise à l'équilibre du système via un thermostat défini à 300 K pendant 15 ps.
3. Application d'un ensemble microcanonique pendant 60 ps.

Les [figures 3-41-\[a-b\]](#) correspondent respectivement aux échantillons 1 et 5, soit le rayon le plus petit et le rayon le plus grand. Les deux systèmes sont stables, tous deux présentent une bonne conservation de l'énergie dans l'ensemble microcanonique et une température qui fluctue autour de la température de consigne. La chute d'énergie observée sur la [figure 3-41-b](#) indique qu'il est nécessaire d'équilibrer le système plus longtemps. Cette observation implique que plus le rayon du TiC est important et plus le temps de la mise à l'équilibre doit être important.

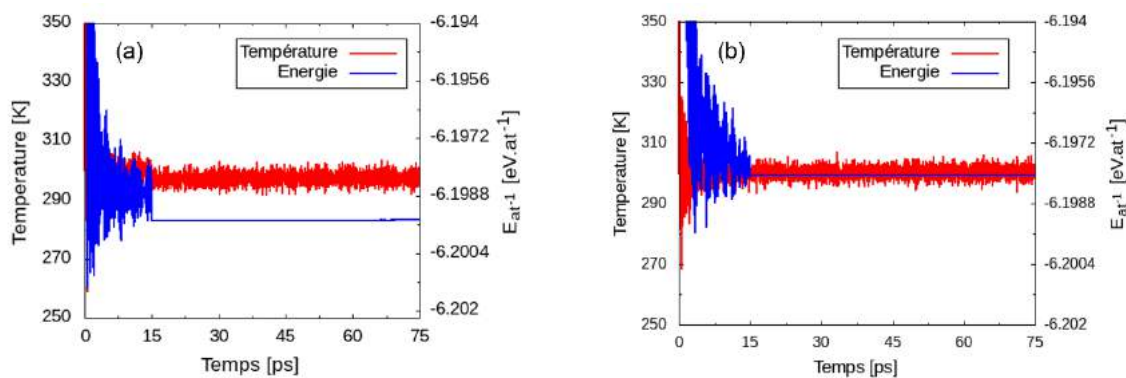


Figure 3-41 : Évolution de l'énergie atomique (bleu) et de la température (rouge) en fonction du temps pour les échantillons présentant un rayon de TiC de 8.84 Å (a) et de 17.68 Å (b).

3.4.1.2 Analyse structurale

Afin d'analyser la structure du TiC-SiC, nous avons défini sous Ovito des conditions permettant de mettre dans une certaine couleur les atomes respectant les conditions définies. La couleur rouge sur les figures correspond aux atomes qui ne respectent pas la coordination de la structure TiC ni celle du SiC. Pour les distinguer, nous avons calculé le rayon de la sphère des premiers voisins à savoir 2.21 Å pour le TiC et 1.915 Å pour le SiC. Nous avons rajouté à ces rayons, une distance permettant de prendre en compte la vibration des atomes, les faisant passer respectivement aux valeurs de 2.41 Å et 2.087 Å. Ainsi, tout atome du TiC dont la coordination dans un rayon de 2.41 Å ne vaut pas 6 sera en rouge. Il en va de même pour les atomes de SiC, tout atome dont la coordination dans un rayon de 2.087 Å ne vaut pas 4 sera en rouge.

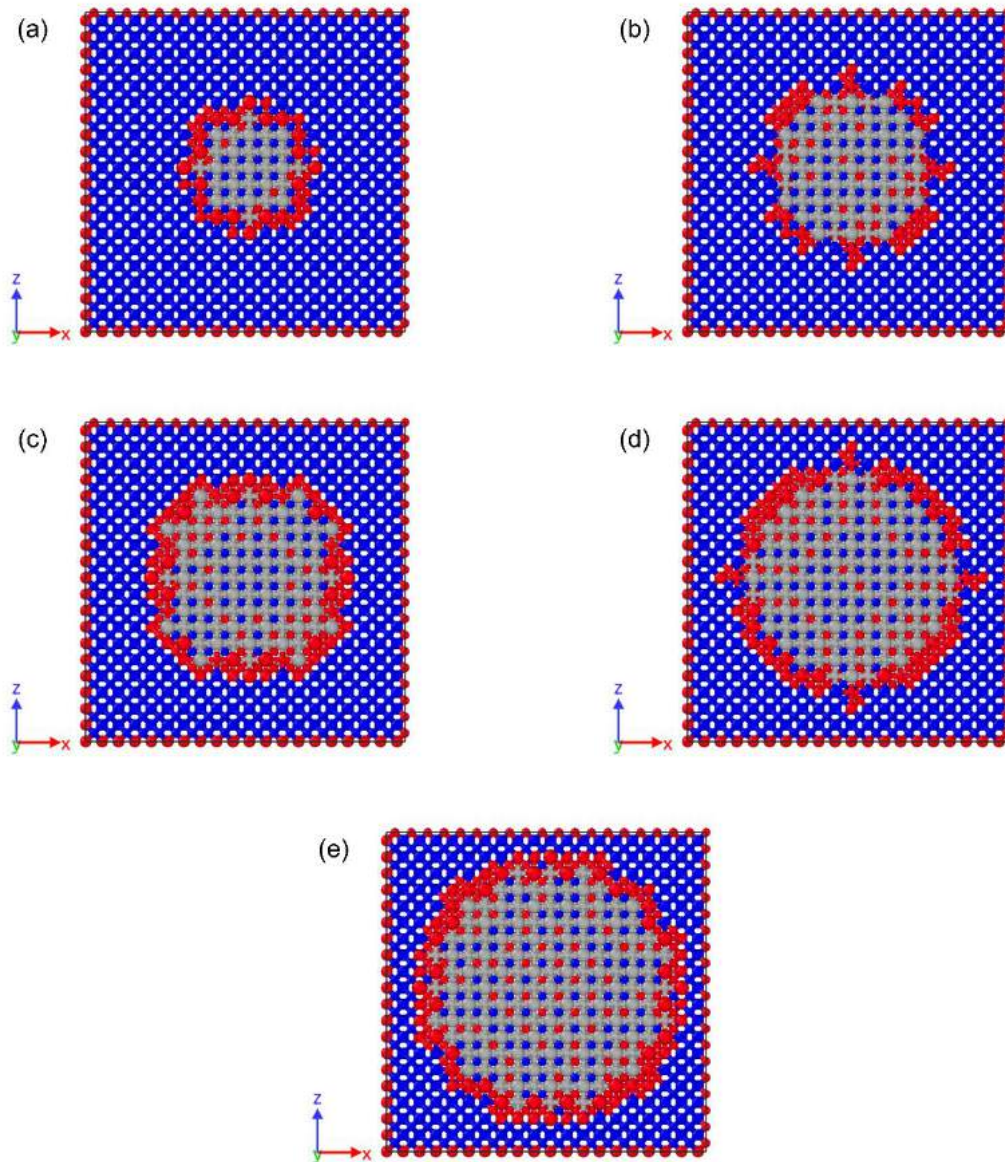


Figure 3-42 : Image de la coupe l'axe $\vec{y}$ de la boîte de simulation de l'échantillon 1 (a), de l'échantillon 2 (b), de l'échantillon 3 (c), de l'échantillon 4 (d) et de l'échantillon 5 (d) au temps zéro (initial). Les sphères bleues correspondent aux atomes de SiC respectant les conditions de coordination, les grises aux atomes de TiC respectant les conditions de coordination, les rouges aux atomes qui ne respectent aucune condition.

Les [figures 3-42-\[a-e\]](#) montrent l'arrangement des atomes dans la structure des différents échantillons au temps initial. Les atomes rouges représentent les atomes à l'interface TiC-SiC, ces derniers sont rouges justement car ils ne respectent ni la coordination du SiC, ni celle du TiC.

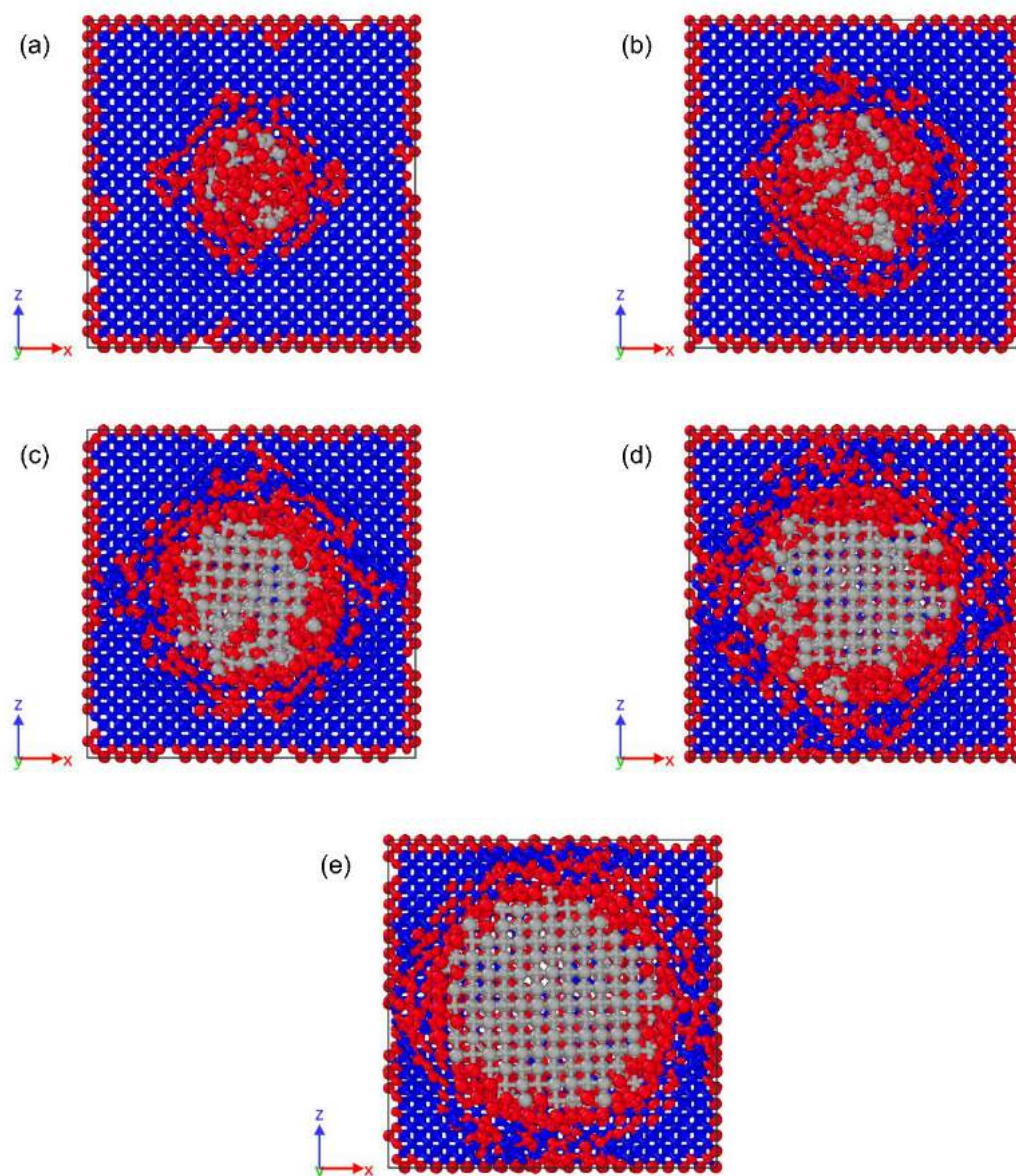


Figure 3-43 : Image de la coupe l'axe $\vec{y}$ de la boîte de simulation de l'échantillon 1 (a), de l'échantillon 2 (b), de l'échantillon 3 (c), de l'échantillon 4 (d) et de l'échantillon 5 (e) après la thermalisation à 1500 K. Les sphères bleues correspondent aux atomes de SiC respectant les conditions de coordination, les grises aux atomes de TiC respectant les conditions de coordination, les rouges aux atomes qui ne respectent aucune condition.

Les [figures 3-43-\[a-e\]](#) montrent l'état des systèmes après la mise en équilibre thermique. Nous pouvons voir que la nanoparticule de TiC est totalement détruite, laissant place à un amas amorphe dans les échantillons 1 et 2. Pour les échantillons 3, 4 et 5, nous constatons que la nanoparticule de TiC est maintenue. Cependant, pour le cas de l'échantillon 3, la partie amorphe est plus importante que la partie cristalline. Cette étude indique qu'il faut au minimum un rayon de 15.47 Å pour assurer une bonne stabilité de la nanoparticule de TiC. Pour les simulations à venir, nous garderons un rayon minimum de 17.68 Å pour assurer une bonne stabilité de la nanoparticule de TiC.

3.4.2 Effet du ratio V_{TiC}/V_{SiC}

Dans cette section, nous allons évaluer l'influence du ratio $\frac{V_{TiC}}{V_{SiC}}$ sur la DOS, la fonction diélectrique, l'absorptivité et l'émissivité. Dans une première approche, nous étudierons uniquement des échantillons ne contenant qu'une nanoparticule de forme sphérique de TiC. La modulation du ratio se fera par la variation du rayon de la nanoparticule de TiC dans une boîte de volume identique pour tous les échantillons. La boîte de simulation choisie est de dimension $114.92 \times 114.92 \times 114.92 \text{ \AA}^3$. La fonction diélectrique sera évaluée pour une température réelle de 1500 K , afin d'avoir les propriétés radiatives des échantillons à la température optimum de fonctionnement d'une centrale solaire à tour.

Les caractéristiques des différents échantillons sont répertoriées dans le tableau 3-13. Afin d'éviter la chute d'énergie pendant la phase d'équilibrage du système observé sur la [figure 3-41-b](#), nous avons modifié le protocole de simulation. Le nouveau protocole est décrit ci-dessous :

1. Mise en place de la boîte de simulation et positionnement des particules.
2. Thermalisation à 0.1 K pendant 30 ps .
3. Chauffage du système jusqu'à 300 K pendant 60 ps .
4. Thermalisation à 300 K pendant 30 ps .
5. Enregistrement des positions et vitesses des particules.
6. Application d'un ensemble microcanonique pendant 90 ps .

Tableau 3-13 : Caractéristiques des échantillons étudiés. Boîte de simulation de dimension $114.92 \times 114.92 \times 114.92 \text{ \AA}^3$.

Échantillon	Rayon [$\text{\AA}$]	Nombre d'atome total	Volume de la nanoparticule [$\text{\AA}^3$]	V_{TiC}/V_{SiC}
1	17.68	140568	23149	0.0155
2	19.89	140618	32960	0.0222
3	22.10	140542	45213	0.0307
4	26.65	140568	79283	0.0551
5	30.00	140554	113097	0.0805
6	33.00	140598	150533	0.1101
7	36.00	140672	195432	0.1478
8	40.00	140506	268083	0.2145
9	45.00	140728	381704	0.3360
10	50.00	140504	523599	0.5267

La chute d'énergie observée sur la [figure 3-44-a](#) sur les premières picosecondes de simulation est due au réarrangement des particules pour atteindre un état plus stable. La [figure 3-44-b](#) montre que ce protocole permet d'éviter la chute d'énergie à 300 K.

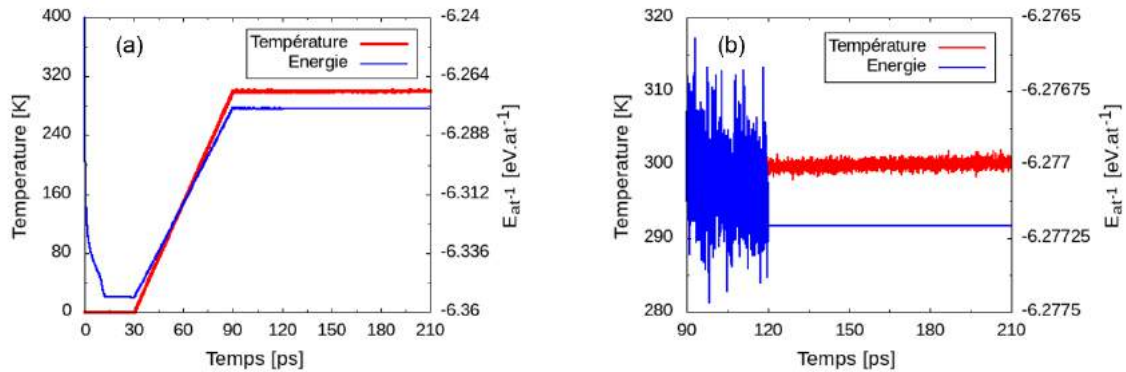


Figure 3-44 : Profil de température (rouge) et d'énergie (bleu) de l'échantillon 10 sur l'ensemble de la simulation (a), zoom sur la partie évaluée à 300 K (b).

3.4.2.1 DOS et correction de la température

Les courbes de DOS présentées sur les [figures 3-45-\[a-b\]](#) montrent que plus le rapport V_{TiC}/V_{SiC} est important et plus la DOS du système tend vers un équilibre entre la DOS du TiC et celle du SiC. En effet, le nouveau pic positionné à 19 THz correspond au pic observé pour l'étude du TiC pur. Nous notons également que l'augmentation du ratio a pour effet de déplacer les pics du SiC vers les hautes fréquences et à réduire leur amplitude.

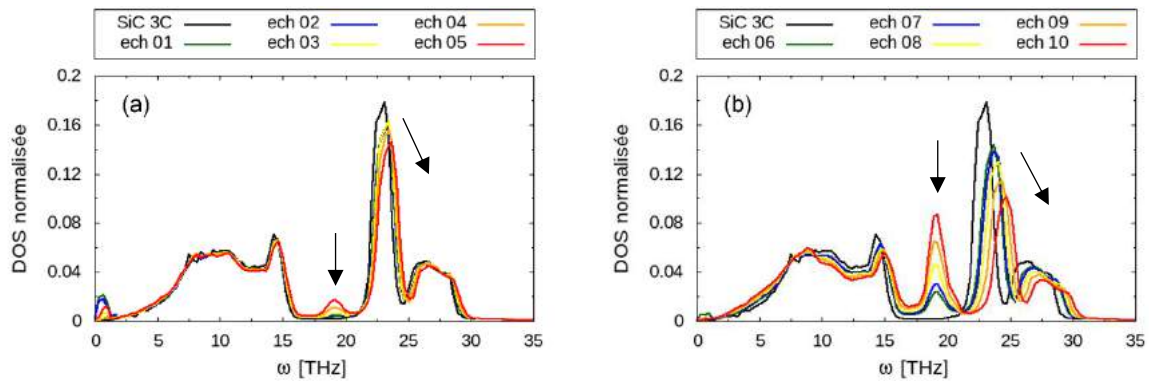


Figure 3-45 : Comparaison des courbes de DOS obtenues pour les échantillons 1 à 5 (a) et pour les échantillons 6 à 10 avec celle du SiC 3C.

La superposition des points et de la courbe noire sur les [figures 3-46-\[a-b\]](#) montrent que le ratio n'a pas d'impact sur la correction de température. Les températures des simulations pour le calcul des densités de courant, nécessaires à l'évaluation de la fonction diélectrique dans l'IR, seront corrigées en suivant la loi de correction déterminée pour le 3C-SiC pur.

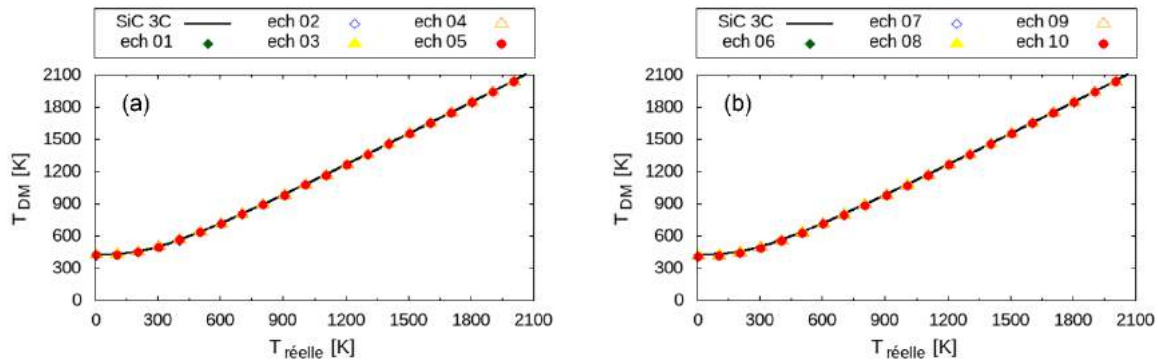


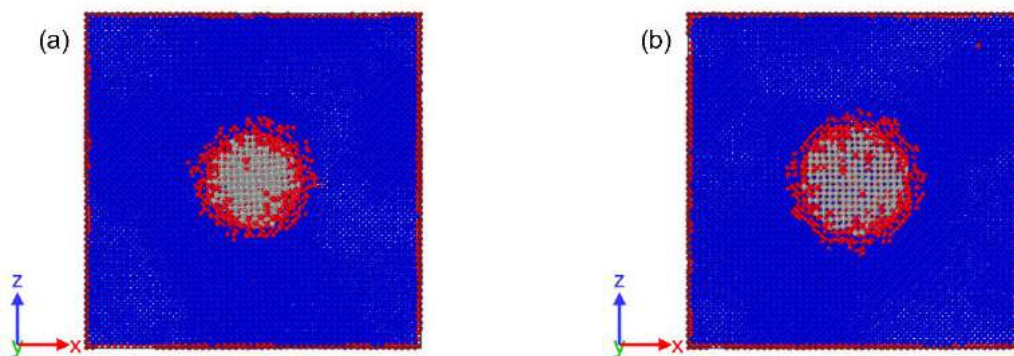
Figure 3-46 : Correction de la température évaluée pour les échantillons 1 à 5 (a) et 6 à 10 (b).

3.4.2.2 Fonction diélectrique évaluée à 1500K

Nous avons simulé la fonction diélectrique de différents échantillons de SiC incorporant des nanoparticules de TiC afin d'évaluer l'influence de ces dernières sur l'absorptivité et l'émissivité du SiC à une température optimum de 1500 K pour le fonctionnement d'une centrale solaire. Les simulations ont été réalisées en suivant le protocole ci-dessous :

1. Lecture des positions et vitesses préalablement enregistrées pour chaque échantillon.
2. Chauffage du système de 300 K à 1547 K (correspondant à une température réelle de 1500K) pendant 30 ps.
3. Thermalisation du système à 1547 K pendant 30 ps.
4. Application d'un ensemble microcanonique et enregistrement des densités de courant pendant 90 ps.

Nous avons analysé la structure cristallographique des différents échantillons simulés à 1547 K afin de vérifier que la structure de la nanoparticule de TiC reste bien stable à cette température. Les images des structures des échantillons étudiés sont présentées sur les [figures 3-47-\[a-j\]](#). L'analyse structurale indique que la nanoparticule de TiC est stable dans tous les échantillons.



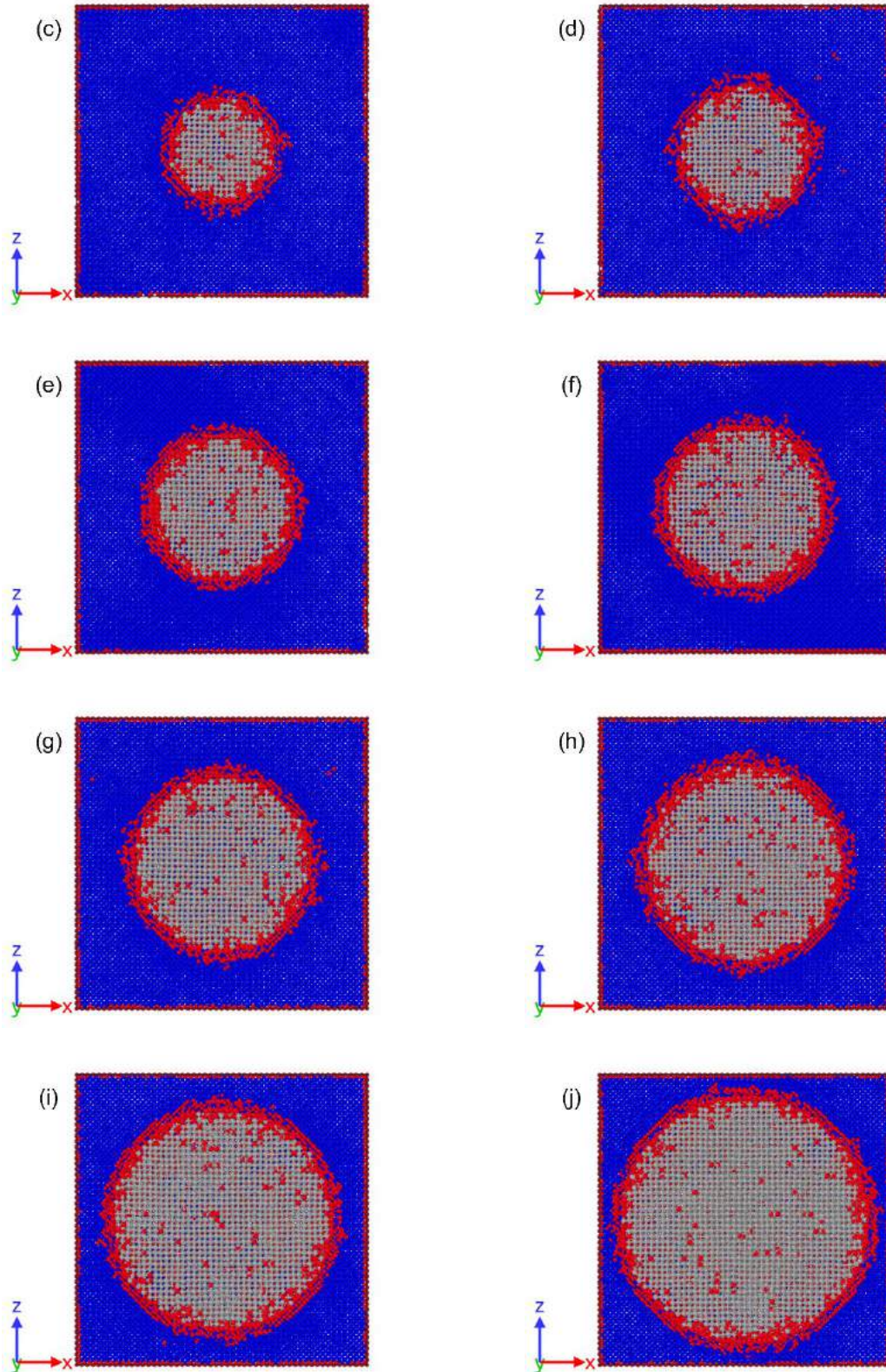


Figure 3-47 : Image de la coupe suivant l'axe $\vec{y}$ de la boîte de simulation des échantillons 1 à 10 après la thermalisation à 1547 K. Les sphères bleues correspondent aux atomes de SiC respectant ses conditions de coordination, les grises aux atomes de TiC respectant ses conditions de coordination, les rouges aux atomes qui ne respectent aucune condition.

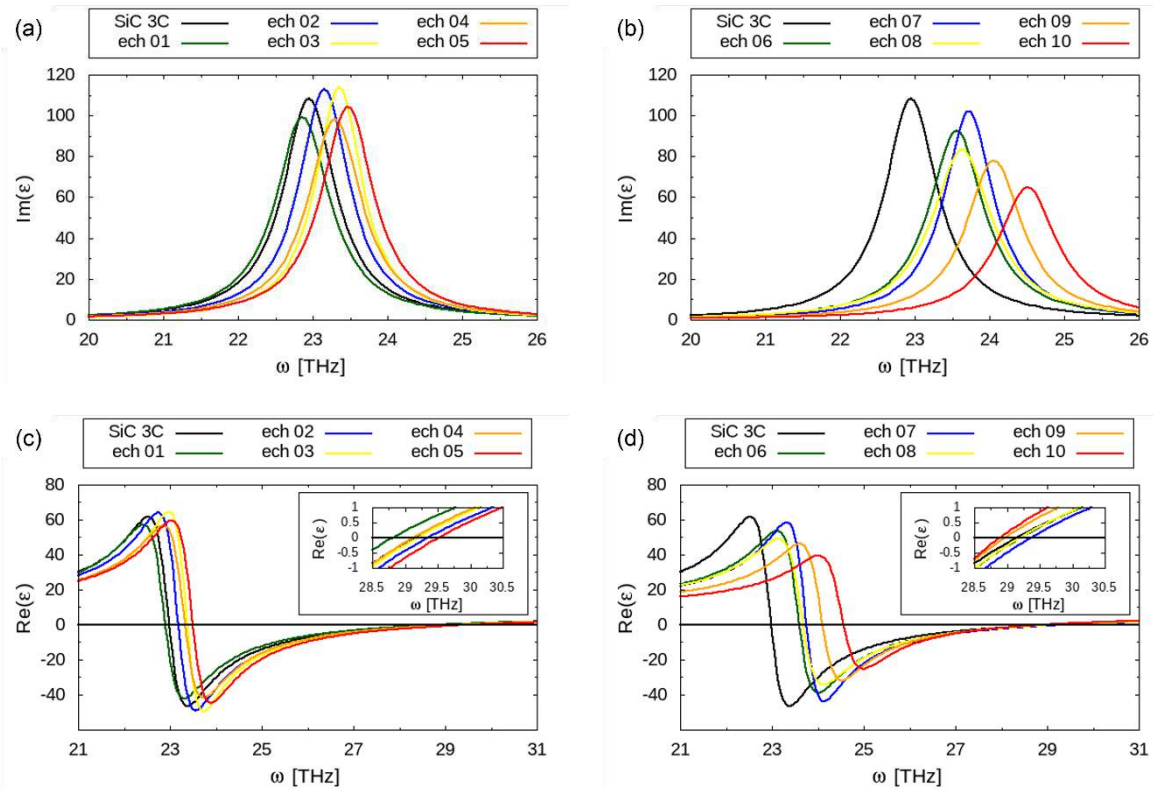
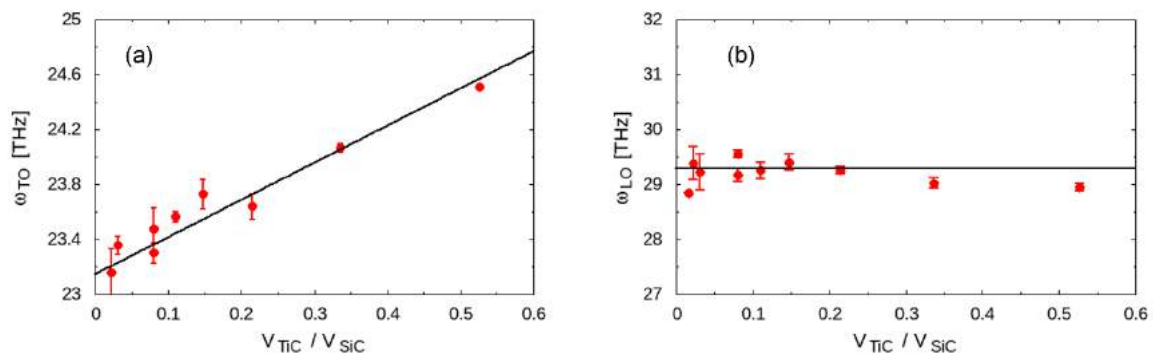


Figure 3-48 : Partie imaginaire (a-b) et partie réelle (c-d) de la fonction diélectrique calculée à une température réelle de 1500 K..

Les [figures 3-48-\[a-b\]](#) montrent le pic de la partie imaginaire se déplace vers les fréquences élevées au fur et à mesure que le rapport V_{TiC}/V_{SiC} augmente. De plus on note une diminution de l'amplitude des pics lorsque le rapport V_{TiC}/V_{SiC} est important.

Les [figures 3-48-\[c-d\]](#) montrent deux phénomènes distincts. Dans la première figure, on note une augmentation de la fréquence de changement de signe de la partie réelle lorsque le rapport V_{TiC}/V_{SiC} est important. Et dans la deuxième figure, il semble que la fréquence de changement de signe de la partie réelle fluctue autour d'une valeur.



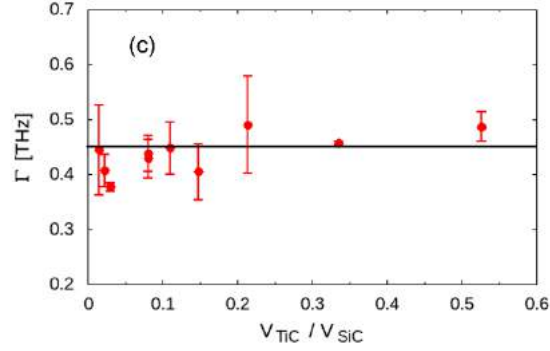


Figure 3-49 : Paramètres du modèle de Lorentz évalués à une température réelle de 1500 K, en fonction du ratio volumique, fréquence transverse (a), fréquence longitudinale optique (b), coefficient d'amortissement (c). Les points correspondent aux valeurs simulées et les traits aux fits d'évolution.

La [figure 3-49-a](#) montre que la fréquence du mode TO augmente linéairement avec le rapport volumique. Les [figures 3-49-b-c](#) semblent montrer que la fréquence du mode LO et celle du coefficient d'amortissement n'évoluent pas en fonction du rapport volumique car les fréquences respectives semblent fluctuer autour d'une valeur et ne suivent pas une tendance d'évolution.

3.4.2.3 Propriétés radiatives

Les spectres de réflectance et d'absorptance des dix échantillons évalués à 1500 K sont présentées dans les [figures 3-50-\[a-d\]](#).

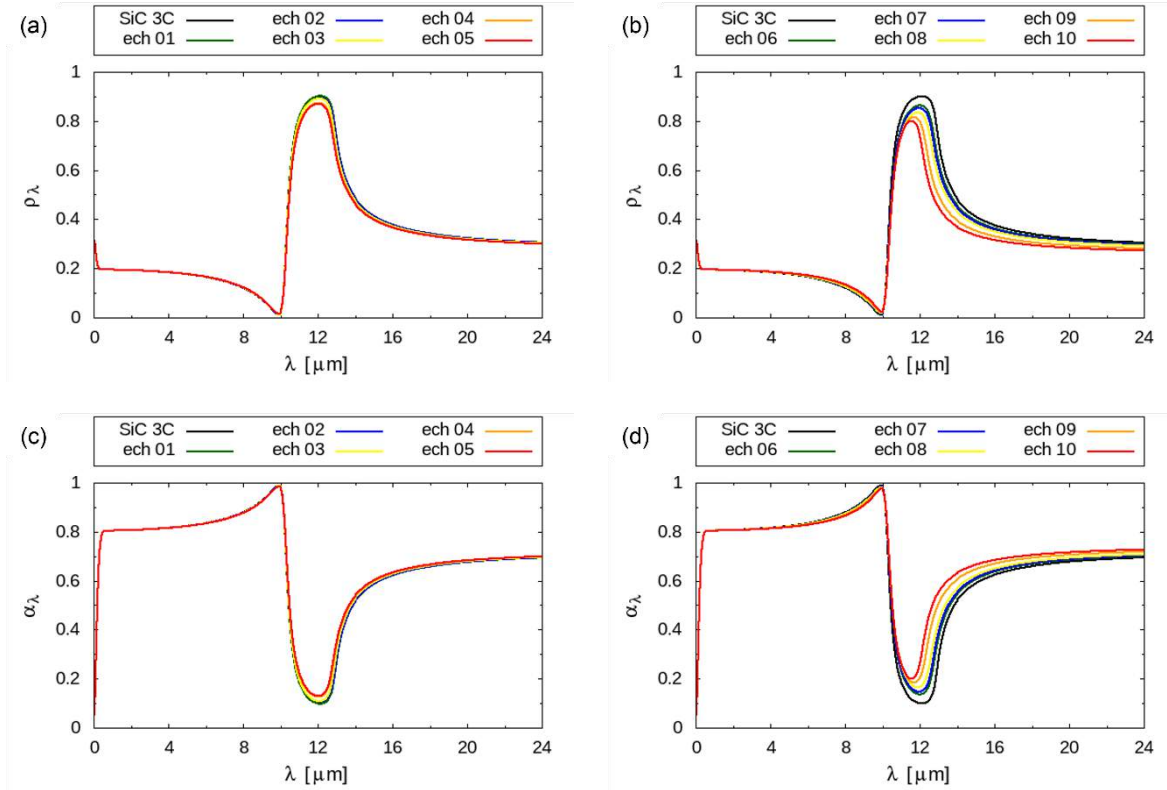


Figure 3-50 : Spectre de réflectance (a-b) et d'absorptance (c-d) évalués à une température réelle de 1500 K pour des échantillons dopés avec une concentration électronique de $5.78 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$.

Les spectres d'absorptances semblent indiquer que plus le rapport volumique est important et plus l'absorptance est dans le domaine de l'infrarouge est importante.

Les courbes d'évolution de l'absorptivité dans le visible et de l'émissivité dans l'IR sont respectivement présentées sur les [figures 3-51-\[a-b\]](#). Ces dernières montrent que le ratio volumique n'a pas d'influence sur l'absorptivité tandis que l'émissivité dans l'IR augmente légèrement.

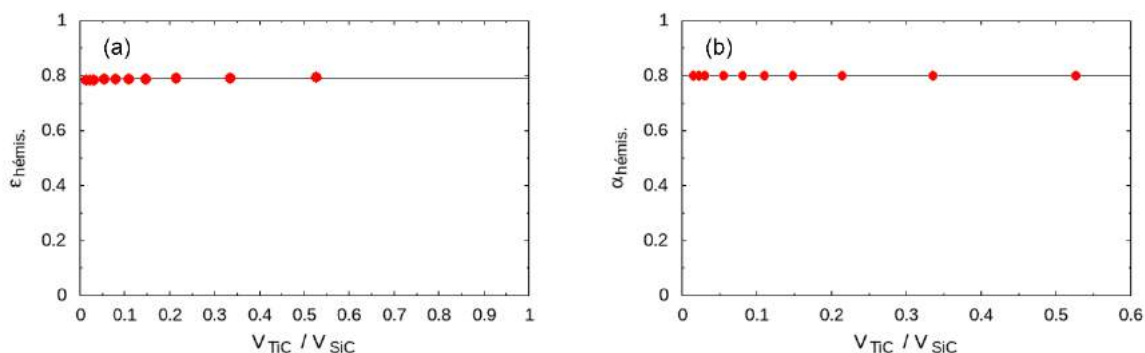


Figure 3-51 : Absorptivité monochromatique (a) et émissivité monochromatique (b) des dix échantillons évalués à 1500 K.

3.4.2.4 Conclusion

L'augmentation du ratio conduit à décrire une DOS ayant le comportement à la fois du TiC et du SiC. Les fréquences des pics de la DOS du SiC se décalent par ailleurs vers les hautes fréquences au fur et à mesure que le ratio augmente.

La fréquence transverse optique et la valeur du coefficient d'amortissement augmentent avec le ratio volumique tandis que la fréquence longitudinale optique reste constante.

L'absorptivité dans le visible ne montre pas de dépendance au ratio volumique et l'émissivité hémisphérique n'augmente que très faiblement. Cette augmentation de l'émissivité dans l'IR est sans doute liée à la diminution de l'écart entre la fréquence longitudinale et la fréquence transverse optique. De cette constatation, nous pouvons émettre l'hypothèse qu'il faut augmenter la différence entre les fréquences longitudinale et transverse optiques pour réduire l'émissivité dans l'IR.

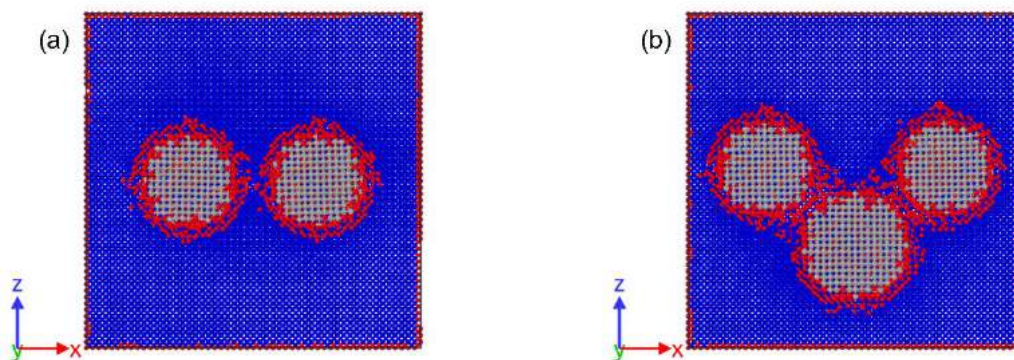
3.4.3 Étude préliminaire, dispersion de nanoparticule de TiC dans la matrice de SiC

La section précédente était focalisée sur l'influence du ratio volumique avec des boîtes de simulation ne contenant qu'une seule nanoparticule de TiC. Dans cette section, nous allons évaluer la DOS, la fonction diélectrique et les propriétés radiatives de deux échantillons contenant plusieurs nanoparticules de forme sphérique. Les résultats seront comparés à ratio volumique constant à ceux obtenus avec des échantillons ne contenant qu'une nanoparticule de TiC pour une température réelle de 1500K.

Tableau 3-14 : Caractéristiques des échantillons étudiés. Boite de simulation de dimension $114.92 \times 114.92 \times 114.92 \text{ \AA}^3$.

Échantillon	Nb. de sphère	Rayon [$\text{\AA}$]	Nb. d'atome	$V_{\text{TiC}}/V_{\text{SiC}}$
1	2	17.68	140528	0.0315
		17.68		
2	1	22.28	140686	0.0315
3	3	17.68	140538	0.0551
		17.68		
		19.89		
4	1	26.65	140568	0.0551

Les caractéristiques des échantillons étudiés dans cette section sont répertoriées dans le tableau 3-14. Les structures des échantillons contenant plusieurs sphères de nanoparticule de TiC sont présentées dans les [figures 3-52-\[a-d\]](#).



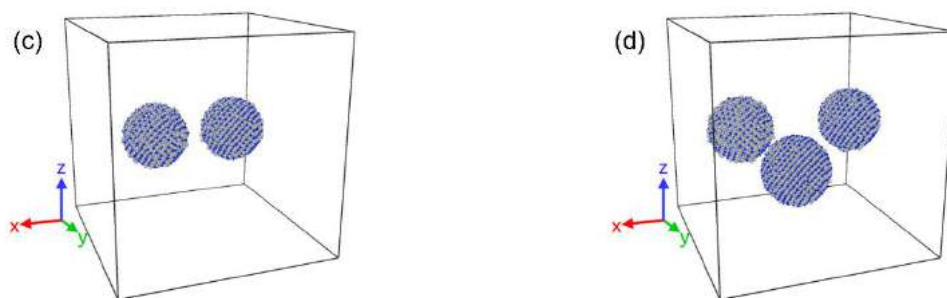


Figure 3-52 : Image de la coupe suivant l'axe y de la boîte de simulation de l'échantillon 1 (a) et de l'échantillon 3 (b) à la fin de la thermalisation à 300K. Position des nanoparticules de TiC dans la boîte de simulation de l'échantillon 1 (c) et l'échantillon 2 (d).

3.4.3.1 DOS et correction de la température

La superposition des DOS des échantillons 1 et 2 (figure 3-53-a) et des échantillons 3 et 4 (figure 3-53-b) semble indiquer que la DOS reste identique, pour un même rapport volumique, et cela peu importe le nombre de nanoparticules contenues dans la boîte. Cette remarque implique donc que la correction à apporter à la température de simulation sera toujours la même.

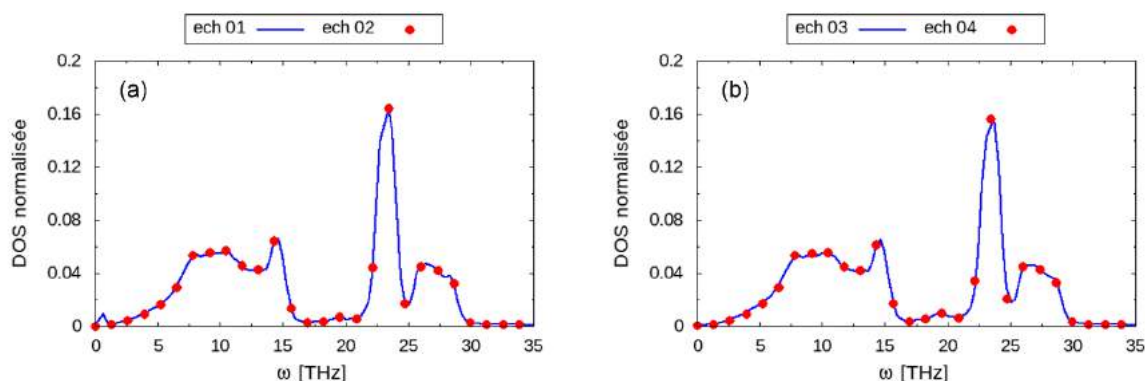


Figure 3-53 : Comparaison de la DOS évaluée pour les échantillons 1 et 2 (a) et pour les échantillons 3 et 4.

3.4.3.2 Fonction diélectrique évaluée à 1500K

Les figures 3-54-[a-d] mettent avant le fait que le nombre de nanoparticules de TiC et leur positionnement influent sur la fonction diélectrique. Dans le cas de l'échantillon 1, contenant deux nanoparticules assez éloignées l'une de l'autre, la fréquence transverse optique est plus faible que celle de l'échantillon 2 (même rapport volumique mais ne contenant qu'une seule nanoparticule). Dans le cas de l'échantillon 3 contenant trois nanoparticules très proches les unes des autres, la fréquence transverse est identique à celle observée pour l'échantillon 4. Nous notons cependant que la fréquence longitudinale optique est nettement plus importante avec l'échantillon 3 qu'avec l'échantillon 4.

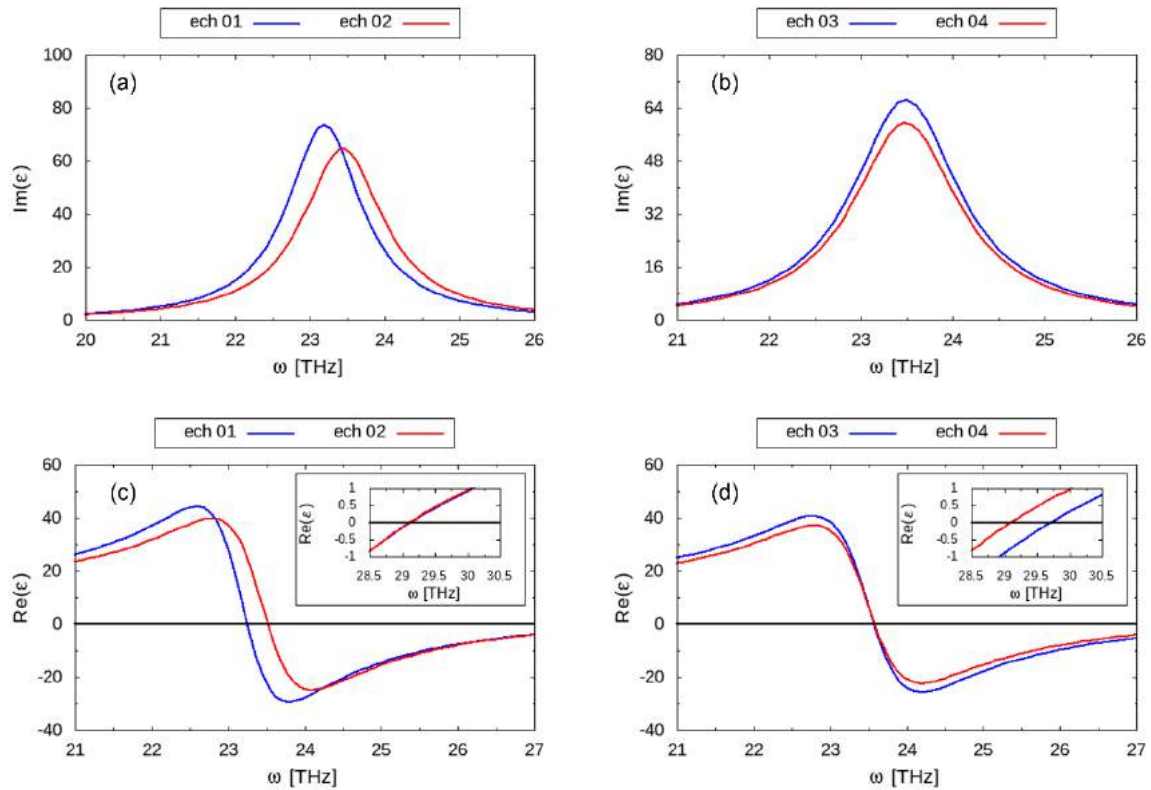


Figure 3-54 : Partie imaginaire (a-b) et partie réelle (c-d) de la fonction diélectrique évaluée à 1500K.

3.4.3.3 Propriétés radiatives

Les courbes présentées sur les figures et les résultats répertoriés dans le tableau 3-15 montrent que les échantillons contenant plusieurs nanoparticules de TiC présentent des émissivités dans l'IR légèrement inférieures à celles des échantillons possédant uniquement une sphère.

Tableau 3-15 : Absorptivité dans le visible et émissivité dans l'IR évaluées à 1500 K pour chaque échantillon.

Échantillon	$V_{\text{TiC}}/V_{\text{SiC}}$	$\omega_{LO} - \omega_{TO}$ [THz]	Émissivité	Absorptivité
1	0.0315	6.00	0.784	0.800
2	0.0315	5.75	0.785	0.800
3	0.5510	6.30	0.783	0.800
4	0.5510	5.70	0.786	0.800

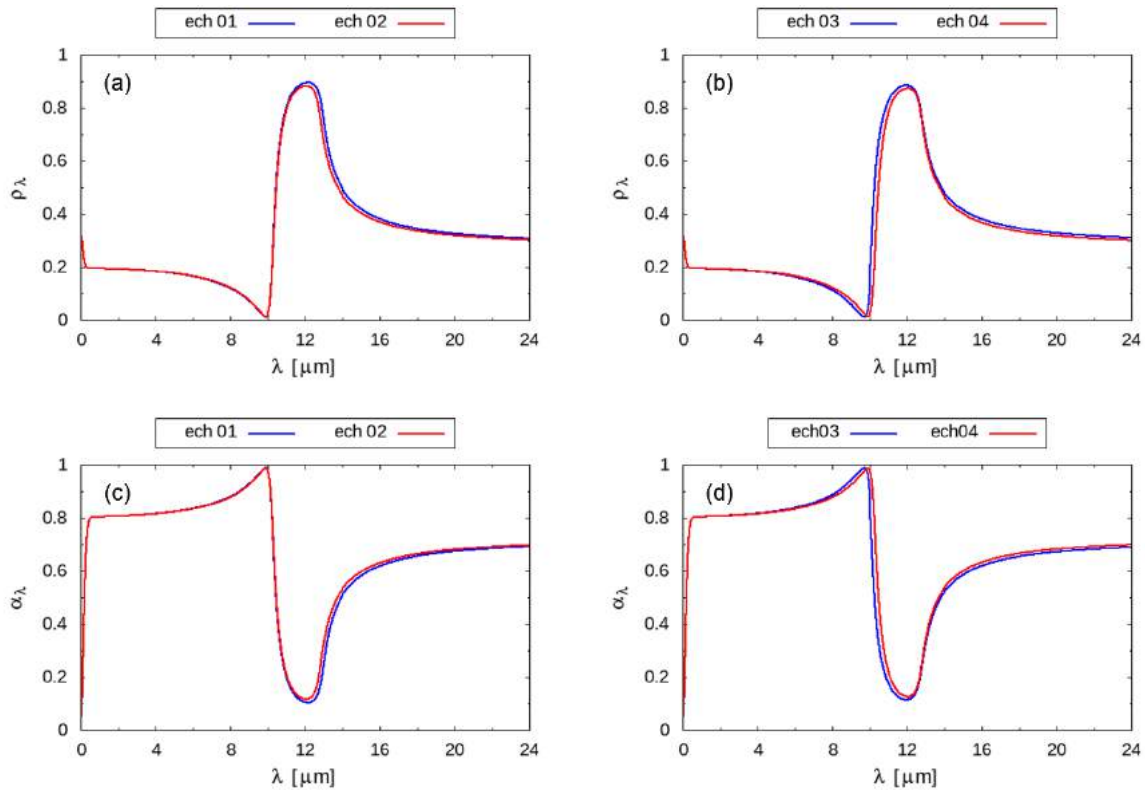


Figure 3-55 : Spectres de réflectivité (a-b) et d'absorptivité (c-d) des quatre échantillons évalués 1500K.

3.4.3.4 Conclusion

L'étude préliminaire nous a permis de valider notre hypothèse concernant l'influence de la différence entre la fréquence transverse et longitudinale optique sur l'émissivité dans l'IR. Nous avons aussi montré qu'à même rapport volumique, la DOS évaluée pour un échantillon contenant plusieurs nanoparticules de TiC est identique à celle obtenue pour un échantillon ne contenant qu'une seule nanoparticule.

Le nombre et la répartition dans la matrice de SiC des nanoparticules de TiC semble entraîner des effets différents sur la fonction diélectrique. L'étude de ces deux échantillons ne permet pas d'évaluer exactement l'impact du nombre ou/et de la répartition des nanoparticules de TiC sur la fonction diélectrique.

3.4.4 Effet de la distance, et de l'orientation de deux nanoparticules de TiC

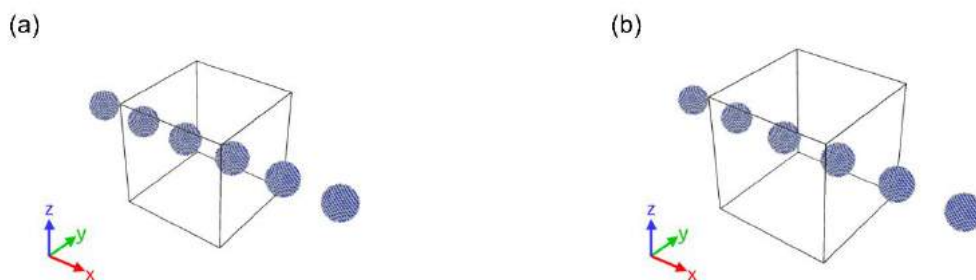
Dans la section précédente, nous avons montré que la fonction diélectrique d'échantillon contenant plusieurs nanoparticules de TiC est différente de celui ne contenant qu'une sphère de nanoparticule, à rapport volumique identique. Cela dit, nous n'avons pas pu évaluer l'impact de la distance séparant les nanoparticules, ni leurs orientations sur la fonction diélectrique.

Dans cette section, nous allons évaluer la fonction diélectrique de différents échantillons contenant deux sphères de nanoparticule, et dont le rapport volumique identique. Dans cette étude nous modulerons uniquement la distance entre les deux nanoparticules et leurs positions. Les caractéristiques des échantillons étudiés sont répertoriées dans le tableau 3-16.

Tableau 3-16 : Caractéristiques des échantillons étudiés. Dans les échantillons 1 à 6, les inclusions de TiC sont placées de manière symétrique. Dans le cas des échantillons 7 et 8, les inclusions sont désaxées suivant l'axe z.

Échantillon	Rayon1 [Å]	Rayon2 [Å]	Distance [Å]	Rapport volumique
1	17.68	17.68	26.52	0.0250
2	17.68	17.68	35.36	0.0166
3	17.68	17.68	44.20	0.0116
4	17.68	17.68	53.04	0.0084
5	17.68	17.68	61.88	0.0063

Les [figures 3-56-\[a-e\]](#) montrent la position et l'orientation des inclusions de TiC dans la boîte de simulation. L'encadrement noir correspond à la boîte de simulation. Les sphères en dehors de la boîte correspondent aux répétitions des nanoparticules de TiC suivant la condition périodique. On note que la distance séparant les inclusions reste maintenue même après la répétition périodique. Afin de maintenir la distance même dans la répétition périodique, il est indispensable d'agrandir la boîte de simulation dans le cas où l'on souhaite positionner les inclusions de manière symétrique.



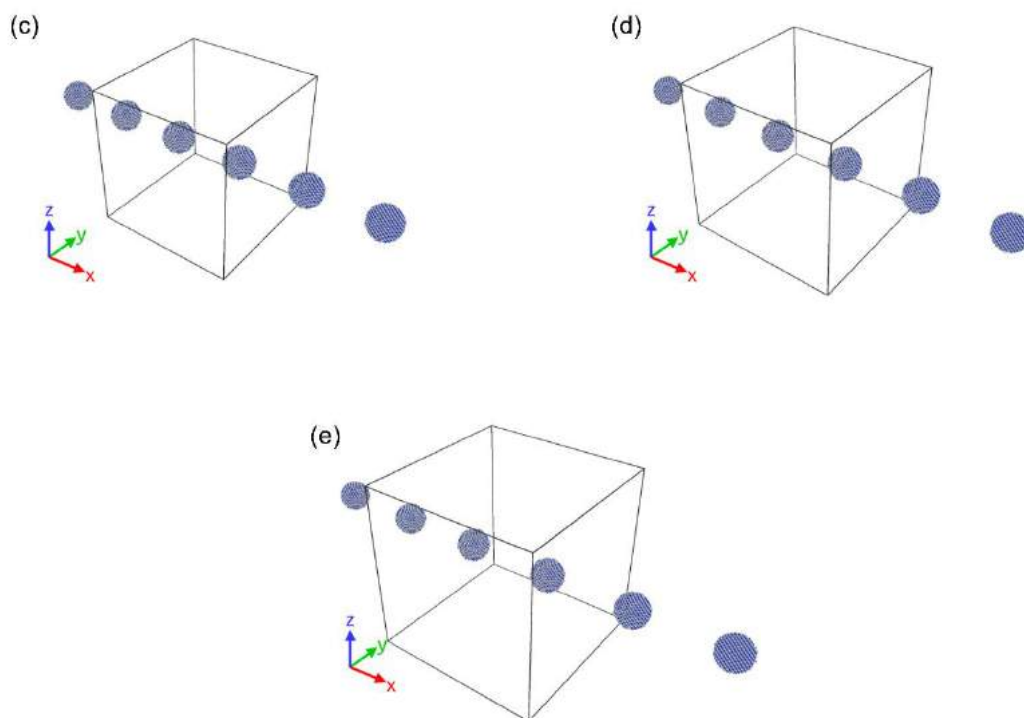


Figure 3-56 : Image des boîtes de simulation des échantillons étudiés. Les atomes bleus correspondent au carbone et les grises au titane.

3.4.4.1 Choix du protocole de simulation

Les études présentées dans les sections 3.4.2 et 3.4.3, nous avons utilisé un protocole définissant une thermalisation à 300 K afin de récupérer les vitesses des particules pour calculer la DOS. De cette thermalisation à 300 K, nous récupérons aussi les positions des particules pour pouvoir relancer les simulations en partant de ces positions et vitesses. Par la suite, les systèmes étaient chauffés jusqu'à 1547 K (correspondant à 1500 K réelle), et maintenu à cette température pendant un certain temps. Les densités de courants étaient finalement récupérées dans l'ensemble microcanonique pour calculer la fonction diélectrique. Ce protocole étant long en temps de simulation, nous avons comparé le résultat de deux protocoles sur la stabilité des inclusions. La description du premier protocole est définie, ci-dessous :

1. Définition de la boîte de simulation.
2. Thermalisation à 0.1K pendant 6 ps.
3. Chauffage du système jusqu'à 300K pendant 6 ps.
4. Thermalisation à 300K pendant 3 ps.
5. Chauffage du système jusqu'à 1547K pendant 15 ps.
6. Thermalisation à 1547K pendant 30 ps.
7. Application de l'ensemble microcanonique pendant 90 ps et enregistrement de la polarisation.

La description du troisième protocole est définie, ci-dessous :

1. Définition de la boîte de simulation.
2. Thermalisation de $0.1K$ pendant $30 ps$.
3. Chauffage du système jusqu'à $300K$ pendant $30 ps$.
4. Thermalisation à $300K$ pendant $30 ps$.
5. Chauffage du système jusqu'à $1547K$ pendant $45 ps$.
6. Thermalisation à $1547K$ pendant $30 ps$.
7. Application de l'ensemble microcanonique pendant $90 ps$ et enregistrement de la polarisation.

L'analyse structural des échantillons ([figures 3-57-\[a-d\]](#)) montre que les deux protocoles donnent le même état de stabilities des inclusions dans la matrice. En effet, on note que les taux d'amorphisation est identique. On peut donc utiliser le premier protocole (minimisant le temps de calcul) pour étudier les autres échantillons.

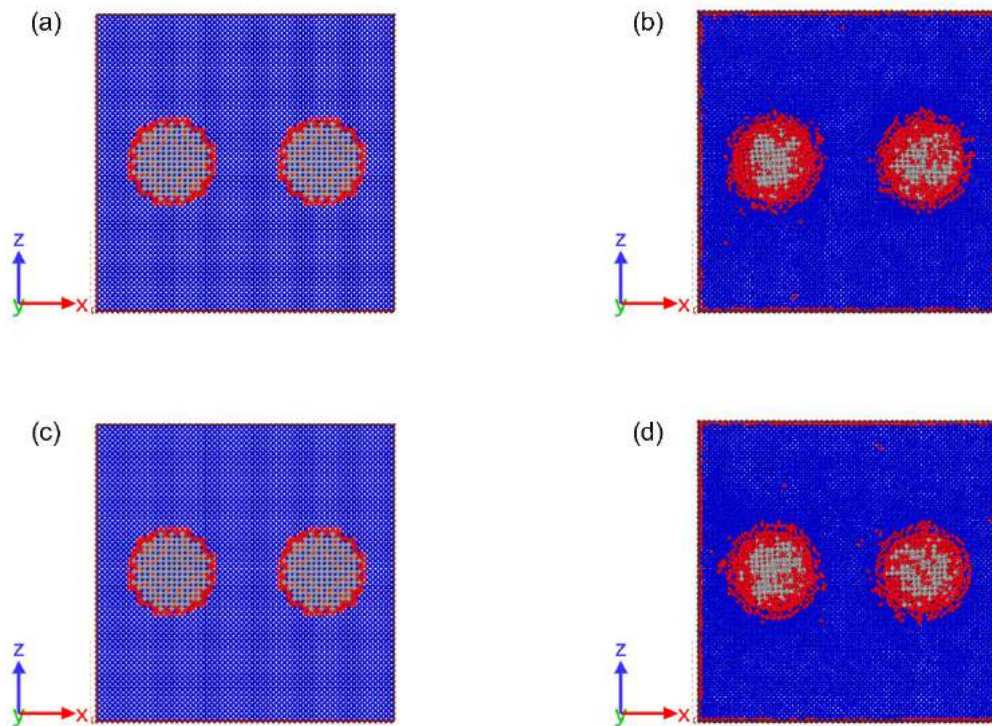


Figure 3-57 : Image de la coupe suivant l'axe $\hat{y}$ de la boîte de simulation de l'échantillon 1 en suivant le premier protocole (a-b), et le deuxième protocole (c-d). Les figures a, c correspondent à l'état d'arrangement des particules à l'état initial, et les figures b, d l'état d'arrangement des particules après la thermalisation à $1547 K$.

3.4.4.2 Fonction diélectrique évaluée à 1500K

Les fonctions diélectriques des différents échantillons sont identiques. La superposition des courbes (figures 3-58-[a-b]), indique que la distance de séparation entre les deux nanoparticules n'a pas d'effet sur la fonction diélectrique IR.

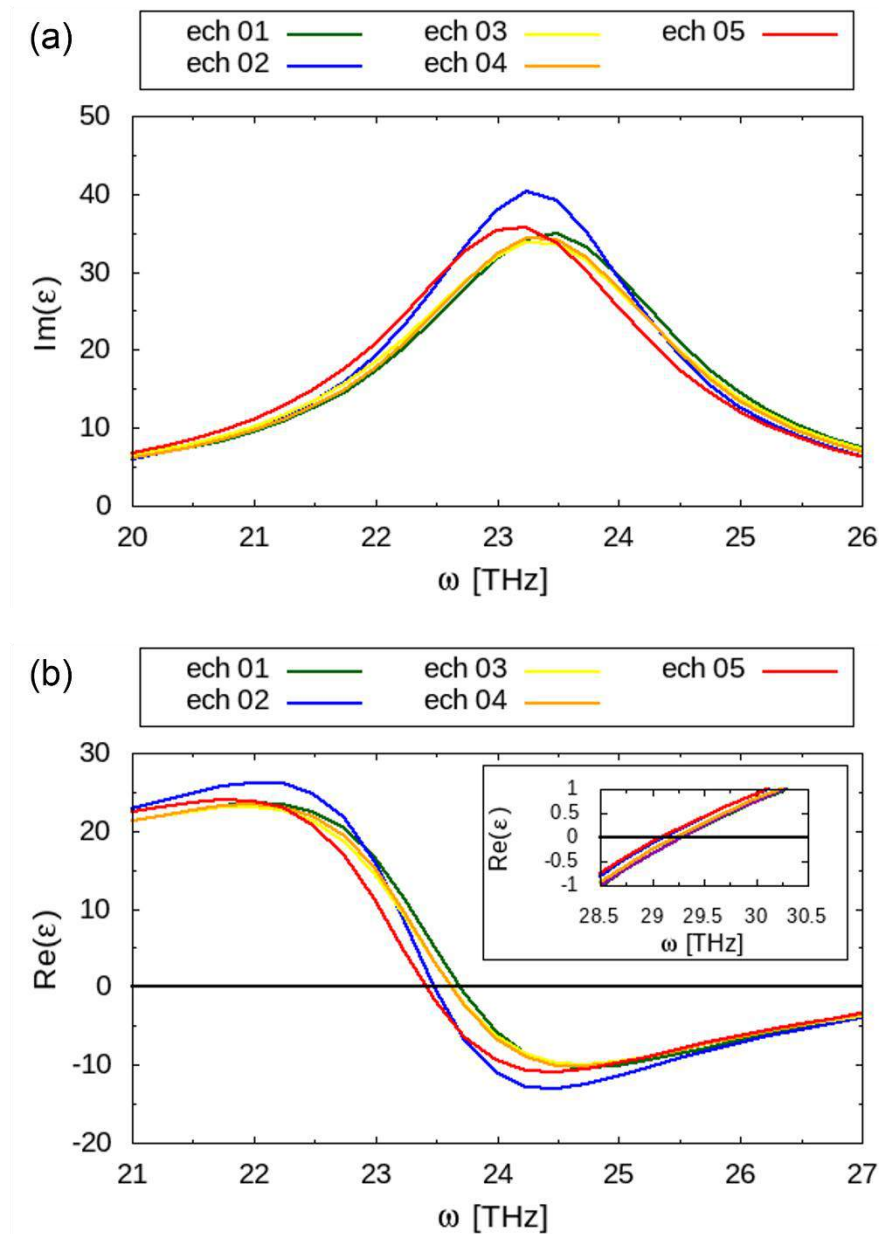


Figure 3-58 : Partie imaginaire (a) et partie réelle (b) de la fonction diélectrique calculée évaluée à 1500 K.

3.4.5 Répartition aléatoire des nanoparticules de TiC

Pour cette étude, nous avons évalué la fonction diélectrique et les propriétés thermo-radiatives d'un échantillon contenant six nanoparticules de tailles différentes réparties aléatoirement dans la matrice de SiC. Les simulations ont été réalisées dans une boîte de dimension $185.64 \times 185.64 \times 185.64 \text{ \AA}^3$. Nous avons opté pour une grande boîte de simulation afin d'avoir un rapport de volume ($\frac{V_{TiC}}{V_{SiC}}$) de 0.0526. Les rayons des six nanoparticules de TiC valent respectivement 17.68 Å, 19.89 Å, 19.89 Å, 22.10 Å, 26.52 Å et 30.94 Å. La répartition des sphères de nanoparticules de TiC dans la boîte de simulation est représentée sur la [figure 3-59-b](#).

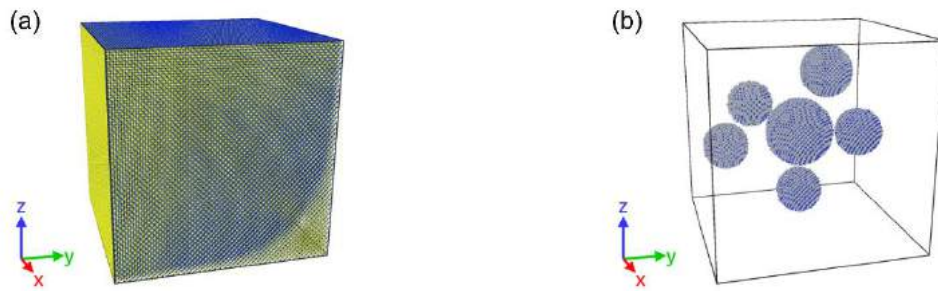


Figure 3-59 : Image de la boîte de simulation (a), position des nanoparticules de TiC dans la boîte de simulation (b), en jaune les atomes Si, en bleu les atomes C et en gris les atomes Ti.

3.4.5.1 Fonction diélectrique fonction de la température.

L'influence de la température sur la fonction diélectrique du TiC-SiC est la même que celle observée pour le 3C-SiC 3C. L'augmentation de la température entraîne une diminution du pic de la partie imaginaire de la fonction diélectrique ([figure 3-60-a](#)) et également une diminution de la fréquence de changement de signe de la courbe de la partie réelle de la fonction diélectrique ([figure 3-60-b](#)).

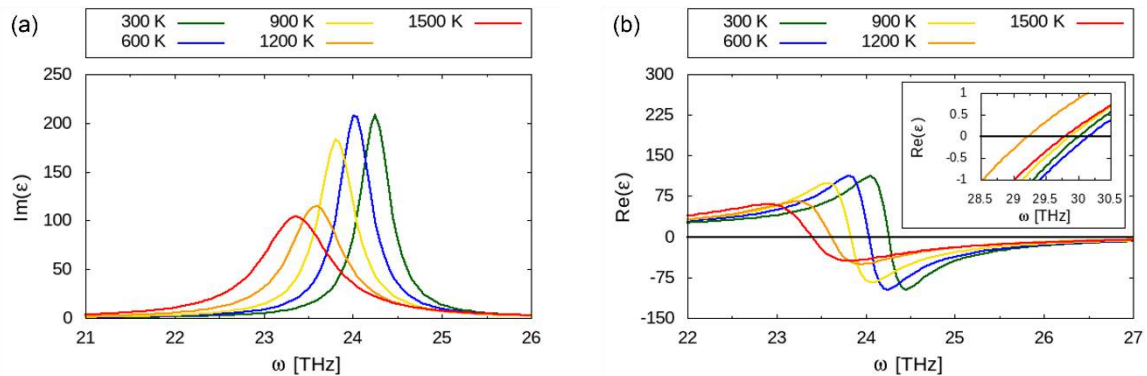


Figure 3-60 : Partie imaginaire (a) et partie réelle (b) de la fonction diélectrique du TiC-SiC à différente température.

Les figures 3-61-[a & c] montrent que les tendances d'évolution de la fréquence du mode TO et celle du coefficient d'amortissement du TiC-SiC sont identiques à celle évaluées pour le SiC 3C. On note cependant que les fréquences du TiC-SiC sont plus importantes que celles du SiC 3C. La figure 3-61-b montre que la pente d'évolution de la fréquence du mode LO pour le TiC-SiC est plus faible que celle du SiC 3C.

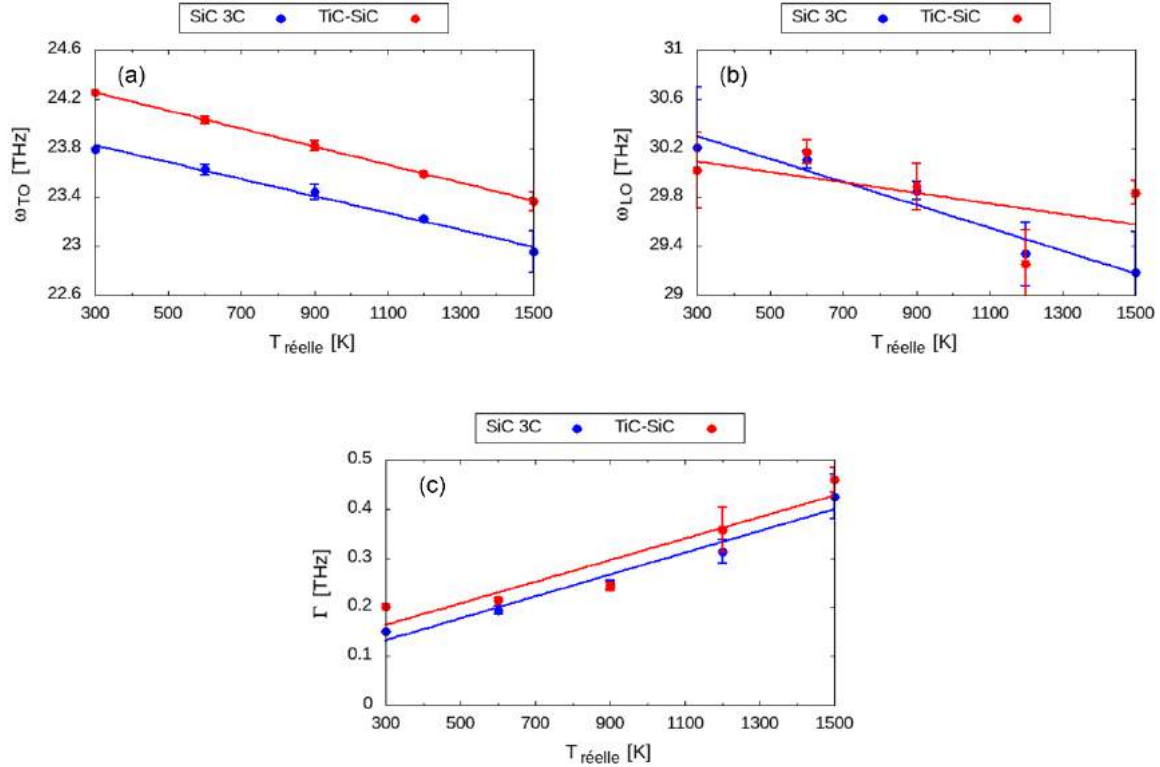


Figure 3-61 : Comparaison des paramètres du modèle de Lorentz en fonction de la température évalués pour le TiC-SiC (rouge) et pour le SiC 3C (bleus), mode TO (a), mode LO (b) et coefficient d'amortissement (c).

3.4.5.2 Propriétés thermo-radiatives

Les spectres de réflectance et d'absorptance sont présentés respectivement sur les figures 3-62-[a-b]. On observe le même comportement que pour le SiC 3C.

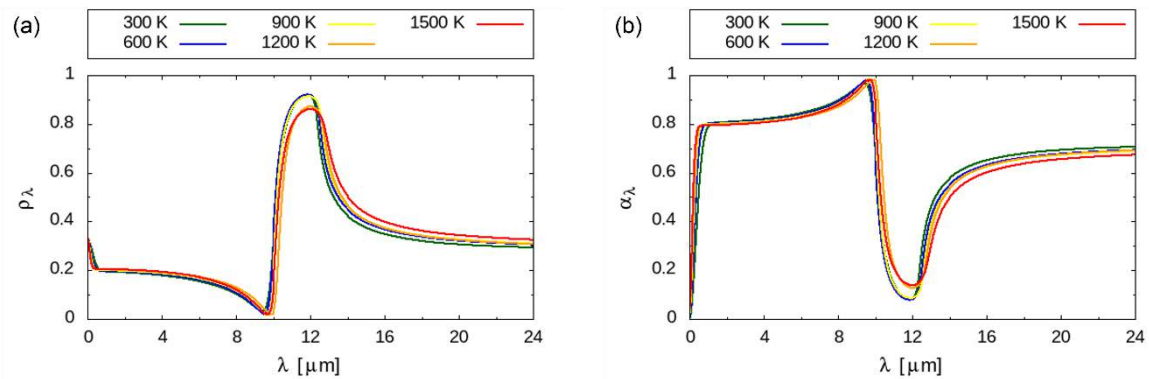


Figure 3-62 : Spectre de réflectance (a) et d'absorptance (b) du TiC-SiC évalués à différentes températures.

Les [figures 3-63-\[a-b\]](#) ne montrent aucune différence entre les deux échantillons. Il semblerait que l'introduction de nanoparticules de TiC n'ait pas d'effet sur les propriétés radiatives du SiC, du moyen à l'échelle de notre étude.

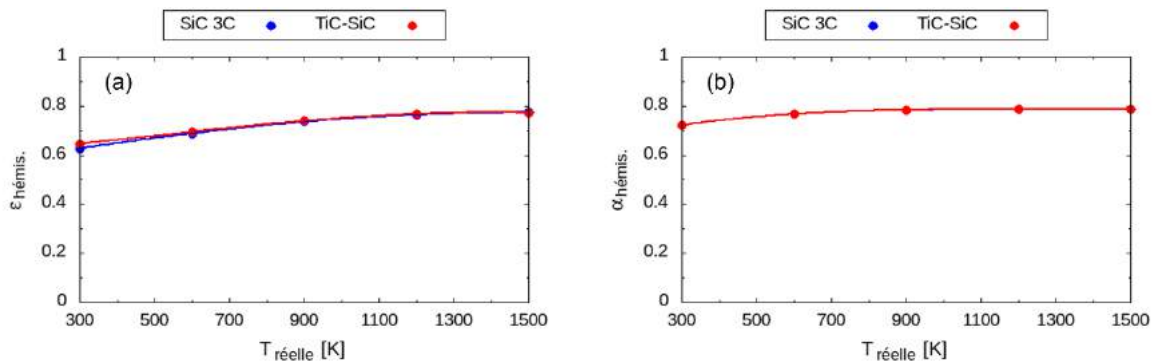


Figure 3-63 : Émissivité monochromatique (a) et de l'absorptivité monochromatique évaluée pour le TiC-SiC (rouge) et le SiC 3C (bleu).

3.4.5.3 Conclusion

L'étude de l'échantillon contenant des nanoparticules de TiC aléatoirement répartis au sein d'un volume ne permet de proposer une optimisation des propriétés thermo-radiatives du récepteur solaire. En effet, nous avons constaté des valeurs d'absorptivité et d'émissivité équivalentes entre l'échantillon 3C-SiC simplement dopé ($n_e = 5 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$) et l'échantillon TiC-SiC dopé aussi avec la même concentration d'électrons.

L'amélioration de la sélectivité spectrale du SiC par l'inclusion de nanoparticules de TiC obtenue par Aréna et ses collaborateurs (Aréna et al. 2019, 2020) semble provenir de phénomènes non pris en compte dans nos simulations. Les auteurs ont par exemple montré que la présence de nano-porosités et d'oxygène dans les échantillons permettent de moduler l'émissivité des échantillons.

3.5 Performance de la centrale solaire

3.5.1 Mise en place des corrélations décrivant les paramètres thermo-radiatifs du SiC

Les propriétés radiatives du carbure de silicium évoluent lors de la montée en température des absorbeurs surfacique ou volumique. Cela doit être pris en compte dans le modèle nodal décrivant l'absorbeur en y intégrant des corrélations pour le calcul de l'absorptivité et de l'émissivité pour chacun des dopages étudiés.

Ces corrélations correspondent à des polynômes d'ordre trois qui permettent de reproduire l'évolution de l'émissivité et de l'absorptivité monochromatique. La forme du polynôme utilisé est présentée par la formule ci-dessous :

$$f(T) = A \times T^3 + B \times T^2 + C \times T + D \quad 3.40$$

Les valeurs des coefficients A , B , C et D de chaque échantillon du SiC 3C sont répertoriés dans le tableau 3-17 et dans le tableau 3-18 pour ceux du SiC 6H.

Tableau 3-17 : Coefficients des polynômes des échantillons de SiC 3C.

$n_e [cm^{-3}]$	Absorptivité et émissivité	A	B	C	D
7.00×10^{17}	ε_{SiC}	-4.3673×10^{-11}	1.9156×10^{-8}	1.8895×10^{-4}	0.5766
	α_{SiC}	9.8456×10^{-11}	-1.8733×10^{-7}	5.4559×10^{-4}	0.1871
2.00×10^{18}	ε_{SiC}	4.9931×10^{-12}	-1.0883×10^{-7}	2.0083×10^{-4}	0.55014
	α_{SiC}	1.0896×10^{-10}	-4.5042×10^{-7}	6.7893×10^{-4}	0.3754
3.00×10^{18}	ε_{SiC}	-2.1674×10^{-11}	-3.1133×10^{-8}	2.3408×10^{-4}	0.5654
	α_{SiC}	1.1901×10^{-10}	-4.5654×10^{-7}	6.1617×10^{-4}	0.4731
5.78×10^{18}	ε_{SiC}	-1.7422×10^{-11}	-5.0125×10^{-8}	2.6235×10^{-4}	0.5523
	α_{SiC}	9.2007×10^{-11}	-3.3022×10^{-7}	3.9459×10^{-5}	0.6297

Tableau 3-18 : Coefficients des polynômes des échantillons de SiC 6H.

$n_e [cm^{-3}]$	Absorptivité et émissivité	A	B	C	D
7.00×10^{17}	ε_{SiC}	-1.3373×10^{-10}	2.3369×10^{-7}	3.9229×10^{-5}	0.6102
	α_{SiC}	2.8786×10^{-11}	-4.7896×10^{-7}	9.8271×10^{-4}	0.0795
2.00×10^{18}	ε_{SiC}	-9.7076×10^{-12}	-7.2123×10^{-8}	-2.6255×10^{-4}	0.5689
	α_{SiC}	8.6428×10^{-11}	-4.7378×10^{-7}	7.6566×10^{-4}	0.3750
3.00×10^{18}	ε_{SiC}	5.4012×10^{-11}	-2.3829×10^{-7}	3.9520×10^{-4}	0.5346
	α_{SiC}	1.0673×10^{-10}	-4.4603×10^{-7}	6.1116×10^{-4}	0.5055
7.70×10^{18}	ε_{SiC}	6.2507×10^{-11}	-2.6805×10^{-7}	4.2546×10^{-4}	0.5297
	α_{SiC}	4.5375×10^{-11}	-1.5624×10^{-7}	1.6867×10^{-4}	0.7389

3.5.2 Simulation de la montée en température de l'absorbeur surfacique

Les paramètres utilisés pour simuler la montée en température de cet absorbeur le 15 août sur le site choisi d'Odeillo (Latitude = 42.504, Longitude=2,041) sont répertoriés dans le tableau 3-19 :

Tableau 3-19 : Paramètres des conditions de fonctionnement de la centrale solaire dans le d'un absorbeur surfacique.

C	T_{amb} [K]	R_{out} [m]	e_{SiC} [mm]	H [m]	$\dot{m}_{air}$ [kg.s ⁻¹]	v_{ext} [m.s ⁻¹]
37	297.5	0.08	5	10	0.16	5

Ces paramètres ont été maintenus constants sur les différentes simulations menées pour des absorbeurs surfaciques en SiC 3C et SiC 6H. Les valeurs du rayon extérieur du cylindre et de sa hauteur ont été choisies de manière que les corrélations pour le calcul du coefficient d'échange par convection soient applicables. La valeur du débit massique indiqué ci-dessus correspond à la valeur optimum permettant d'assurer une température de sortie d'air la plus proche de celle de l'absorbeur.

3.5.2.1 Cas du SiC 3C

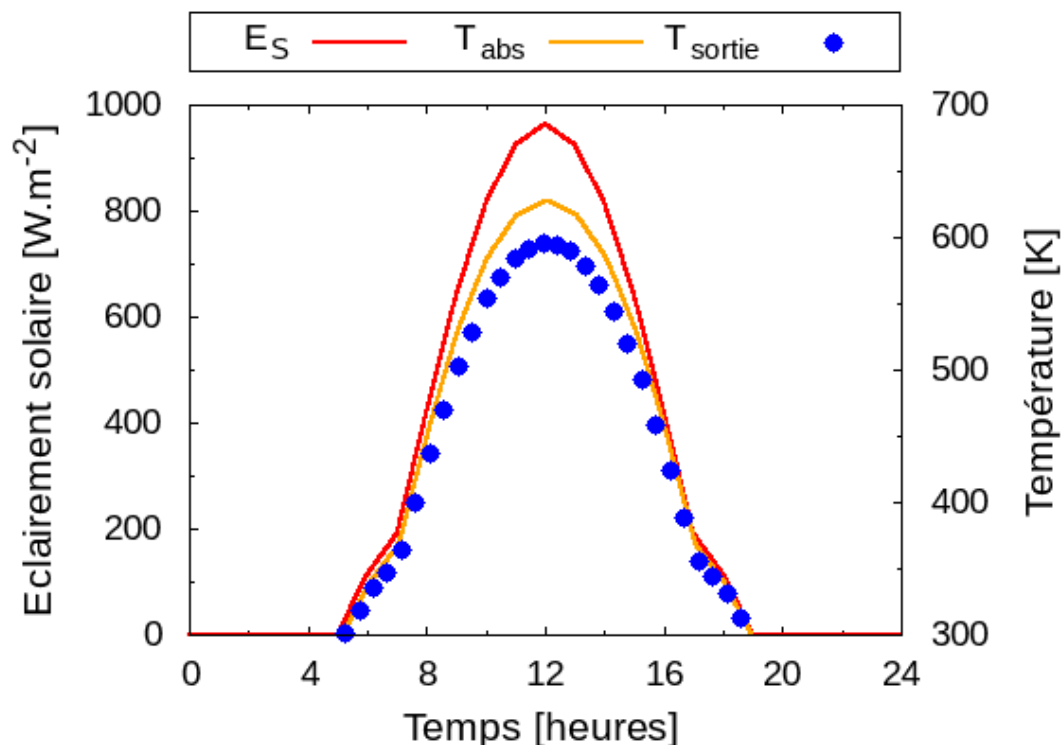


Figure 3-64 : Evolution sur une journée de la température de l'absorbeur et de l'air en sortie pour un dopage $n_e = 3.00 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ de SiC 3C.

Comme le montre la [figure 3-64](#), présentant des résultats de simulation pour un absorbeur surfacique en SiC 3C, la température atteinte pour l'absorbeur est de l'ordre de 600 K avec une concentration de 37. Son évolution en forme de « cloche » est en

cohérence avec celle de l'éclairement solaire. Nous remarquons, comme attendu, qu'il y a un léger écart entre la température de l'absorbeur surfacique et la température de sortie de l'air y circulant dû aux relatifs faibles coefficients d'échange en convection forcée interne.

Sur la [figure 3-65](#), nous avons représenté l'évolution de différents rendements pour le cas d'un absorbeur surfacique en SiC 3C. Nous appelons rendement théorique, l'expression du rendement donné en chapitre d'introduction, ne tenant compte ni de l'inertie de l'absorbeur ni des échanges convectifs internes et externes. Le rendement réel est celui qui prend en compte ces phénomènes et qui est donné par le rapport flux utile sur flux incident concentré. Nous pouvons remarquer sur cette figure qu'il y a un écart double entre le rendement théorique et le rendement réel ce qui illustre bien l'importance des échanges convectifs et de l'inertie sur le rendement de conversion solaire/thermique. Par ailleurs, nous observons en fin de journée, un petit pic apparaître sur le rendement réel, plus apparent quand nous aborderons le cas de l'absorbeur volumique, que nous pouvons attribuer à l'inertie de l'absorbeur et à une définition du rendement réel inadéquate. En effet, l'éclairement solaire faiblit en fin de journée tandis que l'absorbeur, toujours à une température élevée, transmet la chaleur stockée au fluide caloporteur. C'est la raison pour laquelle, le rendement augmente et peut même atteindre des valeurs supérieures à 100 % comme nous le verrons plus tard.

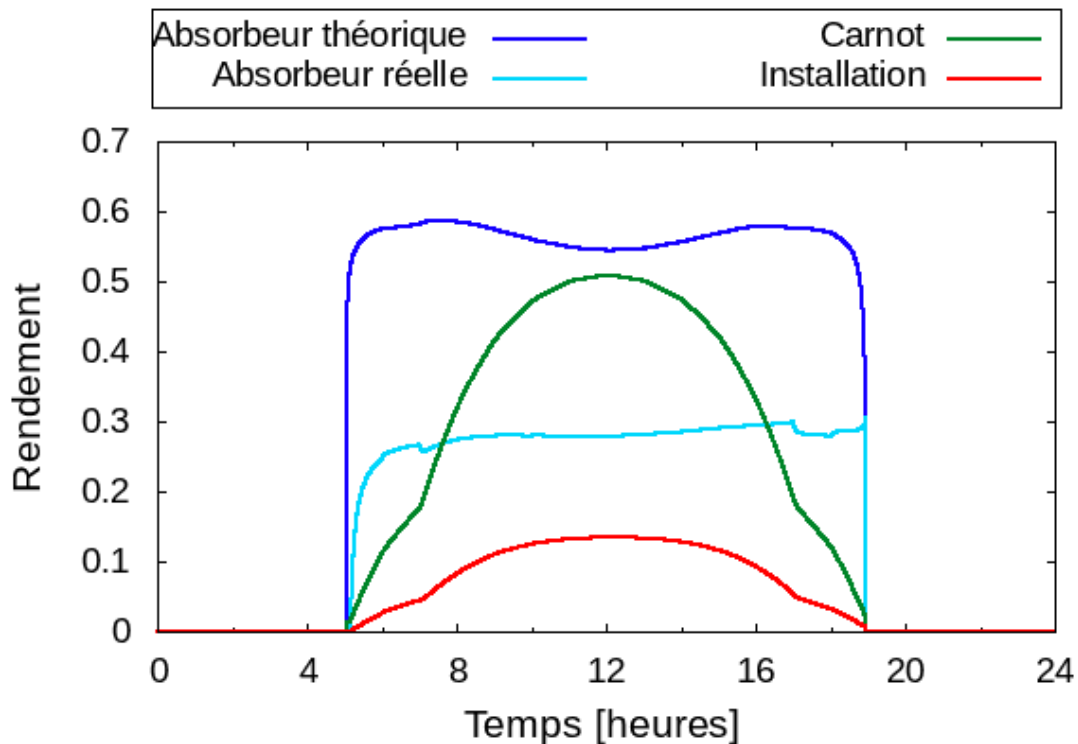


Figure 3-65 : Evolution sur une journée des différents rendements pour un dopage $n_e = 3.00 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ de SiC 3C.

Les [figures 3-66-\[a-b\]](#) illustrent l'évolution de la température de l'absorbeur et de la température de sortie de l'air au cours d'une journée et cela pour différents dopages chimiques. Nous constatons sur ces courbes, que le dopage a un effet non négligeable sur l'augmentation de la température de sortie d'air. Cette température passe ainsi de la valeur maximum de 500 K au midi solaire pour un dopage de

porteurs de charge $n_e = 7.00 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ à 650 K pour un dopage $n_e = 5.78 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$, soit une augmentation de 20 %. Ceci entraînera plusieurs conséquences intéressantes puisque nous aurons d'une part une augmentation du rendement de conversion solaire/thermique de l'absorbeur ([figure 3-66-a](#)), une augmentation du rendement de Carnot pour le cycle thermodynamique et par suite une augmentation de la production d'énergie électrique cumulée sur une journée ([figure 3-66-b](#)).

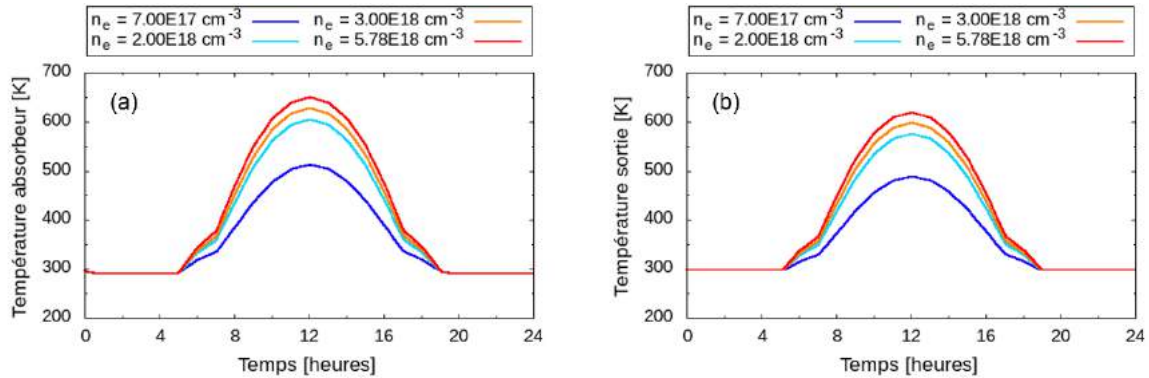


Figure 3-66 : Évolution sur une journée de la température de l'absorbeur en SiC 3C (a) et de l'air en sortie (b) pour différents dopages.

Bien que l'émissivité et l'absorptivité augmentent légèrement avec la température, le taux de dopage permettant l'absorption du rayonnement dans le visible est ce qui influence le plus la production d'électricité. On peut toutefois remarquer pour le dopage le plus élevé et pour la plus haute température, que le rendement réel diminue au midi solaire ([figure 3-67-a](#)). Ceci traduit une augmentation des pertes radiatives au-delà d'une température critique, que l'on ne peut attribuer à la valeur d'émissivité mais plutôt à la température qui évolue en T^4 .

La [figure 3-67-b](#) montre bien que l'échantillon avec une concentration de porteur de charge la plus élevée est celui qui permet de générer plus d'électricité.

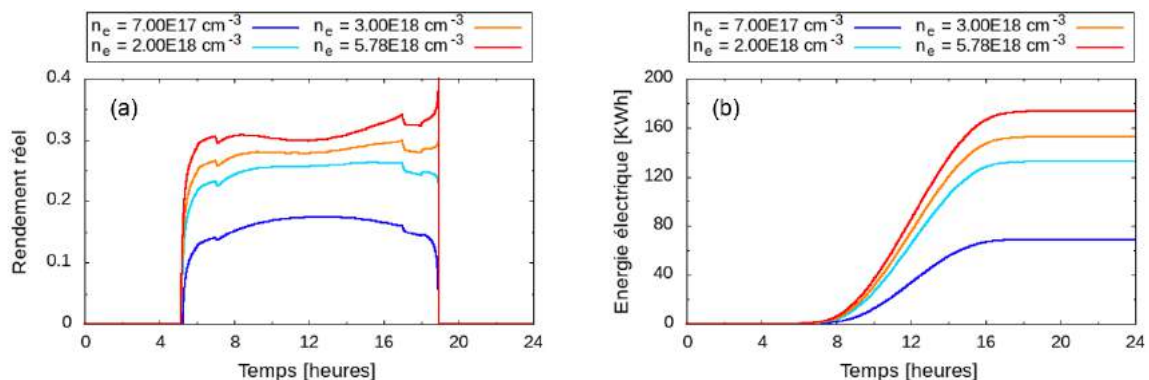


Figure 3-67 : Évolution sur une journée du rendement de conversion solaire/thermique réel de l'absorbeur en SiC 3C (a) et de la production d'énergie électrique (b) pour différents dopages.

3.5.2.2 Comparaison SiC 3C et 6H

Les simulations que nous avons réalisées précédemment pour des absorbeurs en SiC 3C ont été menées également avec des absorbeurs en SiC 6H. Les évolutions des températures (absorbeur, sortie d'air) et rendements avec le taux de dopage sont sensiblement identiques. On constate cependant des écarts en reportant les résultats des différentes simulations pour des absorbeurs surfaciques en SiC 3C et 6H sur un même graphique. La [figure 3-68-a](#) montre par exemple que l'absorbeur en SiC 6H avec un taux de dopage $n_e = 7.00 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ présente une température plus élevée au midi solaire de l'ordre de 30 K par rapport à celui constitué de SiC 3C. Il en va de même pour le rendement réel ([figure 3-68-b](#)) et la production d'énergie électrique ([figure 3-68-c](#)). Cet écart de valeurs entre les deux structures est également observé pour les différents taux de dopage mais tend à diminuer au-delà d'une certaine valeur de dopage.

Nous voyons donc ici que le SiC 6H est plus efficace et à privilégier pour concevoir des absorbeurs pour la conversion solaire/thermique.

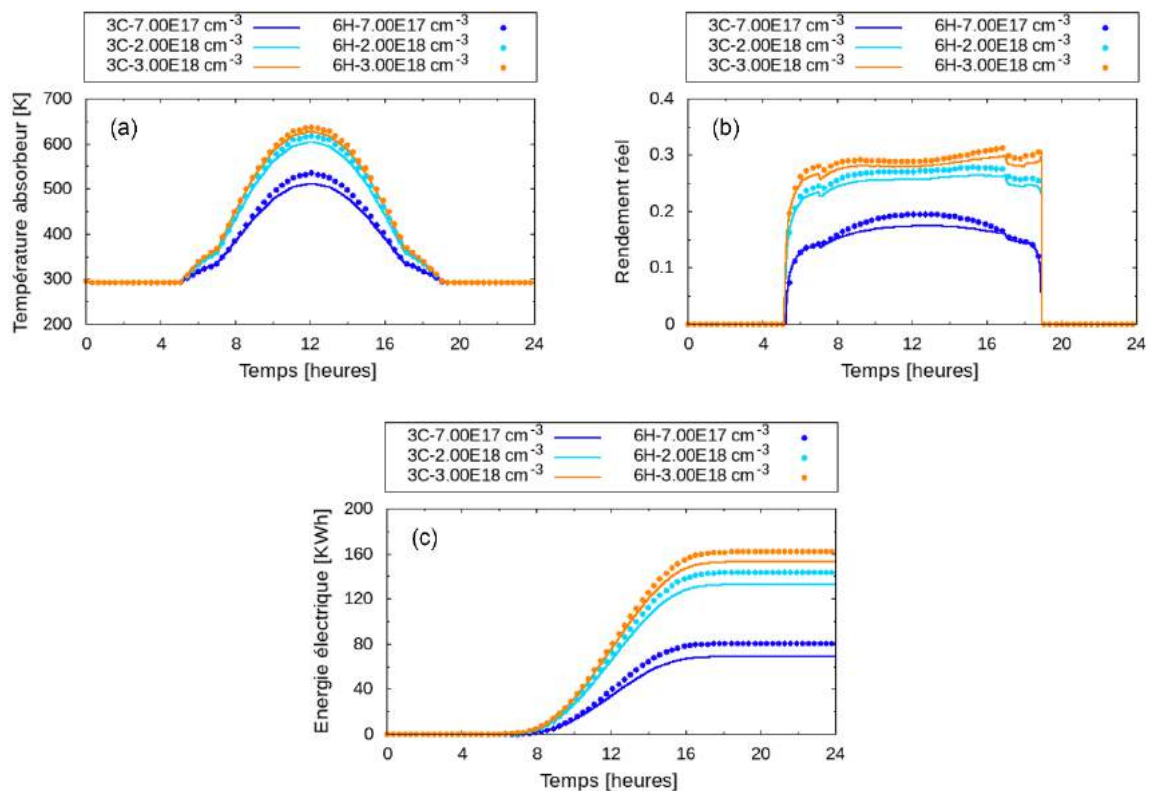


Figure 3-68 : Évolution sur une journée de la température de l'absorbeur en SiC (a), des différents rendements (b) et de la production d'énergie électrique (c) pour différents dopages.

3.5.3 Simulation de la montée en température de l'absorbeur volumique

Pour mener les simulations sur l'absorbeur volumique, nous avons considéré le même site et jour de l'année et posé les paramètres répertoriés dans le tableau 3-20.

Tableau 3-20 : Paramètres des conditions de fonctionnement de la centrale solaire dans le d'un absorbeur volumique.

C	T_{amb} [K]	R_{out} [m]	e_{SiC} [mm]	H [m]	$\dot{m}_{air}$ [kg.s ⁻¹]	v_{ext} [m.s ⁻¹]	Φ [%]	PPI
100	2975	0.2	5	0.5	0.80	5	77	23

3.5.3.1 Cas du SiC 3C

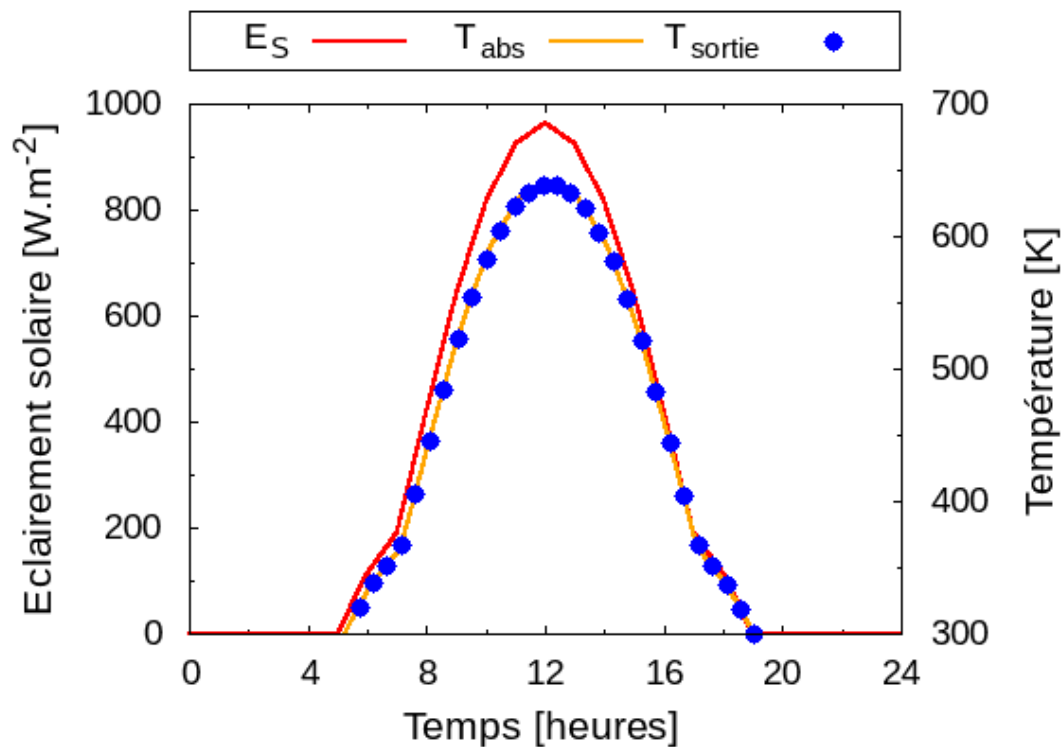


Figure 3-69 : Evolution sur une journée de la température de l'absorbeur pour un dopage $n_e = 3.00 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ de SiC 3C.

En reprenant le même taux de dopage ($n_e = 3.00 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$) et la même structure cristallographique de SiC 3C pour constituer notre absorbeur volumique, nous pouvons remarquer des grandes différences par rapport au cas de l'absorbeur surfacique. Ainsi, pour une concentration de 100 et les dimensions imposées, la température atteinte par l'absorbeur volumique sur la [figure 3-69](#) est sensiblement identique mais celle de l'air en sortie ne présente plus un décalage de plusieurs degrés. Les deux courbes ne sont plus décalées que par quelques degrés ce que l'on peut attribuer à de forts coefficients d'échange par convection interne. Par ailleurs, sur la [figure 3-70](#), nous voyons que le rendement réel est assez proche du rendement théorique. Ceci peut être expliqué par le fait que les pertes radiatives et convectives

extérieures influent moins dans le cas de l'absorbeur volumique. La conséquence directe est donc une augmentation du flux utile nécessaire au fonctionnement du cycle thermodynamique et une augmentation de la production d'énergie électrique. De plus, le pic en fin de journée est plus prononcé et dépasse la valeur de 100 % du fait qu'il y a plus d'inertie thermique et donc de chaleur stockée dans le cas de l'absorbeur volumique.

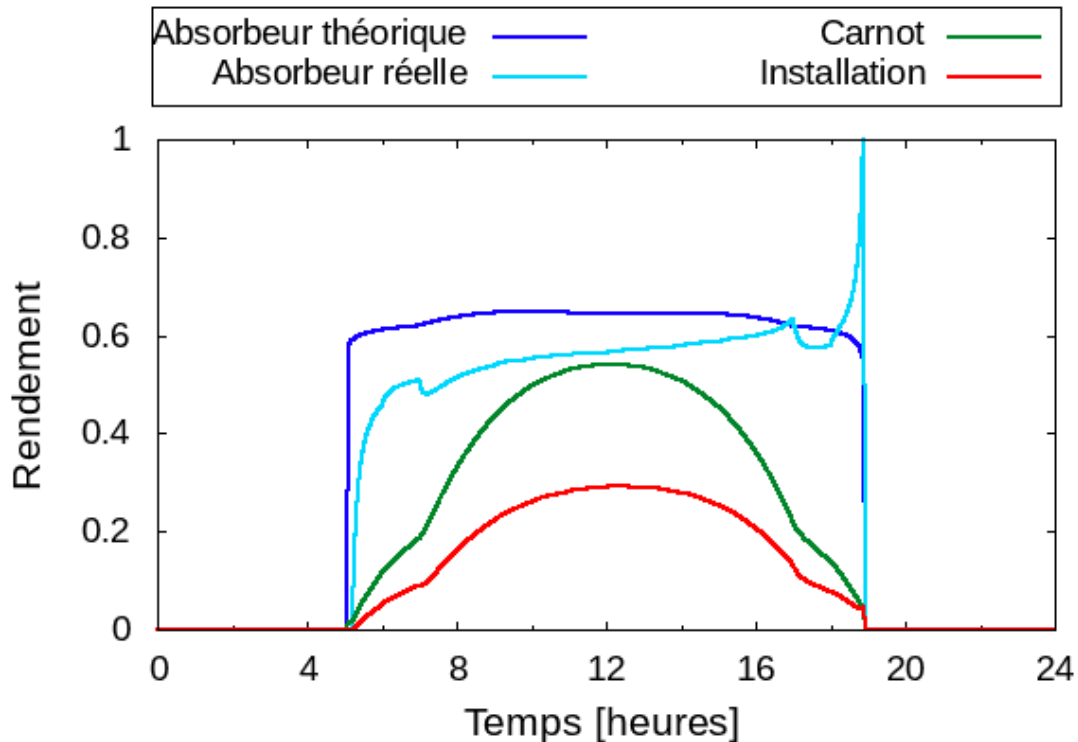
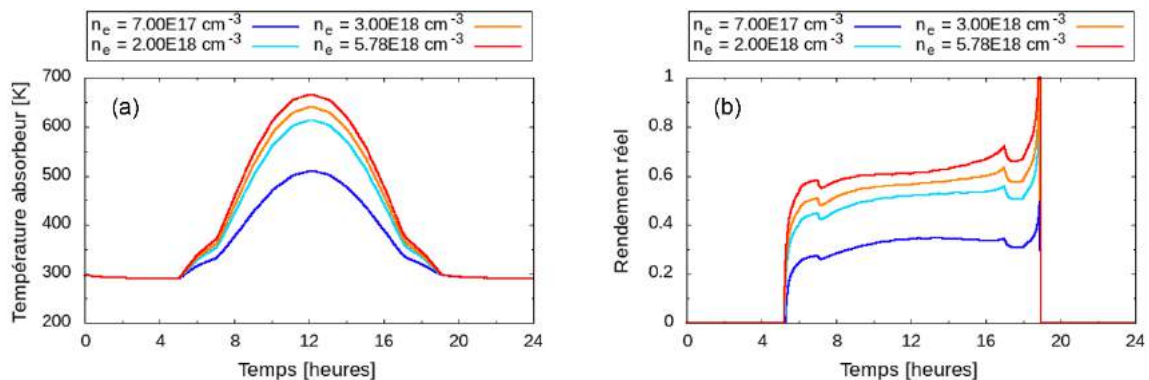


Figure 3-70 : Evolution sur une journée des différents rendements pour un dopage $n_e = 3.00 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ de SiC 3C.

Les remarques avancées sur l'influence du dopage chimique dans l'amélioration des performances de l'absorbeur pour le cas volumique restent vraies. Nous observons de nouveau une augmentation avec le taux de dopage, de la température de l'absorbeur (figure 3-71-a), du rendement réel (figure 3-71-b) et de la production d'énergie électrique (figure 3-71-c). Le taux de dopage est donc le paramètre qui influe le plus sur l'amélioration des performances des absorbeurs solaires en carbure de silicium.



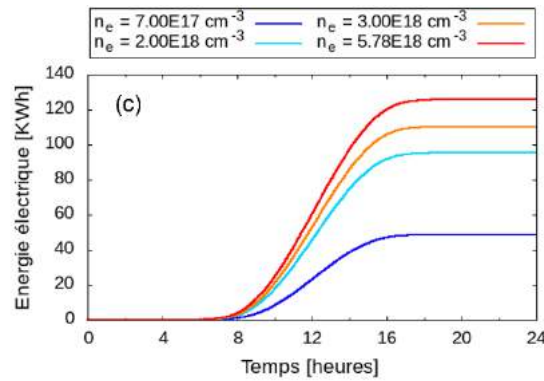


Figure 3-71 : Évolution sur une journée de la température de l'absorbeur en SiC 3C (a), des différents rendements (b,) et de la production d'énergie électrique(c) pour différents dopages.

3.5.3.2 Comparaison SiC 3C et 6H

Sur la [figure 3-72-a](#), nous avons reporté l'évolution en température de l'absorbeur volumique en SiC 3C et 6H. Nous pouvons observer de nouveau que le SiC 6H permet d'atteindre de plus hautes températures que le SiC 3C. Ceci se traduit par la suite par de meilleurs rendements de conversion solaire/thermique ([figure 3-72-b](#)) et une meilleure production d'énergie électrique ([figure 3-72-c](#)). Tout comme pour l'absorbeur surfacique, le SiC 6H est donc à privilégier pour concevoir les absorbeurs volumiques.

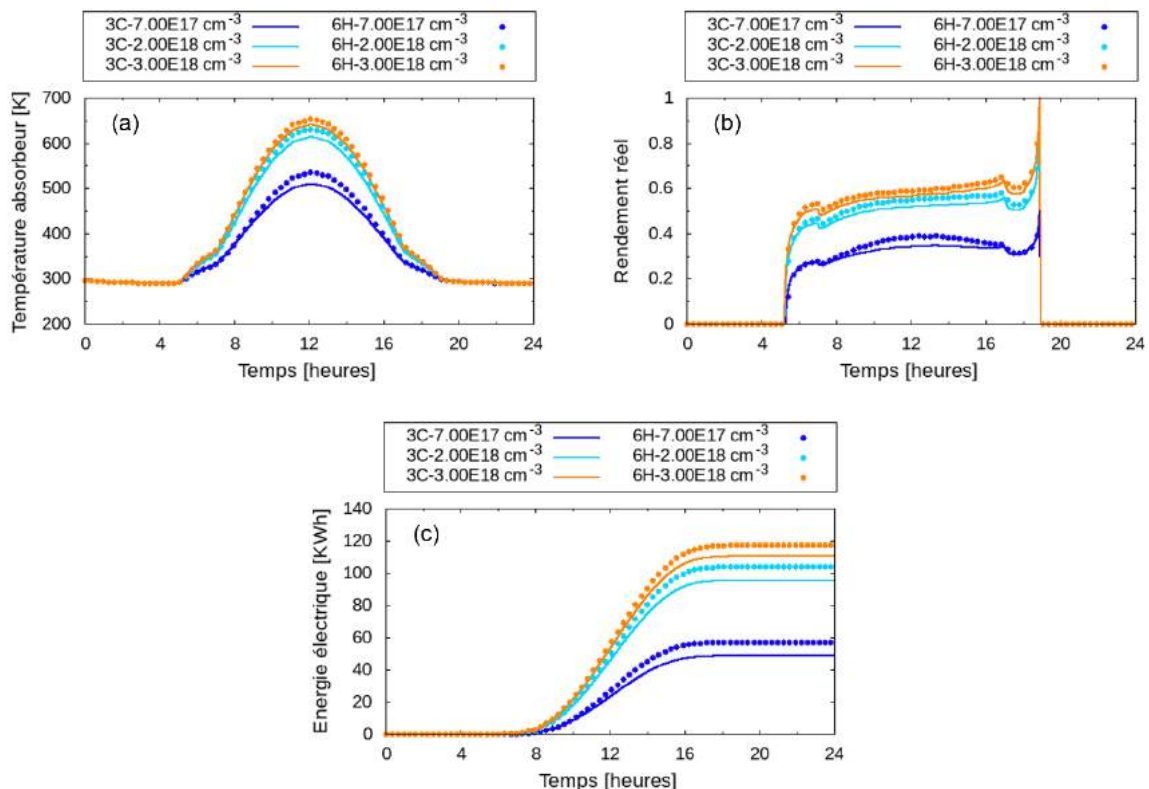


Figure 3-72 : Évolution sur une journée de la température de l'absorbeur en SiC 3C et 6H (a), des différents rendements (b,) et de la production d'énergie électrique(c) pour différents dopages.

3.5.4 Comparaison Absorbeur surfacique et volumique

Dans cette partie, nous avons voulu comparer les performances des absorbeurs surfacique et volumique. A température de fonctionnement identique comme le montre la [figure 3-73-a](#) pour du SiC 6 H avec un taux de dopage $n_e = 3.00 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$, l'absorbeur volumique présente sur la [figure 3-73-b](#) un meilleur rendement de conversion solaire/thermique avec un facteur pratiquement égal à 2. La production d'électricité ramenée à une concentration égale à l'unité et à 1 mètre carré de surface extérieure montre la même tendance sur la [figure 3-73-c](#). Cela ne peut être imputé aux pertes radiatives et convectives extérieures puisque la surface d'échange reste la même dans le cas des deux absorbeurs.

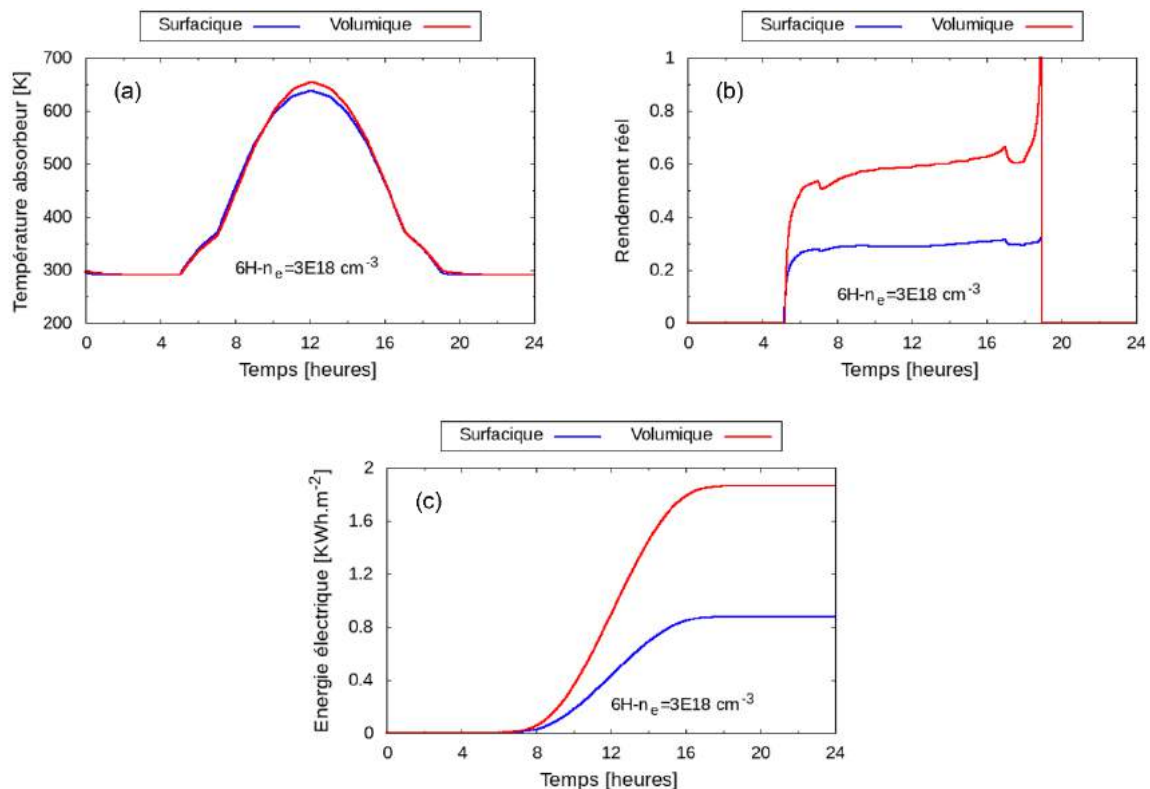


Figure 3-73 : Évolution sur une journée de la température des absorbeurs surfacique et volumique en SiC 6H avec un dopage $n_e = 3.10^{18} \text{ cm}^{-3}$ (a), des rendements correspondants (b), et de la production d'énergie électrique (c).

En nous penchant sur la valeur des flux échangés comme le présente les [figures 3-74-\[a-b\]](#), nous pouvons remarquer que c'est le flux convectif interne (ou flux utile) qui conditionne le plus la performance des absorbeurs. Dans le cas de l'absorbeur surfacique ([figure 3-74-a](#)), le flux convectif interne est du même ordre de grandeur que le flux convectif perdu externe. Le flux radiatif perdu sur la face extérieure étant quant à lui légèrement inférieur aux flux convectifs. C'est en comparant le flux convectif interne transmis à l'air par rapport aux flux radiatif absorbé que nous remarquons qu'il ne représente que le tiers de ce qui pourrait être transmis à l'air. Le comportement est tout autre dans le cas de l'absorbeur volumique comme l'illustre la [figure 3-74-b](#). Les flux perdus par convection et rayonnement sur la surface extérieure sont sensiblement identiques. Cependant, le flux utile transmis à l'air pour faire fonctionner le cycle thermodynamique est nettement plus important et se rapproche plus du flux radiatif

absorbé. Cette différence sur l'amplitude du flux utile entre les absorbeurs surfacique et volumique relève donc de la valeur du coefficient d'échange par convection interne qui est nettement plus important dans le cas des mousses utilisées pour concevoir l'absorbeur volumique. Cette constatation est par ailleurs tout aussi vraie si on l'applique à des absorbeurs composés d'un matériau autre que le carbure de silicium.

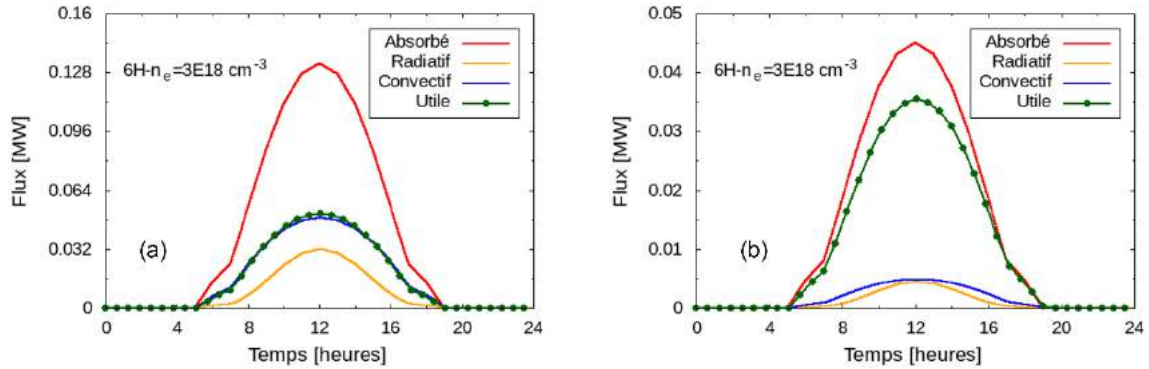


Figure 3-74 : Évolution sur une journée des différents flux pour des absorbeurs surfacique (a) et volumique (b) en SiC 6H avec un dopage $n_e = 3.00 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$.

Conclusions générales et perspectives

Nous avons montré dans un premier temps que le potentiel de Vashishta est le potentiel interatomique le plus adéquat afin de bien reproduire les propriétés radiatives du SiC par DM. L'étude en température menée sur du SiC a permis de valider les fonctions diélectriques simulées avec celles obtenues par expérimentation fournies dans la littérature.

Les simulations menées sur l'influence du dopage à 300K indiquent par comparaison avec les valeurs expérimentales, une limite quant à celles-ci sur le dopage qu'il est possible de simuler et qui diffère selon le polytype de SiC considéré. La concentration électronique maximale pouvant être simulée par DM classique est de $5.78 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ pour le 3C-SiC et $7.7 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ pour le 6H-SiC. Au-delà de ces limites, les interactions électrons-phonons non prises en compte dans les simulations de DM classique, deviennent trop importantes et biaisent l'estimation des propriétés radiatives. Par ailleurs, nous avons remarqué que l'augmentation de la concentration en porteurs de charge entraîne une augmentation de la fréquence longitudinale optique tandis que la fréquence transverse optique et le coefficient d'amortissement restent constants. Cette augmentation de la différence de fréquences entre les deux modes entraîne par suite une légère diminution de l'émissivité dans l'infrarouge.

Dans la gamme de dopage que nous pouvons simuler, nous avons procédé à la simulation de la fonction diélectrique infrarouge pour différentes températures. Les valeurs obtenues ont permis de compléter les données manquantes dans la littérature au sujet des émissivités dans l'infrarouge des structures 3C-SiC et 6H-SiC. Nous avons conclu sur le fait que le dopage ne permet pas de réduire l'émissivité dans l'infrarouge mais permet cependant de fortement augmenter son absorptivité dans le visible. Les simulations menées au moyen d'un modèle nodal à l'échelle de l'absorbeur en SiC ont cependant mis en avant le fait que c'est ce dernier critère qui est prépondérant sur l'optimisation du rendement de conversion solaire/thermique. Les simulations ont par ailleurs montré que la structure 6H-SiC fournit un meilleur rendement de conversion que la structure 3C-SiC et que l'absorbeur volumique montre la même tendance en comparaison d'un absorbeur surfacique. Dans ce dernier cas, la différence provient essentiellement du coefficient d'échange par convection interne qui est plus important dans le cas de l'absorbeur volumique.

Nous avons simulé par DM classique des systèmes de TiC-SiC afin d'évaluer l'influence d'inclusions de nanoparticules de TiC sur les propriétés radiatives d'une matrice de SiC. Nous avons noté dans un premier temps que l'augmentation du rapport volumique $V_{\text{TiC}}/V_{\text{SiC}}$ entraîne une augmentation de la fréquence transverse optique tandis que la fréquence longitudinale optique reste constante. Cette tendance s'oppose à l'observation faite pour le dopage du SiC, c'est-à-dire que la diminution de l'écart de fréquences entre les deux modes se traduit par une augmentation de l'émissivité dans l'infrarouge. Cette étude ne va pas par ailleurs dans le même sens que celle d'Aréna et de ses collaborateurs puisque ces derniers ont montré au contraire que l'inclusion de nanoparticules de TiC dans du SiC réduisait l'émissivité dans l'infrarouge tandis que l'absorptivité dans le visible restait correcte. Cette différence de tendance est sans doute liée au fait que les études expérimentales

d'Aréna prennent en compte d'autres défauts comme la porosité, la présence d'atomes d'oxygène ou encore la rugosité de la structure.

Dans les perspectives envisagées à ce travail, il serait intéressant d'aller plus loin, toujours au moyen de la DM, avec l'étude sur le TiC-SiC et d'évaluer l'impact de la nanoporosité et de la présence d'atomes d'oxygène sur les propriétés thermoradiatives de cette structure. Si l'ajout de ces défauts permet de diminuer l'émissivité dans l'infrarouge d'une matrice de TiC-SiC tandis que l'absorptivité dans le visible reste élevée, alors la sélectivité spectrale en serait améliorée et par suite le rendement de conversion solaire/thermique augmentée.

Publications et Conférences

Articles:

- *Influence of doping on the solar/thermal conversion efficiency of SiC absorbers: a multiscale approach.* M.Madi Halidi, E. Barreau, G. Fugallo, G.Domingues , soumis (2021).
- *SiC-TiC nanocomposite for bulk solar absorbers.* M.Madi Halidi, G.Domingues, G. Fugallo en préparation.
- *Dielectric function of SiC ceramics absorbers at high Temperatures investigated by classical molecular dynamics* M.Madi Halidi, G.Domingues. B. Rousseau, G. Fugallo en préparation.

Contributions orales:

- *Evaluate thermal-radiative properties of SiC through atomistic simulations for Solar tower plant application* M. Madi Halidi, G.Domingues,G. Fugallo **International Conférence MMM Hub ++** Sept 2021, Londres UK ([webinar](#)).

Posters

- *Influence du dopage sur les rendements de conversion solaire/thermique d'un absorbeur volumique en carbure de silicium.* M. Madi Halidi, G. Fugallo, B.Rousseau, G. Domingues **GDR TAMARYS Conférence** Juillet 2019 Nantes.
- *Thermal radiative properties study of real semiconductors by Molecular Dynamic simulations.* M. Madi Halidi, G. Domingues, B.Rousseau, G. Fugallo **Nanoscale Heat Transport Days- SFT** Jan 2020 Paris.
- *Evaluation of doping effects in SiC absorber for solar thermal power generation* M. Madi Halidi, G.Domingues, B.Rousseau, G. Fugallo **Nanoscale and Microscale Heat Transfer Conference**, June 2020 Palermo (Italie) (reportée pour raison covide juin 2022)

Références bibliographiques :

- Abdelrahman, M., P. Fumeaux, et P. Suter. 1979. « Study of Solid-Gas-Suspensions Used for Direct Absorption of Concentrated Solar Radiation ». *Solar Energy* 22(1):45-48. doi: 10.1016/0038-092X(79)90058-6.
- Adachi, Sadao. 2009. *Properties of semiconductor alloys: group-IV, III-V and II-VI semiconductors*. Chichester, U.K: Wiley.
- Allen, M. P., et D. J. Tildesley. 2017. *Computer simulation of liquids*. Second edition. Oxford, United Kingdom: Oxford University Press.
- Andersen, Hans C. 1980. « Molecular Dynamics Simulations at Constant Pressure and/or Temperature ». *The Journal of Chemical Physics* 72(4):2384-93. doi: 10.1063/1.439486.
- Aréna, Hélène, Moustapha Coulibaly, Audrey Soum-Glaude, Alban Jonchère, Guilhem Arrachart, Adel Mesbah, Nicolas Pradeilles, Marion Vandenhende, Alexandre Maître, et Xavier Deschanel. 2020. « Effect of TiC Incorporation on the Optical Properties and Oxidation Resistance of SiC Ceramics ». *Solar Energy Materials and Solar Cells* 213:110536. doi: 10.1016/j.solmat.2020.110536.
- Aréna, Hélène, Moustapha Coulibaly, Audrey Soum-Glaude, Alban Jonchère, Adel Mesbah, Guilhem Arrachart, Nicolas Pradeilles, Marion Vandenhende, Alexandre Maître, et Xavier Deschanel. 2019. « SiC-TiC Nanocomposite for Bulk Solar Absorbers Applications: Effect of Density and Surface Roughness on the Optical Properties ». *Solar Energy Materials and Solar Cells* 191:199-208. doi: 10.1016/j.solmat.2018.11.018.
- Arkundato, Artoto, Moh Hasan, Asril Pramutadi, Abu K. Rivai, et Zaki Su'ud. 2020. « Thermodynamics and Structural Properties of Ti_3SiC_2 in Liquid Lead Coolant ». *Journal of Physics: Conference Series* 1493:012026. doi: 10.1088/1742-6596/1493/1/012026.
- ASTM International. 1998. « Standard Tables for References Solar Spectral Irradiance at Air Mass 1.5: Direct Normal and Hemispherical for a 37 Degree Tilted Surface ». *ASTM G159*, juin, ASTM International (ASTM), 10.
- Avila-Marin, A. L., M. Alvarez-Lara, et J. Fernandez-Reche. 2014. « Experimental Results of Gradual Porosity Wire Mesh Absorber for Volumetric Receivers ». *Energy Procedia* 49:275-83. doi: 10.1016/j.egypro.2014.03.030.
- Bağcı, S., T. Kariş, H. M. Tütüncü, et G. P. Srivastava. 2009. « *Ab Initio* Calculation of Phonons for Bulk TiC and TiC (001) (1 × 1) ». *Physical Review B* 80(3):035405. doi: 10.1103/PhysRevB.80.035405.

- Bai, F., Y. Zhang, X. Zhang, F. Wang, Y. Wang, et Z. Wang. 2014. « Thermal Performance of a Quartz Tube Solid Particle Air Receiver ». *Energy Procedia* 49:284-94. doi: 10.1016/j.egypro.2014.03.031.
- Baskes, M. I. 1992. « Modified Embedded-Atom Potentials for Cubic Materials and Impurities ». *Physical Review B* 46(5):2727-42. doi: 10.1103/PhysRevB.46.2727.
- Bassani, G. F., G. L. Liedl, et Peter Wyder, éd. 2005. *Encyclopedia of condensed matter physics*. 1st ed. Amsterdam ; Boston: Elsevier.
- Bayón, Rocío, Gema San Vicente, et Ángel Morales. 2010. « Durability Tests and Up-Scaling of Selective Absorbers Based on Copper–Manganese Oxide Deposited by Dip-Coating ». *Solar Energy Materials and Solar Cells* 94(6):998-1004. doi: 10.1016/j.solmat.2010.02.006.
- Bernard, Jacques. 2004. *Énergie solaire: calculs et optimisation*. Paris: Ellipses.
- Bilz, Heinz, et Winfried Kress. 1979. *Phonon Dispersion Relations in Insulators*. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg.
- Boretti, Albert. 2018. « Concentrated Solar Power Plants Capacity Factors: A Review ». P. 41-62 in *Nonlinear Approaches in Engineering Applications*, édité par L. Dai et R. N. Jazar. Cham: Springer International Publishing.
- Boretti, Albert, Stefania Castelletto, et Sarim Al-Zubaidy. 2019. « Concentrating solar power tower technology: present status and outlook ». *Nonlinear Engineering* 8(1):10-31. doi: 10.1515/nleng-2017-0171.
- Branicio, Paulo S., Jingyun Zhang, José P. Rino, Aiichiro Nakano, Rajiv K. Kalia, et Priya Vashishta. 2018. « Shock-Induced Microstructural Response of Mono- and Nanocrystalline SiC Ceramics ». *Journal of Applied Physics* 123(14):145902. doi: 10.1063/1.5023915.
- de Brito Mota, F., J. F. Justo, et A. Fazzio. 1998. « Structural Properties of Amorphous Silicon Nitride ». *Physical Review B* 58(13):8323-28. doi: 10.1103/PhysRevB.58.8323.
- Brun, Jean-François. 2003. « Mesure et analyse de l'émittance spectrale d'oxydes diélectriques à haute température. Une approche des phénomènes préfusionnels. »
- Capuano, Raffaele, Thomas Fend, Peter Schwarzbözl, Olena Smirnova, Hannes Stadler, Bernhard Hoffschmidt, et Robert Pitz-Paal. 2016. « Numerical Models of Advanced Ceramic Absorbers for Volumetric Solar Receivers ». *Renewable and Sustainable Energy Reviews* 58:656-65. doi: 10.1016/j.rser.2015.12.068.
- Car, R., et M. Parrinello. 1985. « Unified Approach for Molecular Dynamics and Density-Functional Theory ». *Physical Review Letters* 55(22):2471-74. doi: 10.1103/PhysRevLett.55.2471.

- Carreras, Abel, Atsushi Togo, et Isao Tanaka. 2017. « DynaPhoPy: A Code for Extracting Phonon Quasiparticles from Molecular Dynamics Simulations ». *Computer Physics Communications* 221:221-34. doi: 10.1016/j.cpc.2017.08.017.
- Caughey, D. M., et R. E. Thomas. 1967. « Carrier mobilities in silicon empirically related to doping and field ». *Proceedings of the IEEE* 55(12):2192-93. doi: 10.1109/PROC.1967.6123.
- Chafai, M., A. Jaouhari, A. Torres, R. Antón, E. Martín, J. Jiménez, et W. C. Mitchel. 2001. « Raman Scattering from LO Phonon-Plasmon Coupled Modes and Hall-Effect in n -Type Silicon Carbide 4H-SiC ». *Journal of Applied Physics* 90(10):5211-15. doi: 10.1063/1.1410884.
- Chen, Hui-Lung, Shin-Pon Ju, Tsang-Yu Wu, Shih-Hao Liu, et Hsin-Tsung Chen. 2015. « Investigation of the Mechanical Properties and Local Structural Evolution of $\text{Ti}_{60}\text{Zr}_{10}\text{Ta}_{15}\text{Si}_{15}$ Bulk Metallic Glass during Tensile Deformation: A Molecular Dynamics Study ». *RSC Advances* 5(68):55383-95. doi: 10.1039/C5RA03494A.
- Chen, Rui, Zhenghua Rao, et Shengming Liao. 2018. « Determination of Key Parameters for Sizing the Heliostat Field and Thermal Energy Storage in Solar Tower Power Plants ». *Energy Conversion and Management* 177:385-94. doi: 10.1016/j.enconman.2018.09.065.
- Chen, Xue, Xin-Lin Xia, Xian-Long Meng, et Xian-Hong Dong. 2015. « Thermal Performance Analysis on a Volumetric Solar Receiver with Double-Layer Ceramic Foam ». *Energy Conversion and Management* 97:282-89. doi: 10.1016/j.enconman.2015.03.066.
- Cheng, Z. D., Y. L. He, et F. Q. Cui. 2013. « Numerical Investigations on Coupled Heat Transfer and Synthetical Performance of a Pressurized Volumetric Receiver with MCRT-FVM Method ». *Applied Thermal Engineering* 50(1):1044-54. doi: 10.1016/j.applthermaleng.2012.08.045.
- Colburn, Allan Philip, , American Institute of Chemical Engineers.,. 1933. *A Method of Correlating Forced Convection Heat Transfer Data and a Comparison with Fluid Friction*. [New York]: [American Institute of Chemical Engineers].
- Colombo, L. 2006. « Tight-Binding Molecular Dynamics: A Primer ». *La Rivista Del Nuovo Cimento* 28(10):1-59. doi: 10.1393/ncr/i2006-10007-3.
- Colpier, Ulrika Claeson, et Deborah Cornland. 2002. « The Economics of the Combined Cycle Gas Turbine—an Experience Curve Analysis ». *Energy Policy* 30(4):309-16. doi: 10.1016/S0301-4215(01)00097-0.
- Crocker, Adam, et Fletcher Miller. 2012. « Coupled Fluid Flow and Radiation Modeling of a Cylindrical Small Particle Solar Receiver ». P. 405-12 in *ASME 2012 6th International Conference on Energy Sustainability, Parts A and B*. San Diego, California, USA: American Society of Mechanical Engineers.

- Das, Pritam, et V. P. Chandramohan. 2021. « Experimental Studies of a Laboratory Scale Inclined Collector Solar Updraft Tower Plant with Thermal Energy Storage System ». *Journal of Building Engineering* 41:102394. doi: 10.1016/j.jobbe.2021.102394.
- Davis, R. F., G. Kelner, M. Shur, J. W. Palmour, et J. A. Edmond. 1991. « Thin film deposition and microelectronic and optoelectronic device fabrication and characterization in monocrystalline alpha and beta silicon carbide ». *Proceedings of the IEEE* 79(5):677-701. doi: 10.1109/5.90132.
- Devanathan, R., T. Diaz de la Rubia, et W. J. Weber. 1998. « Displacement Threshold Energies in β -SiC ». *Journal of Nuclear Materials* 253(1-3):47-52. doi: 10.1016/S0022-3115(97)00304-8.
- Devanathan, R., W. J. Weber, et F. Gao. 2001. « Atomic Scale Simulation of Defect Production in Irradiated 3C-SiC ». *Journal of Applied Physics* 90(5):2303-9. doi: 10.1063/1.1389523.
- Dolamore, Fabian, Conan Fee, et Simone Dimartino. 2018. « Modelling Ordered Packed Beds of Spheres: The Importance of Bed Orientation and the Influence of Tortuosity on Dispersion ». *Journal of Chromatography A* 1532:150-60. doi: 10.1016/j.chroma.2017.12.004.
- Domingues, Gilberto, Aubin Mekeze Monthe, Simon Guévelou, et Benoit Rousseau. 2018. « Study by Molecular Dynamics of the Influence of Temperature and Pressure on the Optical Properties of Undoped 3C-SiC Structures ». *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer* 205:220-29. doi: 10.1016/j.jqsrt.2017.10.018.
- Dorner, B., H. Schober, A. Wonhas, M. Schmitt, et D. Strauch. 1998. « The Phonon Dispersion in 6H-SiC Investigated by Inelastic Neutron Scattering ». *The European Physical Journal B* 5(4-6):839-46. doi: 10.1007/s100510050510.
- Drissi, L. B., et F. El Yahyaoui. 2017. « Stability, Magnetic and Electronic Properties of SiC Sheet Doped with B, N, Al and P ». *Bulletin of Materials Science* 40(6):1081-86. doi: 10.1007/s12034-017-1447-4.
- Elliot, Thomas B., éd. 2005. *Trends in semiconductor research*. New York: Nova Science Publishers.
- European Commission et Directorate General for Research. 2005. *SOLGATE: Solar Hybrid Gas Turbine Electric Power System*. Luxembourg: EUR-OP.
- Feitknecht, J. 1971. « Silicon Carbide as a Semiconductor ». P. 48-118 in *Springer Tracts in Modern Physics, Volume 58*. Vol. 58, *Springer Tracts in Modern Physics*, édité par G. Höhler. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg.
- Fend, Thomas, Robert-Pitz-Paal, Oliver Reutter, Jörg Bauer, et Bernhard Hoffschmidt. 2004. « Two Novel High-Porosity Materials as Volumetric Receivers for Concentrated Solar Radiation ». *Solar Energy Materials and Solar Cells* 84(1-4):291-304. doi: 10.1016/j.solmat.2004.01.039.

- Feng, Zhe Chuan, éd. 2004. *SiC power materials: devices and applications*. Berlin ; New York: Springer.
- Fernández, Pablo, et Fletcher J. Miller. 2015. « Performance Analysis and Preliminary Design Optimization of a Small Particle Heat Exchange Receiver for Solar Tower Power Plants ». *Solar Energy* 112:458-68. doi: 10.1016/j.solener.2014.11.012.
- Fernández-García, A., E. Zarza, L. Valenzuela, et M. Pérez. 2010. « Parabolic-Trough Solar Collectors and Their Applications ». *Renewable and Sustainable Energy Reviews* 14(7):1695-1721. doi: 10.1016/j.rser.2010.03.012.
- Frenkel, Daan, et Berend Smit. 2002. *Understanding molecular simulation: from algorithms to applications*. 2nd ed. San Diego: Academic Press.
- Giles, R., et P. Tamayo. 1992. « A parallel scalable approach to short-range molecular dynamics on the CM-5 ». P. 240-45 in *Proceedings Scalable High Performance Computing Conference SHPCC-92*. Williamsburg, VA, USA: IEEE Comput. Soc. Press.
- Global Solar Atlas. 2019. « Global Solar Atlas ». Consulté 10 octobre 2021 (<https://globalsolaratlas.info/support/about>).
- Godson, Lazarus, B. Raja, D. Mohan Lal, et S. Wongwises. 2010. « Enhancement of Heat Transfer Using Nanofluids—An Overview ». *Renewable and Sustainable Energy Reviews* 14(2):629-41. doi: 10.1016/j.rser.2009.10.004.
- Gomez-Garcia, Fabrisio, José González-Aguilar, Gabriel Olalde, et Manuel Romero. 2016. « Thermal and Hydrodynamic Behavior of Ceramic Volumetric Absorbers for Central Receiver Solar Power Plants: A Review ». *Renewable and Sustainable Energy Reviews* 57:648-58. doi: 10.1016/j.rser.2015.12.106.
- Grest, Gary S., Burkhard Dünweg, et Kurt Kremer. 1989. « Vectorized Link Cell Fortran Code for Molecular Dynamics Simulations for a Large Number of Particles ». *Computer Physics Communications* 55(3):269-85. doi: 10.1016/0010-4655(89)90125-2.
- Gretz, J., A. Strub, et W. Palz. 1985. *Thermo-Mechanical Solar Power Plants: Proceedings of the Second International Workshop on the Design, Construction and Operation of Solar Central Receiver Projects, Varese, Italy, 4-8 June, 1984*.
- Guévelou, Simon. 2015. « Caractérisation des propriétés thermo-radiatives de mousses à structure numériquement contrôlée : vers le design d'absorbeurs solaires ». These de doctorat, Nantes.
- Harima, Hiroshi, Shin-ichi Nakashima, et Tomoki Uemura. 1995. « Raman Scattering from Anisotropic LO-phonon–Plasmon–Coupled Mode in *n*-type 4H– and 6H–SiC ». *Journal of Applied Physics* 78(3):1996-2005. doi: 10.1063/1.360174.
- Harris, Gary Lynn, et Institution of Electrical Engineers, éd. 1995. *Properties of Silicon Carbide*. London: INSPEC, the Inst. of Electrical Engineers.

- Heine, Volker, Ching Cheng, et Richard J. Needs. 1991. « The Preference of Silicon Carbide for Growth in the Metastable Cubic Form ». *Journal of the American Ceramic Society* 74(10):2630-33. doi: 10.1111/j.1151-2916.1991.tb06811.x.
- Hischier, I., D. Hess, W. Lipiński, M. Modest, et A. Steinfeld. 2009. « Heat Transfer Analysis of a Novel Pressurized Air Receiver for Concentrated Solar Power via Combined Cycles ». *Journal of Thermal Science and Engineering Applications* 1(4):041002. doi: 10.1115/1.4001259.
- Ho, Clifford K. 2016. « A Review of High-Temperature Particle Receivers for Concentrating Solar Power ». *Applied Thermal Engineering* 109:958-69. doi: 10.1016/j.applthermaleng.2016.04.103.
- Ho, Clifford K., Jesus D. Ortega, Joshua Mark Christian, Julius E. Yellowhair, Daniel A. Ray, John W. Kelton, Gregory Peacock, Charles E. Andracka, et Subhash Shinde. 2016. *Fractal-Like Materials Design with Optimized Radiative Properties for High-Efficiency Solar Energy Conversion*. SAND2016--9526, 1431480. doi: 10.2172/1431480.
- Hockney, R. W., et J. W. Eastwood. 1988. *Computer Simulation Using Particles*. IOP Publishing Ltd.
- Hoffschmidt, Bernhard, Félix M. Télliez, Antonio Valverde, Jesús Fernández, et Valerio Fernández. 2003. « Performance Evaluation of the 200-KWth HiTRec-II Open Volumetric Air Receiver ». *Journal of Solar Energy Engineering* 125(1):87-94. doi: 10.1115/1.1530627.
- Huang, Hanchen, N. M. Ghoniem, J. K. Wong, et M. Baskes. 1995. « Molecular dynamics determination of defect energetics in beta -SiC using three representative empirical potentials ». *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering* 3(5):615-27. doi: 10.1088/0965-0393/3/5/003.
- Iftimie, R., P. Minari, et M. E. Tuckerman. 2005. « Ab Initio Molecular Dynamics: Concepts, Recent Developments, and Future Trends ». *Proceedings of the National Academy of Sciences* 102(19):6654-59. doi: 10.1073/pnas.0500193102.
- International Energy Agency. 2018. « IEA- Annual Energy Outlook 2017 ». Consulté 2 février 2021 (<https://www.eia.gov/outlooks/archive/aeo17/>).
- International Energy Agency. 2019. *World Energy Outlook 2019*.
- International Energy Agency. 2020. « Global Energy Review 2020 ». *IEA Publications* 55.
- Ivanov, P. A., et V. E. Chelnokov. 1992. « Recent developments in SiC single-crystal electronics ». *Semiconductor Science and Technology* 7(7):863-80. doi: 10.1088/0268-1242/7/7/001.
- Jacoboni, Carlo, et Paolo Lugli. 1989. *The Monte Carlo Method for Semiconductor Device Simulation*. Vienna: Springer Vienna.

- JADE Technologie. s. d. « Quelle est la composition d'un panneau solaire ? » *JADE Technologie*. Consulté 10 octobre 2021 (<https://www.jade-technologie.com/composition-dun-panneau-solaire/>).
- Joly, M., Y. Antonetti, M. Python, M. A. Gonzalez Lazo, T. Gasco, A. Hessler-Wyser, J. L. Scartezzini, et A. Schüler. 2014. « Selective Solar Absorber Coatings on Receiver Tubes for CSP – Energy-Efficient Production Process by Sol-Gel Dip-Coating and Subsequent Induction Heating ». *Energy Procedia* 57:487-96. doi: 10.1016/j.egypro.2014.10.202.
- Kaluža, L., B. Orel, G. Dražič, et M. Kohl. 2001. « Sol–Gel Derived CuCoMnOx Spinel Coatings for Solar Absorbers: Structural and Optical Properties ». *Solar Energy Materials and Solar Cells* 70(2):187-201. doi: 10.1016/S0927-0248(01)00024-1.
- Kang, Kyung-Han, Taihee Eun, Myong-Chul Jun, et Byeong-Joo Lee. 2014. « Governing Factors for the Formation of 4H or 6H-SiC Polytype during SiC Crystal Growth: An Atomistic Computational Approach ». *Journal of Crystal Growth* 389:120-33. doi: 10.1016/j.jcrysgro.2013.12.007.
- Karni, J., A. Kribus, P. Doron, R. Rubin, A. Fiterman, et D. Sagie. 1997. « The DIAPR: A High-Pressure, High-Temperature Solar Receiver ». *Journal of Solar Energy Engineering* 119(1):74-78. doi: 10.1115/1.2871853.
- Karni, J., A. Kribus, B. Ostraich, et E. Kochavi. 1998. « A High-Pressure Window for Volumetric Solar Receivers ». *Journal of Solar Energy Engineering* 120(2):101-7. doi: 10.1115/1.2888051.
- Karni, J., A. Kribus, R. Rubin, et P. Doron. 1998. « The “Porcupine”: A Novel High-Flux Absorber for Volumetric Solar Receivers ». *Journal of Solar Energy Engineering* 120(2):85-95. doi: 10.1115/1.2888060.
- Kim, Young-Min, et Byeong-Joo Lee. 2008. « Modified Embedded-Atom Method Interatomic Potentials for the Ti–C and Ti–N Binary Systems ». *Acta Materialia* 56(14):3481-89. doi: 10.1016/j.actamat.2008.03.027.
- Kimoto, Tsunenobu, et James A. Cooper. 2014. *Fundamentals of silicon carbide technology: growth, characterization, devices and applications*. Singapore: Wiley.
- Kitzmler, Kyle, et Fletcher Miller. 2011. « Thermodynamic Cycles for a Small Particle Heat Exchange Receiver Used in Concentrating Solar Power Plants ». *Journal of Solar Energy Engineering* 133(3):031014. doi: 10.1115/1.4004270.
- Korzynietz, R., J. A. Brioso, A. del Río, M. Quero, M. Gallas, R. Uhlig, M. Ebert, R. Buck, et D. Teraji. 2016. « Solugas – Comprehensive Analysis of the Solar Hybrid Brayton Plant ». *Solar Energy* 135:578-89. doi: 10.1016/j.solener.2016.06.020.
- Kreith, Frank, et D. Yogi Goswami, éd. 2007. *Handbook of energy efficiency and renewable energy*. Boca Raton: CRC Press.

- Kresse, G., et J. Furthmüller. 1996. « Efficient Iterative Schemes for *Ab Initio* Total-Energy Calculations Using a Plane-Wave Basis Set ». *Physical Review B* 54(16):11169-86. doi: 10.1103/PhysRevB.54.11169.
- Kresse, G., et D. Joubert. 1999. « From Ultrasoft Pseudopotentials to the Projector Augmented-Wave Method ». *Physical Review B* 59(3):1758-75. doi: 10.1103/PhysRevB.59.1758.
- Kribus, A., P. Doron, R. Rubin, R. Reuven, E. Taragan, S. Duchan, et J. Karni. 2001. « Performance of the Directly-Irradiated Annular Pressurized Receiver (DIAPR) Operating at 20 Bar and 1,200°C ». *Journal of Solar Energy Engineering* 123(1):10-17. doi: 10.1115/1.1345844.
- Kubo, Ryogo. 1957. « Statistical-Mechanical Theory of Irreversible Processes. I. General Theory and Simple Applications to Magnetic and Conduction Problems ». *Journal of the Physical Society of Japan* 12(6):570-86. doi: 10.1143/JPSJ.12.570.
- Kuznetsov, N. I., et A. S. Zubrilov. 1995. « Deep Centers and Electroluminescence in 4H-SiC Diodes with a P-Type Base Region ». *Materials Science and Engineering: B* 29(1-3):181-84. doi: 10.1016/0921-5107(94)04035-3.
- Levinshtein, M. E., Sergey L. Rumyantsev, et Michael Shur, éd. 2001. *Properties of advanced semiconductor materials: GaN, AlN, InN, BN, SiC, SiGe*. New York: Wiley.
- Li, Wanghui, Xiaohu Yao, et Xiaoqing Zhang. 2018. « Planar Impacts on Nanocrystalline SiC: A Comparison of Different Potentials ». *Journal of Materials Science* 53(9):6637-51. doi: 10.1007/s10853-018-1985-1.
- Li, Xiang-Biao, Zhi-Zhan Chen, et Er-Wei Shi. 2010. « Effect of Doping on the Raman Scattering of 6H-SiC Crystals ». *Physica B: Condensed Matter* 405(10):2423-26. doi: 10.1016/j.physb.2010.02.058.
- Lubkoll, M., T. W. von Backström, T. M. Harms, et D. G. Kröger. 2015. « Initial Analysis on the Novel Spiky Central Receiver Air Pre-Heater (SCRAP) Pressurized Air Receiver ». *Energy Procedia* 69:461-70. doi: 10.1016/j.egypro.2015.03.053.
- Martyna, Glenn J., Michael L. Klein, et Mark Tuckerman. 1992. « Nosé–Hoover Chains: The Canonical Ensemble via Continuous Dynamics ». *The Journal of Chemical Physics* 97(4):2635-43. doi: 10.1063/1.463940.
- Matsunaga, Katsuyuki, Yuji Iwamoto, Craig A. J. Fisher, et Hideaki Matsubara. 1999. « Molecular Dynamics Study of Atomic Structures in Amorphous Si-C-N Ceramics. » *Journal of the Ceramic Society of Japan* 107(1251):1025-31. doi: 10.2109/jcersj.107.1025.
- Mc ADAMS, W. H. 1961. *Transmission de la chaleur*. Vol. Volume 1. Dunod.
- McGaughey, Alan J. H., et Jason M. Larkin. 2014. « PREDICTING PHONON PROPERTIES FROM EQUILIBRIUM MOLECULAR DYNAMICS

- SIMULATIONS ». *Annual Review of Heat Transfer* 17(N/A):49-87. doi: 10.1615/AnnualRevHeatTransfer.2013006915.
- Meng, Xian-long, Xin-lin Xia, Shun-de Zhang, Nazmi Sellami, et Tapas Mallick. 2016. « Coupled Heat Transfer Performance of a High Temperature Cup Shaped Porous Absorber ». *Energy Conversion and Management* 110:327-37. doi: 10.1016/j.enconman.2015.12.034.
- Meyer, Madeleine, Vassilis Pontikis, et North Atlantic Treaty Organization, éd. 1991. *Computer simulation in materials science: interatomic potentials, simulation techniques, and applications*. Dordrecht ; Boston: Kluwer Academic Publishers.
- Mnatsakanov, T. T., M. E. Levinshtein, L. I. Pomortseva, et S. N. Yurkov. 2004. « Universal Analytical Approximation of the Carrier Mobility in Semiconductors for a Wide Range of Temperatures and Doping Densities ». *Semiconductors* 38(1):56-60. doi: 10.1134/1.1641133.
- Mnatsakanov, T. T., L. I. Pomortseva, et S. N. Yurkov. 2001. « Semiempirical Model of Carrier Mobility in Silicon Carbide for Analyzing Its Dependence on Temperature and Doping Level ». *Semiconductors* 35(4):394-97. doi: 10.1134/1.1365181.
- Morales, Juan J., et Maria J. Nuevo. 1992. « Comparison of Link-Cell and Neighbourhood Tables on a Range of Computers ». *Computer Physics Communications* 69(2-3):223-28. doi: 10.1016/0010-4655(92)90161-Q.
- Morkoç, H., S. Strite, G. B. Gao, M. E. Lin, B. Sverdlov, et M. Burns. 1994. « Large-band-gap SiC, III-V Nitride, and II-VI ZnSe-based Semiconductor Device Technologies ». *Journal of Applied Physics* 76(3):1363-98. doi: 10.1063/1.358463.
- Munro, R. G. 1997. « Material Properties of a Sintered α -SiC ». *Journal of Physical and Chemical Reference Data* 26(5):1195-1203. doi: 10.1063/1.556000.
- Munro, R. G., et S. J. Dapkunas. 1993. « Corrosion Characteristics of Silicon Carbide and Silicon Nitride ». *Journal of Research of the National Institute of Standards and Technology* 98(5):607. doi: 10.6028/jres.098.040.
- Nakashima, S., H. Harima, N. Ohtani, et M. Katsuno. 2004. « Raman Characterization of Local Electrical Properties and Growth Process in Modulation-Doped 6H-SiC Crystals ». *Journal of Applied Physics* 95(7):3547-52. doi: 10.1063/1.1655682.
- Nakashima, S., T. Kitamura, T. Kato, K. Kojima, R. Kosugi, H. Okumura, H. Tsuchida, et M. Ito. 2008. « Determination of Free Carrier Density in the Low Doping Regime of 4H-SiC by Raman Scattering ». *Applied Physics Letters* 93(12):121913. doi: 10.1063/1.2992063.
- Nakashima, S., T. Mitani, J. Senzaki, H. Okumura, et T. Yamamoto. 2005. « Deep Ultraviolet Raman Scattering Characterization of Ion-Implanted SiC Crystals ». *Journal of Applied Physics* 97(12):123507. doi: 10.1063/1.1931039.

- Narita, Katsutoshi, Yasuto Hijikata, Hiroyuki Yaguchi, Sadafumi Yoshida, et Shinichi Nakashima. 2004. « Characterization of Carrier Concentration and Mobility in N-Type SiC Wafers Using Infrared Reflectance Spectroscopy ». *Japanese Journal of Applied Physics* 43(8A):5151-56. doi: 10.1143/JJAP.43.5151.
- Nosé, Shūichi. 1984. « A Molecular Dynamics Method for Simulations in the Canonical Ensemble ». *Molecular Physics* 52(2):255-68. doi: 10.1080/00268978400101201.
- Nosé, Shuichi. 1984. « A Unified Formulation of the Constant Temperature Molecular Dynamics Methods ». *The Journal of Chemical Physics* 81(1):511-19. doi: 10.1063/1.447334.
- Olalde, G., et G. Flamant. 2012. « Solaire thermodynamique et thermochimie solaire ».
- Olego, Diego, M. Cardona, et P. Vogl. 1982. « Pressure Dependence of the Optical Phonons and Transverse Effective Charge in 3 C -SiC ». *Physical Review B* 25(6):3878-88. doi: 10.1103/PhysRevB.25.3878.
- Olego, Diego, et Manuel Cardona. 1982. « Temperature Dependence of the Optical Phonons and Transverse Effective Charge in 3 C -SiC ». *Physical Review B* 25(6):3889-96. doi: 10.1103/PhysRevB.25.3889.
- Ortega, Jesus D., Joshua M. Christian, et Clifford K. Ho. 2017. « Design and Testing of a Novel Bladed Receiver ». P. V001T05A007 in *ASME 2017 11th International Conference on Energy Sustainability*. Charlotte, North Carolina, USA: American Society of Mechanical Engineers.
- Parrinello, M., et A. Rahman. 1981. « Polymorphic Transitions in Single Crystals: A New Molecular Dynamics Method ». *Journal of Applied Physics* 52(12):7182-90. doi: 10.1063/1.328693.
- Patrick, Lyle. 1968. « Infrared Absorption in SiC Polytypes ». *Physical Review* 167(3):809-13. doi: 10.1103/PhysRev.167.809.
- Piluso, Nicolò, Andrea Severino, Massimo Camarda, Ruggero Anzalone, Andrea Canino, Giuseppe Condorelli, Giuseppe Abbondanza, et Francesco La Via. 2010. « Raman Characterization of Doped 3C-SiC/Si for Different Silicon Substrates and C/Si Ratios ». *Materials Science Forum* 645-648:255-58. doi: 10.4028/www.scientific.net/MSF.645-648.255.
- Pintschovius, L., W. Reichardt, et B. Scheerer. 1978. « Lattice dynamics of TiC ». *Journal of Physics C: Solid State Physics* 11(8):1557-62. doi: 10.1088/0022-3719/11/8/016.
- Plimpton, Steve. 1995. « Fast Parallel Algorithms for Short-Range Molecular Dynamics ». *Journal of Computational Physics* 117(1):1-19. doi: 10.1006/jcph.1995.1039.
- Polak, E., et G. Ribiere. 1969. « Note sur la convergence de méthodes de directions conjuguées ». in *ESAIM: Mathematical Modelling and Numerical Analysis* -

- Modélisation Mathématique et Analyse Numérique*. Vol. tome 3. France: Revue Francaise d'Informatique et de Recherche Opérationnelle 16.
- Polyzakis, A. L., C. Koroneos, et G. Xydis. 2008. « Optimum Gas Turbine Cycle for Combined Cycle Power Plant ». *Energy Conversion and Management* 49(4):551-63. doi: 10.1016/j.enconman.2007.08.002.
- Porter, Lisa J., Ju Li, et Sidney Yip. 1997. « Atomistic Modeling of Finite-Temperature Properties of β -SiC. I. Lattice Vibrations, Heat Capacity, and Thermal Expansion ». *Journal of Nuclear Materials* 246(1):53-59. doi: 10.1016/S0022-3115(97)00035-4.
- Poživil, P., V. Aga, A. Zagorskiy, et A. Steinfeld. 2014a. « A Pressurized Air Receiver for Solar-Driven Gas Turbines ». *Energy Procedia* 49:498-503. doi: 10.1016/j.egypro.2014.03.053.
- Poživil, P., V. Aga, A. Zagorskiy, et A. Steinfeld. 2014b. « A Pressurized Air Receiver for Solar-Driven Gas Turbines ». *Energy Procedia* 49:498-503. doi: 10.1016/j.egypro.2014.03.053.
- Pritzkow, Walter E. C. 1991. « Pressure Loaded Volumetric Ceramic Receiver ». *Solar Energy Materials* 24(1-4):498-507. doi: 10.1016/0165-1633(91)90086-Z.
- Protik, Nakib Haider, Ankita Katre, Lucas Lindsay, Jesús Carrete, Natalio Mingo, et David Broido. 2017. « Phonon Thermal Transport in 2H, 4H and 6H Silicon Carbide from First Principles ». *Materials Today Physics* 1:31-38. doi: 10.1016/j.mtphys.2017.05.004.
- Pye, John, Joe Coventry, Felix Venn, José Zapata, Ehsan Abbasi, Charles-Alexis Asselineau, Greg Burgess, Graham Hughes, et Will Logie. 2017. « Experimental testing of a high-flux cavity receiver ». P. 110011 in. Abu Dhabi, United Arab Emirates.
- Radosevich, L. G. 1988. *Final Report on the Power Production Phase of the 10 MW/Sub e/ Solar Thermal Central Receiver Pilot Plant*. SAND-87-8022, 7120228. doi: 10.2172/7120228.
- Rapaport, D. C. 1988. « Large-Scale Molecular Dynamics Simulation Using Vector and Parallel Computers ». *Computer Physics Reports* 9(1):1-53. doi: 10.1016/0167-7977(88)90014-7.
- Réseau de Transport d'Électricité. 2019. « RTE Bilan électrique 2018 ».
- Réseau de Transport d'Électricité. 2020. « RTE Bilan électrique 2019 ».
- Rino, José P., Ingvar Ebbsjö, Paulo S. Branicio, Rajiv K. Kalia, Aiichiro Nakano, Fuyuki Shimojo, et Priya Vashishta. 2004. « Short- and Intermediate-Range Structural Correlations in Amorphous Silicon Carbide: A Molecular Dynamics Study ». *Physical Review B* 70(4):045207. doi: 10.1103/PhysRevB.70.045207.
- Roldán, M. I., A. Avila-Marin, M. Alvarez-Lara, et J. Fernandez-Reche. 2015. « Experimental and Numerical Characterization of Ceramic and Metallic

- Absorbers under Lab-Scale Conditions ». *Energy Procedia* 69:523-31. doi: 10.1016/j.egypro.2015.03.061.
- Romero, Manuel, et José González-Aguilar. 2014. « Solar Thermal CSP Technology: Solar Thermal CSP Technology ». *Wiley Interdisciplinary Reviews: Energy and Environment* 3(1):42-59. doi: 10.1002/wene.79.
- Roschke, M., et F. Schwierz. 2001. « Electron mobility models for 4H, 6H, and 3C SiC [MESFETs] ». *IEEE Transactions on Electron Devices* 48(7):1442-47. doi: 10.1109/16.930664.
- Salilih, Elias Mesfin, et Nidal H. Abu-Hamdeh. 2021. « Charging Process of Thermal Energy Storage System under Varying Incident Heat Flux: Interaction the Fluid Neighbour Nodes and Particles in Order to Heat Transfer ». *Journal of Thermal Analysis and Calorimetry* 144(6):2423-34. doi: 10.1007/s10973-020-10539-8.
- Schwarzbözl, Peter, Reiner Buck, Chemi Sugarmen, Arik Ring, Ma Jesús Marcos Crespo, Peter Altwegg, et Juan Enrile. 2006. « Solar Gas Turbine Systems: Design, Cost and Perspectives ». *Solar Energy* 80(10):1231-40. doi: 10.1016/j.solener.2005.09.007.
- Sciti, Diletta, Laura Silvestroni, Luca Mercatelli, Jean-Louis Sans, et Elisa Sani. 2013. « Suitability of Ultra-Refractory Diboride Ceramics as Absorbers for Solar Energy Applications ». *Solar Energy Materials and Solar Cells* 109:8-16. doi: 10.1016/j.solmat.2012.10.004.
- Sedighi, Mohammadreza, Ricardo Vasquez Padilla, Robert A. Taylor, Maree Lake, Iman Izadgoshasb, et Andrew Rose. 2019. « High-Temperature, Point-Focus, Pressurised Gas-Phase Solar Receivers: A Comprehensive Review ». *Energy Conversion and Management* 185:678-717. doi: 10.1016/j.enconman.2019.02.020.
- Serrano, J., J. Stremper, M. Cardona, M. Schwoerer-Böhning, H. Requardt, M. Lorenzen, B. Stojetz, P. Pavone, et W. J. Choyke. 2002. « Determination of the Phonon Dispersion of Zinc Blende (3C) Silicon Carbide by Inelastic x-Ray Scattering ». *Applied Physics Letters* 80(23):4360-62. doi: 10.1063/1.1484241.
- Shinoda, Wataru, Motoyuki Shiga, et Masuhiro Mikami. 2004. « Rapid Estimation of Elastic Constants by Molecular Dynamics Simulation under Constant Stress ». *Physical Review B* 69(13):134103. doi: 10.1103/PhysRevB.69.134103.
- Spitz, J., A. Aubert, J. M. Behaghel, S. Berthier, J. Lafait, et J. Rivory. 1979. « Matériaux sélectifs pour la conversion photothermique de l'énergie solaire ». *Revue de Physique Appliquée* 14(1):67-80. doi: 10.1051/rphysap:0197900140106700.
- Stukowski, Alexander. 2010. « Visualization and analysis of atomistic simulation data with OVITO—the Open Visualization Tool ». *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering* 18(1):015012. doi: 10.1088/0965-0393/18/1/015012.

- Sun, Tao, Xiao Shen, et Philip B. Allen. 2010. « Phonon Quasiparticles and Anharmonic Perturbation Theory Tested by Molecular Dynamics on a Model System ». *Physical Review B* 82(22):224304. doi: 10.1103/PhysRevB.82.224304.
- Sunkari, Swapna, M. S. Mazzola, J. P. Mazzola, Hrishikesh Das, et J. L. Wyatt. 2005. « Investigation of Longitudinal-Optical Phonon-Plasmon Coupled Modes in SiC Epitaxial Film Using Fourier Transform Infrared Reflection ». *Journal of Electronic Materials* 34(4):320-23. doi: 10.1007/s11664-005-0103-8.
- Szlufarska, Izabela, Rajiv K. Kalia, Aiichiro Nakano, et Priya Vashishta. 2004. « Nanoindentation-Induced Amorphization in Silicon Carbide ». *Applied Physics Letters* 85(3):378-80. doi: 10.1063/1.1774252.
- Szlufarska, Izabela, Rajiv K. Kalia, Aiichiro Nakano, et Priya Vashishta. 2005. « Atomistic Mechanisms of Amorphization during Nanoindentation of SiC: A Molecular Dynamics Study ». *Physical Review B* 71(17):174113. doi: 10.1103/PhysRevB.71.174113.
- Szlufarska, Izabela, Rajiv K. Kalia, Aiichiro Nakano, et Priya Vashishta. 2007. « A Molecular Dynamics Study of Nanoindentation of Amorphous Silicon Carbide ». *Journal of Applied Physics* 102(2):023509. doi: 10.1063/1.2756059.
- Szpunar, Barbara, Linu Malakkal, Jahidur Rahman, et Jerzy A. Szpunar. 2018. « Atomistic Modeling of Thermo-mechanical Properties of Cubic SiC ». *Journal of the American Ceramic Society* 101(10):4753-62. doi: 10.1111/jace.15712.
- Tang, Meijie, et Sidney Yip. 1995. « Atomistic Simulation of Thermomechanical Properties of β -SiC ». *Physical Review B* 52(21):15150-59. doi: 10.1103/PhysRevB.52.15150.
- Tersoff, J. 1989. « Modeling Solid-State Chemistry: Interatomic Potentials for Multicomponent Systems ». *Physical Review B* 39(8):5566-68. doi: 10.1103/PhysRevB.39.5566.
- Togo, Atsushi, et Isao Tanaka. 2015. « First Principles Phonon Calculations in Materials Science ». *Scripta Materialia* 108:1-5. doi: 10.1016/j.scriptamat.2015.07.021.
- Troffer, T., M. Schadt, T. Frank, H. Itoh, G. Pensl, J. Heindl, H. P. Strunk, et M. Maier. 1997. « Doping of SiC by Implantation of Boron and Aluminum ». *Physica Status Solidi (a)* 162(1):277-98. doi: 10.1002/1521-396X(199707)162:1<277::AID-PSSA277>3.0.CO;2-C.
- Valdés, Manuel, Ma Dolores Durán, et Antonio Rovira. 2003. « Thermoeconomic Optimization of Combined Cycle Gas Turbine Power Plants Using Genetic Algorithms ». *Applied Thermal Engineering* 23(17):2169-82. doi: 10.1016/S1359-4311(03)00203-5.

- Vant-Hull, Lorin L. 2008. « Concentrating Solar Thermal Power (CSP) ». P. 68-74 in *Proceedings of ISES World Congress 2007 (Vol. I – Vol. V)*, édité par D. Y. Goswami et Y. Zhao. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg.
- Varadachari, Chandrika, et Ritabrata Bhowmick. 2009. « *Ab initio* derivation of a dataset of real temperature thermodynamic properties: Case study with SiC ». *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering* 17(7):075006. doi: 10.1088/0965-0393/17/7/075006.
- Wang, P., J. B. Li, F. W. Bai, D. Y. Liu, C. Xu, L. Zhao, et Z. F. Wang. 2017. « Experimental and Theoretical Evaluation on the Thermal Performance of a Windowed Volumetric Solar Receiver ». *Energy* 119:652-61. doi: 10.1016/j.energy.2016.11.024.
- Wang, Qian, Nan Gui, Xiaoli Huang, Xingtuan Yang, Jiyuan Tu, et Shengyao Jiang. 2021. « The Effect of Temperature and Cascade Collision on Thermal Conductivity of 3C-SiC: A Molecular Dynamics Study ». *International Journal of Heat and Mass Transfer* 180:121822. doi: 10.1016/j.ijheatmasstransfer.2021.121822.
- Weinstein, Lee A., James Loomis, Bikram Bhatia, David M. Bierman, Evelyn N. Wang, et Gang Chen. 2015. « Concentrating Solar Power ». *Chemical Reviews* 115(23):12797-838. doi: 10.1021/acs.chemrev.5b00397.
- World Bank Group. 2021. *World Bank CSP Report Concentrating Solar Power Clean Power on Demand 24/7.Pdf*. World Bank.
- Wu, Zhiyong, Cyril Caliot, Fengwu Bai, Gilles Flamant, Zhifeng Wang, Jinsong Zhang, et Chong Tian. 2010. « Experimental and Numerical Studies of the Pressure Drop in Ceramic Foams for Volumetric Solar Receiver Applications ». *Applied Energy* 87(2):504-13. doi: 10.1016/j.apenergy.2009.08.009.
- Wuchina, Eric, Elizabeth Opila, Mark Opeka, Bill Fahrenholtz, et Inna Talmy. 2007. « UHTCs: Ultra-High Temperature Ceramic Materials for Extreme Environment Applications ». *The Electrochemical Society Interface* 16(4):30-36. doi: 10.1149/2.F04074IF.
- Yan, Hong, Xiao Hu, et Hannes Jónsson. 1994. « Atomic Structure of β -SiC(100) Surfaces: A Study Using the Tersoff Potential ». *Surface Science* 316(1-2):181-88. doi: 10.1016/0039-6028(94)91138-X.
- Yang, Jian. 2017. « Introduction ». P. 1-11 in *Study on Ground Moving Target Indication and Imaging Technique of Airborne SAR*, Springer Theses. Singapore: Springer Singapore.
- Yoo, W. S., et H. Matsunami. 1992. « Growth Simulation of SiC Polytypes and Application to DPB-Free 3C-SiC on Alpha-SiC Substrates ». P. 66-77 in *Amorphous and Crystalline Silicon Carbide IV*. Vol. 71, *Springer Proceedings in Physics*, édité par C. Y. Yang, M. M. Rahman, et G. L. Harris. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg.

- Yu, Qiang, Xiaolei Li, Zhifeng Wang, et Qiangqiang Zhang. 2020. « Modeling and Dynamic Simulation of Thermal Energy Storage System for Concentrating Solar Power Plant ». *Energy* 198:117183. doi: 10.1016/j.energy.2020.117183.
- Yugami, H., S. Nakashima, A. Mitsuishi, A. Uemoto, M. Shigeta, K. Furukawa, A. Suzuki, et S. Nakajima. 1987. « Characterization of the Free-carrier Concentrations in Doped B-SiC Crystals by Raman Scattering ». *Journal of Applied Physics* 61(1):354-58. doi: 10.1063/1.338830.
- Zhang, Dong-Bo, Tao Sun, et Renata M. Wentzcovitch. 2014. « Phonon Quasiparticles and Anharmonic Free Energy in Complex Systems ». *Physical Review Letters* 112(5):058501. doi: 10.1103/PhysRevLett.112.058501.
- Zhao, Liang, Masud Alam, Junjie Zhang, Rebecca Janisch, et Alexander Hartmaier. 2020. « Amorphization-Governed Elasto-Plastic Deformation under Nanoindentation in Cubic (3C) Silicon Carbide ». *Ceramics International* 46(8):12470-79. doi: 10.1016/j.ceramint.2020.02.009.
- Zhu, Jianqin, Kai Wang, Hongwei Wu, Dunjin Wang, Juan Du, et A. G. Olabi. 2015. « Experimental Investigation on the Energy and Exergy Performance of a Coiled Tube Solar Receiver ». *Applied Energy* 156:519-27. doi: 10.1016/j.apenergy.2015.07.013.
- Zhu, Qibin, et Yimin Xuan. 2017. « Pore Scale Numerical Simulation of Heat Transfer and Flow in Porous Volumetric Solar Receivers ». *Applied Thermal Engineering* 120:150-59. doi: 10.1016/j.applthermaleng.2017.03.141.

Liste des figures

Figure 1-1 : Exemple de centrales thermiques utilisant des ressources non renouvelables. Centrales à gaz de Saint Avold, France (a). Centrale nucléaire de Civaux, France (b). Centrale à charbon du Havre, France (c). Troisième tranche de la centrale à fuel de Cordemais (d).	7
Figure 1-2 : Répartition des modes de production d'électricité en 2018. (a) Répartition mondiale (International Energy Agency 2019). (b) Répartition en France (Réseau de Transport d'Électricité 2019).....	7
Figure 1-3 : Exemple de technologies de conversion de ressources renouvelables en électricité. Centrale géothermique - Bouillante en Guadeloupe, France (a). Centrale hydraulique - Grand'Maison (1800MW) en Isère, France (b). Parc éolien - Fruges (140MW) au Pas de Calais, France (c). Centrale de cogénération de bois - Smurfit Kappa Biganos (140MW) en Gironde, France (d).	8
Figure 1-4 : Estimations de la répartition des modes de production d'électricité à l'horizon 2040. Estimations selon la politique énergétique actuelle (a). Estimations selon une politique axée sur le développement durable (b). (International Energy Agency 2019)	9
Figure 1-5 : Carte mondiale de l'irradiation normale directe en $KW.m - 2$ (Global Solar Atlas 2019).	10
Figure 1-6 : Eclairement solaire monochromatique hors atmosphère (noire), et au sol à 37° sud (rouge) (ASTM International 1998).	10
Figure 1-7 : Schéma de principe d'une cellule PV (a). Composition d'un panneau PV classique (b). (JADE Technologie s. d.).....	12
Figure 1-8 : Coût de l'électricité selon le mode de conversion de l'énergie solaire. Installation PV avec un module de stockage de 9 heures d'une durée de vie de 10 ans (orange), et de 15 ans (en vert). Installation CSTC avec un module de stockage de 9 heures avec une durée de vie comprise entre 25 et 30 ans. (World Bank Group 2021).	13
Figure 1-9 : Schéma simplifié d'une centrale solaire thermodynamique à concentration.	14
Figure 1-10 : Schéma de principe des différentes technologies de CSTC : centrale à tour (a), miroirs de Fresnel (b), miroirs paraboliques (c) et miroirs cylindro-paraboliques (d).	16
Figure 1-11 : Exemple de technologies de CSTC. Centrale solaire à tour, Ivanpah - Mojave, Californie, USA (a). Centrale Puerto Errado II, Murcia, Espagne (b). Unité de production à miroir parabolique avec un moteur de Stirling, plateforme d'Albuquerque – Nouveau-Mexique, USA (c). Centrale SGES (354MW), Mojave – Californie, USA (d).	17
Figure 1-12 : Schéma de principe d'une centrale solaire thermodynamique concentré à tour.	19

Figure 1-13 : Répartition des étapes de conversion de l'énergie dans une centrale à tour.	20
Figure 1-14 : Bilan d'énergie au niveau du récepteur solaire.....	20
Figure 1-15 : Schéma de principe et profil de température des différentes technologies de récepteur solaire. Récepteur volumique poreux (a). Récepteur volumique à particules (b). Récepteur surfacique (c).....	23
Figure 1-16 : Les deux types de configurations des récepteurs solaires sur la tour réceptrice : à cavité (a) et externe (b). (Guévelou 2015)	23
Figure 1-17 : Différents récepteurs surfaciques. (a) Solugas, récepteur tubulaire (Korzynietz et al. 2016). (b) Solhyco, récepteur tubulaire avec une vitre en quartz (Lubkoll et al. 2015). (c) Solgate, récepteur tubulaire (European Commission et Directorate General for Research 2005). (d) Récepteur à écran plat (Ortega, Christian, et Ho 2017). (e) Récepteur tubulaire dans une cavité cylindrique (Zhu et al. 2015). (f) Récepteur tubulaire SG4, récepteur à vapeur directe (Pye et al. 2017). (g) Récepteur à lamelle (Ho et al. 2016).....	24
Figure 1-18 : Différents récepteurs volumiques. (a) Récepteur PLVC5 (Pritzkow 1991). (b) Récepteur DIAPR avec une fenêtre d'ouverture (Karni, Kribus, Ostraich, et al. 1998). (c) Récepteur DIAPR avec une fenêtre d'ouverture et un absorbeur en porcépic (Kribus et al. 2001). (d) Récepteur REFOS (Schwarzbözl et al. 2006). (e) Récepteur PLVCR-500 avec un second concentrateur (SC) (Pritzkow 1991). (f) Récepteur cylindrique avec un absorbeur de SiC (Wang et al. 2017). (g) Récepteur à cavité avec des particules suspendues (Fernández et Miller 2015). (h) Récepteur tubulaire en quartz avec des particules suspendues (Bai et al. 2014).	26
Figure 1-19 : Evolution du rendement de Carnot en fonction de la température de travail. La limite de température des récepteurs métalliques (vert), température optimum de travail des céramiques (rouge).....	27
Figure 1-20 : Sites d'occupation (A, B et C) dans un système hexagonal compact..	30
Figure 1-21 : Schéma illustrant les structures des principaux polytypes du SiC. Les cercles jaunes correspondent à l'atome de carbone et les cercles bleus à celui de silicium.....	31
Figure 1-22 : Mailles primitives et vecteurs de translations fondamentaux du SiC cubique (a) et hexagonal (b).....	31
Figure 1-23 : Points de haute symétrie et première zone de Brillouin du SiC cubique (a) et des polytypes hexagonaux de SiC (b).....	32
Figure 1-24 : Les gaps d'énergies de la zone interdite de divers polytypes de SiC à 2 K (Kimoto et Cooper 2014).	33
Figure 2-1 : Répartition spectrale du spectre électromagnétique (Guévelou 2015)..	38
Figure 2-2 : Description géométrique de l'émission d'une surface élémentaire dS ...	38
Figure 2-2-3 : Luminance normalisée d'un corps noir (Brun 2003).....	40
Figure 2-4 : Représentation schématique du déplacement du cortège électronique.	43
Figure 2-5 : Atténuation de la luminance monochromatique à travers un milieu.	47
Figure 2-6 : Représentation du rayonnement à l'interface d'un milieu.	48

Figure 2-7 : Schématisation des rayons lumineux dans une lame d'épaisseur d optiquement polie	49
Figure 2-8 : Principe de l'application des conditions aux limites suivant la direction x	56
Figure 2-9 : Dispersion des phonons harmoniques du SiC 3C simulé avec le potentiel de Vashishta évaluée à 0 K. Les traits bleus correspondent aux modes acoustiques et les rouges aux modes optiques. Les lettres L, T, O et A sont les abréviations respectives de longitudinal, transversal, optique et acoustique.	62
Figure 2-10 : Schéma suivi pour déterminer le potentiel interatomique à utiliser.....	62
Figure 2-11 : DOS évaluée pour un système SiC 3C simulé avec le potentiel de Vashishta.....	63
Figure 2-12 : Correction de la température de simulation par rapport à la température réelle.....	64
Figure 2-13 : Fonction d'autocorrélation des densités de courant (gauche), fonction diélectrique complexe (droite). Les courbes rouge et bleue correspondent respectivement à la partie imaginaire et à la partie réelle de la fonction diélectrique obtenue par la DMC, les courbes verte et orange correspondent au fit avec un modèle de Lorentz.....	67
Figure 2-14 : Schématisation de la centrale solaire thermodynamique à tour.	68
Figure 2-15 : Modèle nodal associé à un absorbeur solaire de forme cylindrique. ...	70
Figure 3-1 : Image plan (a) et 3D (b) de la maille conventionnelle de la structure SiC 3C de type Zinc-blende (ZnS). Image plan (c) et 3D (d) de la maille conventionnelle de la structure TiC- β de type NaCl. Les sphères bleues correspondent aux atomes de carbone, les jaunes aux atomes de silicium et les grises aux atomes de titane.	85
Figure 3-2 : Image 3D de la boîte de simulation de la structure SiC 3C dont la maille conventionnelle a été répétée six fois dans les trois directions de l'espace (a), même chose pour la structure TiC- β . La notation suivante : 6x6x6 indique que la maille conventionnelle a été répétée six fois dans la direction x, y et z. Cette notation sera utilisée pour définir les dimensions des échantillons étudiés.....	85
Figure 3-3 : Évolution de l'énergie atomique en fonction du paramètre de maille lors de la minimisation de l'énergie du système SiC 3C simulé avec le potentiel de Tersoff (a), avec le potentiel MEAM (b), avec le potentiel de Vashishta (c) et du système TiC- β (d) simulé avec le potentiel MEAM.	86
Figure 3-4 : Profil de température (rouge) et d'énergie (bleu) du système SiC 3C simulé avec le potentiel de Tersoff (a), avec le potentiel MEAM (b), avec le potentiel de Vashishta (c) et du système TiC- β (d) simulé avec le potentiel MEAM.	87
Figure 3-5 : Fonction de distribution radiale du système SiC 3C (a) simulé avec le potentiel de Tersoff (vert), avec le potentiel MEAM (bleu), avec le potentiel de Vashishta (rouge) et du système TiC- β (b) simulé avec le potentiel MEAM.....	88
Figure 3-6 : Courbes de dispersion des phonons harmoniques obtenues pour le système SiC 3C simulé avec le potentiel de Tersoff (a), avec le potentiel MEAM (b), avec le potentiel de Vashishta (c) et du système TiC- β (d) simulé avec le potentiel MEAM. Les traits pleins correspondent à la simulation réalisée dans une boîte de taille	

2x2x2, les points rouges à la simulation réalisée dans une boîte de taille 3x3x3, les bleus à une boîte de taille 4x4x4 et les grises à une boîte de taille 5x5x5.	89
Figure 3-7 : Courbes de dispersion des phonons harmoniques obtenues pour le système SiC 3C simulé avec le potentiel de Tersoff (a), avec le potentiel MEAM (b), avec le potentiel de Vashishta (c) et du système TiC- β (d) simulé avec le potentiel MEAM. Les courbes rouges correspondent aux résultats de nos simulations, les bleues aux simulations ab-initio (Bağcı et al. 2009; Varadachari et Bhowmick 2009) et les points noirs aux valeurs expérimentales (Pintschovius et al. 1978; Serrano et al. 2002).	91
Figure 3-8 : Densité d'état phononique (DOS) obtenue pour le système SiC 3C simulé avec le potentiel de Vashishta dans une boîte de taille 6x6x6 contenant 1728 atomes (bleu) et de taille 25x25x25 contenant 120000 atomes (rouge).	92
Figure 3-9 : Densité d'état phononique obtenue pour le système SiC 3C simulé avec le potentiel de Tersoff thermostaté à 0.1 K (bleu) et à 300 K (rouge). Les points correspondent au DOS issue de la littérature (Bilz et Kress 1979).	92
Figure 3-10 : Densité d'état phononique obtenue pour le système SiC 3C (a) simulé avec le potentiel MEAM (bleu), avec le potentiel de Vashishta (rouge) et pour le système TiC- β (b) simulé avec le potentiel MEAM. Les points correspondent au DOS issue de la littérature (Bağcı et al. 2009; Bilz et Kress 1979).	93
Figure 3-11 : Correction de la température de simulation par rapport à la température réelle évaluée pour le système SiC 3C simulé avec le potentiel de Vashishta (rouge), le potentiel MEAM (bleu) et pour le système TiC- β (vert) simulé avec le potentiel MEAM.	93
Figure 3-12 : Profil de température (rouge) et d'énergie (bleu) du système SiC 3C simulé avec le potentiel Vashishta avec un paramètre de maille de 4.422 Å (a). Courbes de dispersion des phonons harmoniques (b) obtenues pour le même système dans les mêmes conditions (rouge). Densité d'état phononique (c) obtenue pour un SiC 3C avec un paramètre de maille de 4.3581 Å (bleu) et de 4.422 Å (rouge). Correction de la température de simulation par rapport à la température réelle (d) évaluée pour le système SiC 3C avec un paramètre de maille de 4.3581 Å (bleu) et de 4.422 Å (rouge).	95
Figure 3-13 : (a) Courbes de dispersion des phonons harmoniques pour un système SiC 3C de taille 6x6x6 simulé avec le potentiel de Vashishta seul avec un rayon de coupure de 7.5 Å (traits noirs), de 15 Å (points verts), de 20 Å (points bleus) et de 30 Å (point rouge). (b) Courbes de dispersion des phonons harmoniques pour un système SiC 3C de taille 6x6x6 simulé avec le potentiel de Vashishta seul (traits noirs), avec ajout du terme coulombien longue distance pour une boîte de taille 3x3x3 (traits verts), de taille 5x5x5 (traits bleus) et de taille 10x10x10 (traits rouges).	97
Figure 3-14 : Paramètres de Lorentz en fonction du temps de la mise à l'équilibre thermique, mode TO (a), mode LO (b) et coefficient d'amortissement (c). Système thermostaté à 300 K, acquisition des mesures pendant 120 ps.	100
Figure 3-15 : Paramètres de Lorentz en fonction du temps de la mise à l'équilibre thermique, mode TO (a), mode LO (b) et coefficient d'amortissement (c). Système thermostaté à 1500 K, acquisition des mesures pendant 120 ps.	101

Figure 3-16 : Paramètres de Lorentz en fonction du temps de la mise à l'équilibre thermique, mode TO (a), mode LO (b) et coefficient d'amortissement (c). Système thermostaté à 1500 K pendant 30 ps.	102
Figure 3-17 : Paramètres du modèle de Lorentz en fonction du temps d'acquisition des mesures, mode TO (a), mode LO (b) et coefficient d'amortissement (c). Simulation réalisée avec une boîte de dimension 10x10x10 thermostatée à 1500 K pendant 30 ps.	103
Figure 3-18 : Paramètres du modèle de Lorentz en fonction du volume de la boîte de simulation, mode TO (a), mode LO (b) et coefficient d'amortissement (c). Échantillons équilibrés à 300 K.	103
Figure 3-19 : Paramètres du modèle de Lorentz en fonction du volume de la boîte de simulation, mode TO (a), mode LO (b) et coefficient d'amortissement (c). Échantillons équilibrés à 1500 K.	104
Figure 3-20 : Partie imaginaire de la fonction diélectrique (a), partie réelle de la fonction diélectrique (b). Les courbes vertes correspondent au système simulé à une température réelle de 300K, les bleues à 600K, les jaunes à 900K, les oranges à 1200K et les rouges à 1500K.	105
Figure 3-21 : Paramètres du modèle de Lorentz en fonction de la température, mode TO (a), mode LO (b) et coefficient d'amortissement (c). Les points noirs correspondent aux données expérimentales Olego et Cardona 1982 (Olego et Cardona 1982), les traits rouges aux simulations avec un paramètre de maille de 4.422Å et les vertes aux simulations de DM dans la littérature (Domingues et al. 2018) avec paramètre de maille 4.3705 Å.	106
Figure 3-22 : Paramètres de Lorentz en fonction du volume de la boîte de simulation, mode TO (a), mode LO (b) et coefficient d'amortissement (c). Système dopé à l'azote avec une concentration électronique de $5.78 \times 10^{18} \text{cm}^{-3}$ thermostaté à 300 K.	109
Figure 3-23 : Paramètre de Lorentz à 300 K en fonction du dopage, mode TO (a), mode LO (b) et coefficient d'amortissement (c). Les points noirs correspondent aux données expérimentales, les rouges aux simulations, le trait noir correspond à la tendance d'évolution obtenue expérimentalement.	110
Figure 3-24 : Partie imaginaire (a) et partie réelle (b) de la fonction diélectrique calculée pour SiC 3C dopé ($n_e = 5,78 \times 10^{18} \text{cm}^{-3}$).	111
Figure 3-25 : Evolution des paramètres du modèle de Lorentz en fonction de la température et du dopage, mode TO(a), mode LO (b) et coefficient d'amortissement (c).	111
Figure 3-26 : Spectre de réflectance (a, c, e, g et i) et d'absorptance (b, d, f, h et i) obtenus pour le SiC 3C à différentes températures et pour différents niveaux de dopage.	113
Figure 3-27 : Émissivité monochromatique (a) et absorptivité monochromatique (b) du SiC 3C en fonction du dopage et de la température.	113
Figure 3-28 : Image de la maille conventionnelle de la structure SiC 6H (a) et d'une boîte de dimension 8x8x4 (b).	114
Figure 3-29 : Minimisation de l'énergie du système, paramètres de maille a (a) et c (b).	114

Figure 3-30 : Courbes de dispersion des phonons harmoniques pour un système SiC 6H de différentes dimensions.	115
Figure 3-31 : (a) Profil de température (rouge) et d'énergie (bleu) du système. Courbes de dispersion des phonons harmoniques simulées (rouges), issues de la littérature par la DM ab-initio (bleus), expérimentales (points noirs).	116
Figure 3-32 : (a) Profil de température (rouge) et d'énergie (bleu) du système. (b) Courbes de dispersion des phonons harmoniques simulées (rouges), issues de la littérature par la DM ab-initio (bleus), expérimentales (points noirs).	116
Figure 3-33 : Densité d'état phononique (a) et correction de la température de simulation par rapport à la température réelle (b).	117
Figure 3-34 : Paramètres de Lorentz en fonction du volume de la boîte de simulation, mode TO (a), mode LO (b) et coefficient d'amortissement (c).	118
Figure 3-35 : Partie imaginaire (a) et partie réelle (b) de la fonction diélectrique calculée pour le SiC 6H non dopé.	119
Figure 3-36 : Paramètre de Lorentz évaluée à une température réelle de 300 K en fonction du dopage, mode TO (a), mode LO (b) et coefficient d'amortissement (c).	120
Figure 3-37 : Paramètres du modèle de Lorentz en fonction de la température et du dopage, mode TO (a), mode LO (b) et coefficient d'amortissement (c).	120
Figure 3-38 : Spectre de réflectance (a, c, e, g et i) et d'absorptance (b, d, f, h et i) obtenus pour le SiC 6H à différentes températures et pour différents niveaux de dopage.	122
Figure 3-39 : Émissivité monochromatique (a) et absorptivité monochromatique (b) du SiC 6H en fonction du dopage et de la température.	122
Figure 3-40 : Image de la boîte de simulation de dimension 44.2x44.2x44.2 Å ³ (a), coupe de la boîte suivant l'axe y (b), coupe de la matrice de SiC (c), nanoparticule de TiC (d). Les sphères jaunes, bleues et grises correspondent respectivement aux atomes de silicium, de carbone et de titane.	123
Figure 3-41 : Évolution de l'énergie atomique (bleu) et de la température (rouge) en fonction du temps pour les échantillons présentant un rayon de TiC de 8.84 Å (a) et de 17.68 Å (b).	124
Figure 3-42 : Image de la coupe l'axe y de la boîte de simulation de l'échantillon 1 (a), de l'échantillon 2 (b), de l'échantillon 3 (c), de l'échantillon 4 (d) et de l'échantillon 5 (d) au temps zéro (initial). Les sphères bleues correspondent aux atomes de SiC respectant les conditions de coordination, les grises aux atomes de TiC respectant les conditions de coordination, les rouges aux atomes qui ne respectent aucune condition.	125
Figure 3-43 : Image de la coupe l'axe y de la boîte de simulation de l'échantillon 1 (a), de l'échantillon 2 (b), de l'échantillon 3 (c), de l'échantillon 4 (d) et de l'échantillon 5 (d) après la thermalisation à 1500 K. Les sphères bleues correspondent aux atomes de SiC respectant les conditions de coordination, les grises aux atomes de TiC respectant les conditions de coordination, les rouges aux atomes qui ne respectent aucune condition.	126
Figure 3-44 : Profil de température (rouge) et d'énergie (bleu) de l'échantillon 10 sur l'ensemble de la simulation (a), zoom sur la partie évaluée à 300 K (b).	128

Figure 3-45 : Comparaison des courbes de DOS obtenues pour les échantillons 1 à 5 (a) et pour les échantillons 6 à 10 avec celle du SiC 3C.	128
Figure 3-46 : Correction de la température évaluée pour les échantillons 1 à 5 (a) et 6 à 10 (b).	129
Figure 3-47 : Image de la coupe suivant l'axe y de la boîte de simulation des échantillons 1 à 10 après la thermalisation à 1547 K. Les sphères bleues correspondent aux atomes de SiC respectant ses conditions de coordination, les grises aux atomes de TiC respectant ses conditions de coordination, les rouges aux atomes qui ne respectent aucune condition.	130
Figure 3-48 : Partie imaginaire (a-b) et partie réelle (c-d) de la fonction diélectrique calculée à une température réelle de 1500 K..	131
Figure 3-49 : Paramètres du modèle de Lorentz évalués à une température réelle de 1500 K, en fonction du ratio volumique, fréquence transverse (a), fréquence longitudinale optique (b), coefficient d'amortissement (c). Les points correspondent aux valeurs simulées et les traits aux fits d'évolution.	132
Figure 3-50 : Spectre de réflectance (a-b) et d'absorptance (c-d) évalués à une température réelle de 1500 K pour des échantillons dopés avec une concentration électronique de $5.78 \times 10^{18} \text{cm}^{-3}$	132
Figure 3-51 : Absorptivité monochromatique (a) et émissivité monochromatique (b) des dix échantillons évalués à 1500 K.	133
Figure 3-52 : Image de la coupe suivant l'axe $y \rightarrow$ de la boîte de simulation de l'échantillon 1 (a) et de l'échantillon 3 (b) à la fin de la thermalisation à 300K. Position des nanoparticules de TiC dans la boîte de simulation de l'échantillon 1 (c) et l'échantillon 2 (d).	135
Figure 3-53 : Comparaison de la DOS évaluée pour les échantillons 1 et 2 (b) et pour les échantillons 3 et 4.	135
Figure 3-54 : Partie imaginaire (a-b) et partie réelle (c-d) de la fonction diélectrique évaluée à 1500K.....	136
Figure 3-55 : Spectres de réflectivité (a-b) et d'absorptivité (c-d) des quatre échantillons évalués 1500K.....	137
Figure 3-56 : Image des boîtes de simulation des échantillons étudiés. Les atomes bleus correspondent au carbone et les grises au titane.	139
Figure 3-57 : Image de la coupe suivant l'axe y de la boîte de simulation de l'échantillon 1 en suivant le premier protocole (a-b), et le deuxième protocole (c-d). Les figures a, c correspondent à l'état d'arrangement des particules à l'état initial, et les figures b, d l'état d'arrangement des particules après la thermalisation à 1547 K.....	140
Figure 3-58 : Partie imaginaire (a) et partie réelle (b) de la fonction diélectrique calculée évaluée à 1500 K.....	141
Figure 3-59 : Image de la boîte de simulation (a), position des nanoparticules de TiC dans la boîte de simulation(b), en jaune les atomes Si, en bleu les atomes C et en gris les atomes Ti.	142
Figure 3-60 : Partie imaginaire (a) et partie réelle (b) de la fonction diélectrique du TiC-SiC à différente température.....	142

Figure 3-61 : Comparaison des paramètres du modèle de Lorentz en fonction de la température évalués pour le TiC-SiC (rouge) et pour le SiC 3C (bleus), mode TO (a), mode LO (b) et coefficient d'amortissement (c).	143
Figure 3-62 : Spectre de réflectance (a) et d'absorptance (b) du TiC-SiC évalués à différentes températures.....	143
Figure 3-63 : Émissivité monochromatique (a) et de l'absorptivité monochromatique évaluée pour le TiC-SiC (rouge) et le SiC 3C (bleu).....	144
Figure 3-64 : Evolution sur une journée de la température de l'absorbeur et de l'air en sortie pour un dopage $n_e = 3.00 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ de SiC 3C.	147
Figure 3-65 : Evolution sur une journée des différents rendements pour un dopage $n_e = 3.00 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ de SiC 3C.	148
Figure 3-66 : Évolution sur une journée de la température de l'absorbeur en SiC 3C (a) et de l'air en sortie (b) pour différents dopages.	149
Figure 3-67 : Évolution sur une journée du rendement de conversion solaire/thermique réel de l'absorbeur en SiC 3C (a) et de la production d'énergie électrique (b) pour différents dopages.	149
Figure 3-68 : Évolution sur une journée de la température de l'absorbeur en SiC (a), des différents rendements (b) et de la production d'énergie électrique(c) pour différents dopages.....	150
Figure 3-69 : Evolution sur une journée de la température de l'absorbeur pour un dopage $n_e = 3.00 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ de SiC 3C.	151
Figure 3-70 : Evolution sur une journée des différents rendements pour un dopage $n_e = 3.00 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ de SiC 3C.	152
Figure 3-71 : Évolution sur une journée de la température de l'absorbeur en SiC 3C (a), des différents rendements (b,) et de la production d'énergie électrique(c) pour différents dopages.	153
Figure 3-72 : Évolution sur une journée de la température de l'absorbeur en SiC 3C et 6H (a), des différents rendements (b,) et de la production d'énergie électrique(c) pour différents dopages.	153
Figure 3-73 : Évolution sur une journée de la température des absorbeurs surfacique et volumique en SiC 6H avec un dopage $n_e = 3.10^{18} \text{ cm}^{-3}$ (a), des rendements correspondants (b), et de la production d'énergie électrique (c).....	154
Figure 3-74 : Évolution sur une journée des différents flux pour des absorbeurs surfacique (a) et volumique (b) en SiC 6H avec un dopage $n_e = 3.00 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$	155

Liste des tableaux

Tableau 1-1 : Demande d'électricité mondiale par secteur et estimations [TWh] (International Energy Agency 2019)	5
Tableau 1-2 : Classification des performances des différentes technologies de CSTC. (Olalde et Flamant 2012; Romero et González-Aguilar 2014)	17
Tableau 1-3 : Matériaux absorbeurs et leurs propriétés radiatives. [1] (Joly et al. 2014), [2] (Bayón et al. 2010), [3] (Kaluža et al. 2001), [4] (Sciti et al. 2013), [5] (Aréna et al. 2020).	28
Tableau 1-4 : Paramètre de maille des principaux polytypes de SiC à température ambiante (Levinshtein et al. 2001).	32
Tableau 1-5 : Propriétés physiques des principaux polytypes de SiC et du silicium à température ambiante (Adachi 2009; Feng 2004; Harris et Institution of Electrical Engineers 1995)	33
Tableau 1-6 : Rayons covalents non polaires du SiC des atomes dopants.	34
Tableau 1-7 : Energie d'ionisation et limite de solubilité des atomes dopants dans les principaux polytype de SiC (Kimoto et Cooper 2014)	34
Tableau 2-1 : Paramétrage du modèle Mnatsakanov pour le SiC 3C, 4H et 6H et pour différents types de porteurs de charges (Mnatsakanov et al. 2004).	52
Tableau 3-1 : Paramétrisation du potentiel de Tersoff. Les cellules grises indiquent que les paramètres dépendent du type de liaison ternaire observée (A-A-B) paramètres de A, (B-B-A) paramètres de B, pour les autres liaisons les paramètres valent zéro. ...	78
Tableau 3-2 : Paramétrisation du potentiel MEAM. L'énergie de cohésion E_0 , la distance d'équilibre des premiers voisins R_0 et le module d'élasticité isostatique B sont respectivement exprimés en eV , $\text{\AA}$ et dyne.cm^{-2}	81
Tableau 3-3 : Paramétrisation du potentiel de Vashishta.	83
Tableau 3-4 : Paramétrisation du potentiel de Lennard-Jones (Arkundato et al. 2020)	84
Tableau 3-5 : Énergie de cohésion et paramètre de maille provenant de la littérature.	86
Tableau 3-6 : Écart d'énergie entre l'énergie initiale et finale de l'ensemble nve	88
Tableau 3-7 : Température de simulation pour une étude à température réelle de 300 K	94
Tableau 3-8 : Correction de la température de simulation.	105
Tableau 3-9 : Caractéristiques physiques évaluées par DM ab-initio des atomes de substitution dans le SiC : d correspond à la distance de liaison entre l'atome substitué et ses premiers voisins, E_B est l'énergie de liaison et E_g l'énergie de gap, T_c est la température de Curie, q correspond à la charge effective (la charge négative indique l'apport d'électron et la charge positive indique l'apport de trou).	107

Tableau 3-10 : Dimensions et volumes des boites de simulations, nombre d'atome substitué satisfaisant une concentration électronique de $5.78 \times 10^{18} \text{cm}^{-3}$	108
Tableau 3-11 : Caractéristiques des échantillons dopés.	109
Tableau 3-12 : Dimension et volume des échantillons étudiés.	118
Tableau 3-13 : Caractéristiques des échantillons étudiés. Boite de simulation de dimension $114.92 \times 114.92 \times 114.92 \text{ \AA}^3$	127
Tableau 3-14 : Caractéristiques des échantillons étudiés. Boite de simulation de dimension $114.92 \times 114.92 \times 114.92 \text{ \AA}^3$	134
Tableau 3-15 : Absorptivité dans le visible et émissivité dans l'IR évaluées à 1500 K pour chaque échantillon.....	136
Tableau 3-16 : Caractéristiques des échantillons étudiés. Dans les échantillons 1 à 6, les inclusions de TIC sont placées de manière symétrique. Dans le cas des échantillons 7 et 8, les inclusions sont désaxées suivant l'axe z.	138
Tableau 3-17 : Coefficients des polynômes des échantillons de SiC 3C.....	145
Tableau 3-18 : Coefficients des polynômes des échantillons de SiC 6H.....	146
Tableau 3-19 : Paramètres des conditions de fonctionnement de la centrale solaire dans le d'un absorbeur surfacique.....	147
Tableau 3-20 : Paramètres des conditions de fonctionnement de la centrale solaire dans le d'un absorbeur volumique.....	151

Annexe : Détermination de la fonction diélectrique par la dynamique moléculaire

Les potentiels employés en DM étant des potentiels à courtes portées, la fonction diélectrique évaluée par la DM ne prend pas en compte les absorptions multiphonons. De ce fait, il est possible de faire l'équivalence entre la fonction diélectrique de DM avec celle du modèle de Lorentz. Cette équivalence est possible en multipliant la fonction diélectrique évaluée en DM par la fonction diélectrique aux hautes fréquences ε_∞ , la formule liant le modèle de Lorentz et la fonction diélectrique est la suivante :

$$\varepsilon_\infty + \frac{(\omega_{LO}^2 - \omega_{TO}^2)\varepsilon_\infty}{\omega_{TO}^2 - \omega^2 - \Gamma j\omega} = \varepsilon_\infty - \frac{\varepsilon_\infty}{\varepsilon_0 V k_B T j\omega} \int_0^\infty \langle J_\alpha(0) J_\beta(t) \rangle e^{-j\omega t} dt \quad (A-1)$$

En pratique, les densités de courants sont calculées directement lors des simulations de DM. Pour ce faire les simulations sont effectuées en trois étapes :

1. Construction de la boîte de simulation (arrangement des particules).
2. Application d'un thermostat à la température voulue, ensemble canonique (*nvt*).
3. Mise à l'équilibre thermodynamique dans un ensemble microcanonique (*nve*), c'est dans cette ensemble que les vitesses des particules sont récupérées et utilisées pour calculer les densités de courant.

Afin d'illustrer la méthodologie, nous allons présenter dans cette section les résultats obtenus pour un cas de figure pour deux températures de simulation. L'étude présentée correspond à la simulation d'une structure SiC 3C dont la maille conventionnelle (contenant huit atomes) a été répétée dix fois dans les trois directions de l'espace (boîte de 8000 atomes). Dans cette étude, le thermostat a été appliqué pendant 60 *ps*, et l'ensemble microcanonique a été maintenu pendant 90 *ps* avec un pas de temps de 0,3 *fs*.

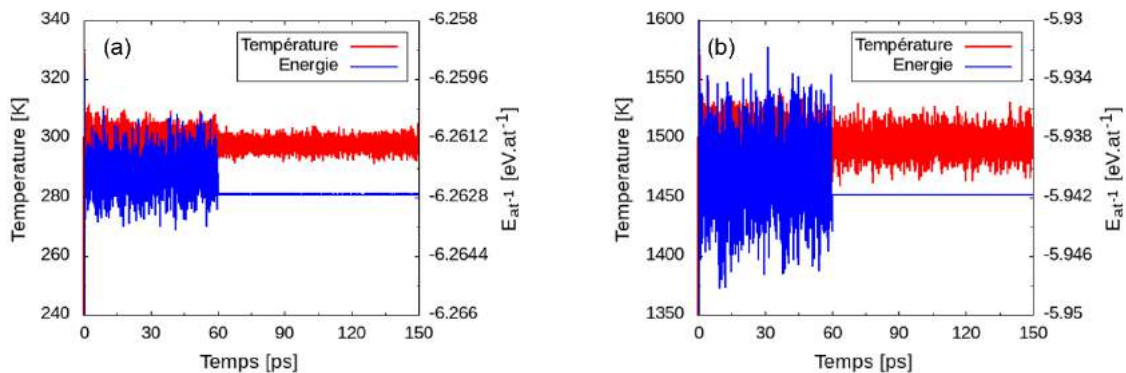


Figure A 1 : Profil de température (rouge) et d'énergie (bleu) d'une simulation thermostatée à 300 K (a) et à 1500 K (b).

Les [figures A1-\[a-b\]](#) montrent l'évolution de la température et de l'énergie du système au cours du temps. La zone à partir de laquelle les courbes bleues n'oscillent

plus correspond à la zone d'application de l'ensemble microcanonique. L'énergie doit être conservée dans cette zone. Dans le cas contraire cela indiquera que le système n'est pas stable, le problème pouvant venir du pas de temps, la structure (arrangement des atomes), du potentiel interatomique ...

Une fois la simulation DM terminée, nous obtenons comme données de sortie : l'évolution de la température et de l'énergie du système au cours du temps, les positions et les vitesses des particules, et l'évolution de la densité de courant dans les trois directions de l'espace au cours du temps. Cette dernière est utilisée comme donnée d'entrée pour le programme de post-traitement permettant d'évaluer la fonction diélectrique IR.

Le programme de post-traitement calcule l'autocorrélation des densités de courant définie comme suite :

$$f(t) = \langle J_\alpha(0)J_\beta(t) \rangle = \frac{1}{N_i} \sum_i J_\alpha(t)J_\beta(t + \tau_i) \quad (A-2)$$

Les [figures A2-\[a-d\]](#) montrent pour le cas l'échantillon thermostaté à 300 K les fonctions d'autocorrélation des densités de courant tronquées.

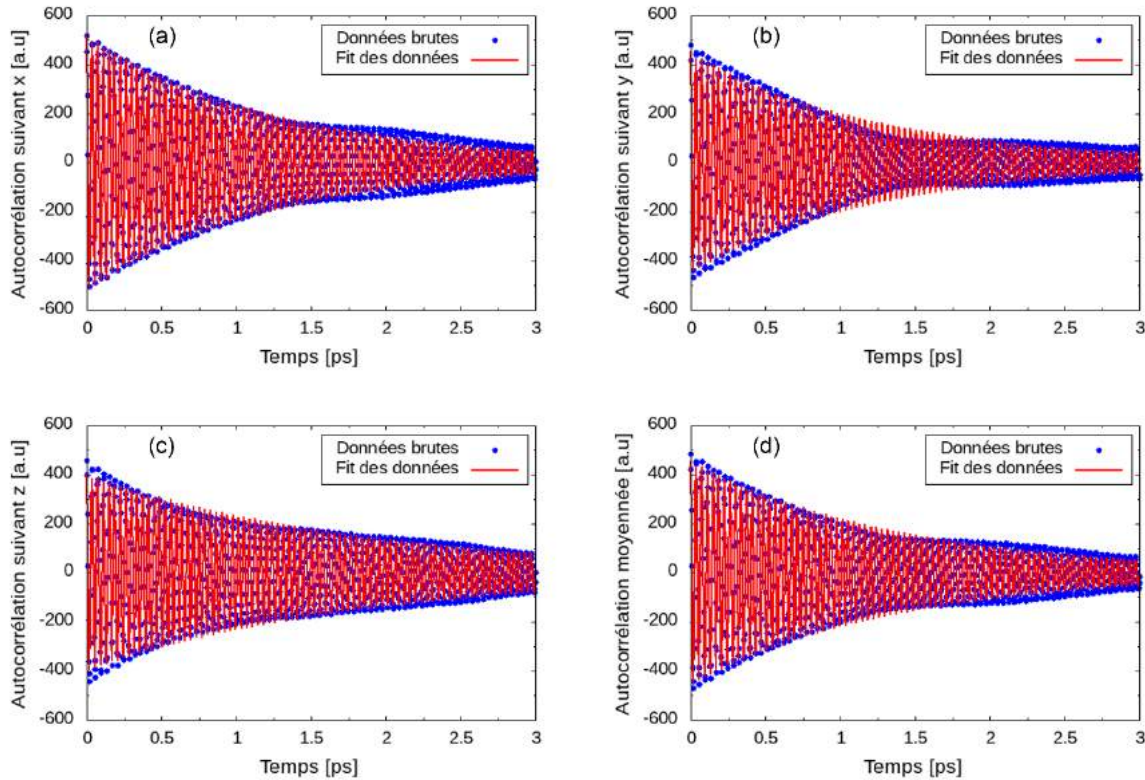


Figure A 2 : Fonction d'autocorrélation des densités de courant des données brutes (points) et du modèle mathématique (traits) dans la direction x (a), y (b), z (c) et moyennée dans les trois directions de l'espace. Échantillon thermostaté à 300 K.

L'autocorrélation ainsi tronquée est convertie dans le champ fréquentiel par le biais de la transformée discrète en cosinus et sinus. Le modèle de transformée utilisé pour le cosinus est décrit ci-dessous:

$$y_k = 2 \sum_{n=0}^{N-1} f(n) \cos\left(\frac{\pi k(2n+1)}{2N}\right) \quad (A-3)$$

La transformée discrète en cosinus permet d'obtenir la partie réelle du spectre de puissance présentée dans les [figures A3-\[a-d\]](#) pour le cas l'étude thermostaté à 300 K. Le modèle de transformée utilisé pour le sinus est décrit ci-dessous :

$$y_k = 2 \sum_{n=0}^{N-1} f(n) \sin\left(\frac{\pi(n+1/2)(k+1)}{N}\right) \quad (A-4)$$

La transformée discrète en sinus permet d'obtenir la partie imaginaire du spectre de puissance.

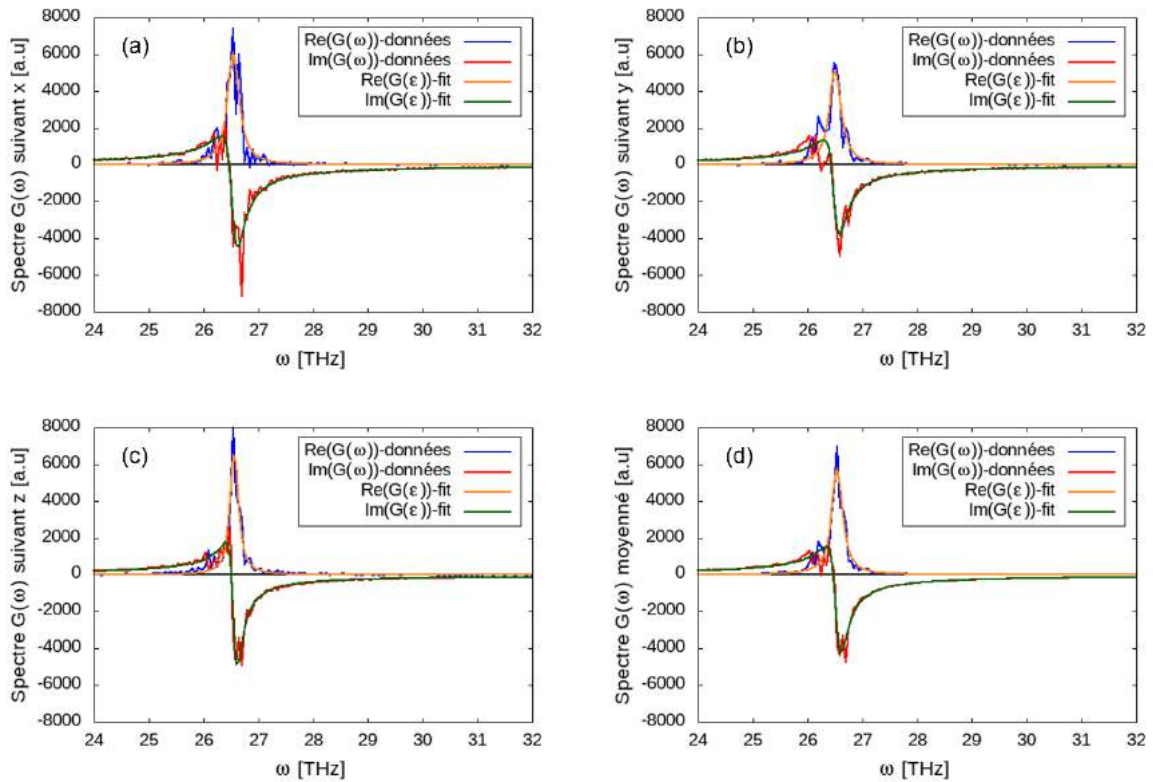


Figure A 3 : Spectre de puissance obtenu à partir des données brutes (trait bleu pour la partie réelle, et rouge par la partie imaginaire) et du modèle mathématique (trait orange pour la partie réelle et vert pour la partie imaginaire) dans la direction x (a), y (b), z (c) et moyenné dans les trois directions de l'espace (d). Échantillon thermostaté à 300 K.

Par la suite les spectres de puissances sont utilisés pour calculer les parties réelle et imaginaire de la fonction diélectrique à partir des relations ci-dessous :

$$Re(\epsilon) = \left(1 - \frac{fac \times Im(G(\omega))}{\omega}\right) \epsilon_{\infty} \quad (A-5)$$

$$Im(\epsilon) = -\left(\frac{fac \times Re(G(\omega))}{\omega}\right) \epsilon_{\infty} \quad (A-6)$$

Où f_{ac} correspond au facteur de conversion prenant en compte la température, le volume de la boîte de simulation, ainsi que la constante de Boltzmann et la permittivité du vide.

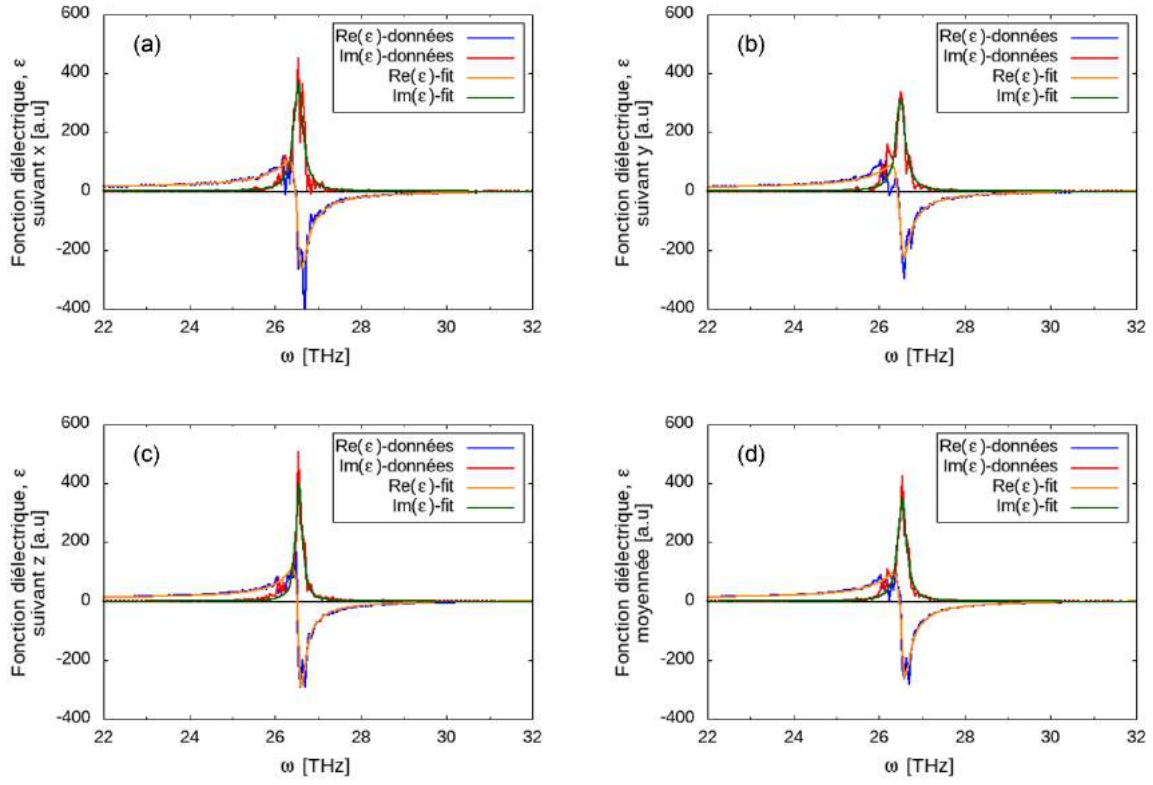


Figure A 4 : Fonction diélectrique obtenue à partir des données brutes (trait bleu pour la partie réelle, et rouge par la partie imaginaire) et du modèle mathématique (trait orange pour la partie réelle et vert pour la partie imaginaire) dans la direction x (a), y (b), z (c) et moyennée dans les trois directions de l'espace (d). Échantillon thermostaté à 300 K.

Les paramètres de Lorentz que sont ω_{TO} , ω_{LO} et Γ sont localisés au niveau de la courbe de la fonction diélectrique. La fréquence du mode TO (transversal optique) est située au niveau du pic de la partie imaginaire, celle du mode LO (longitudinal optique) est lue au niveau du point de changement de signe de la partie réelle. Le coefficient d'amortissement Γ correspond à la demi-largeur de la mi-hauteur du pic de la partie imaginaire. Afin d'avoir des résultats avec le moins d'erreur, les paramètres sont obtenus en faisant le fit des courbes obtenues ([figures A4-\[a-c\]](#)) directement par la DM (données brutes) avec un modèle de Lorentz définis ci-dessous :

$$\varepsilon_{IR,DM} = \left(\frac{\omega_{LO}^2 - \omega^2 - 2j\omega\Gamma}{\omega_{TO}^2 - \omega^2 - 2j\omega\Gamma} \right) \varepsilon_{\infty} \quad (A-7)$$

Le programme calcul donc les paramètres de Lorentz dans les trois directions de l'espace est renvoie la moyenne et l'écart-type des valeurs. Les moyennes des paramètres de Lorentz permettent de tracer la fonction diélectrique moyenne illustrée par la [figure A4-d](#).

Titre : Modélisation multi-échelle par approches ab-initio et atomistiques des propriétés thermo-radiatives de matériaux semi-conducteurs réels : Application à la conception de récepteurs solaire innovants pour centrales à tour

Mots clés : Centrale solaires thermodynamiques à tour, récepteurs solaires, carbure de silicium, simulations par dynamique moléculaire.

Résumé : Les technologies des Centrales Solaires Thermodynamiques à Concentration (CSTC) font partie des technologies prometteuses pour la transition énergétique. Parmi ces dernières, les Centrales Solaires à Tour (CST) sont celles qui pourraient garantir une production d'électricité élevée en dépit des périodes d'absence du soleil grâce à leurs modules de stockage d'énergie thermique. En outre, de nouvelles recherches sont menées sur l'utilisation des CST pour la production de biocarburant.

Les limites de cette technologie sont liées aux faibles rendements de conversion solaire/électrique et au coût d'investissement relativement élevé. Une des voies suivies pour améliorer le rendement des CST consiste à optimiser les propriétés thermo-radiatives du récepteur solaire. Il s'agit du dispositif qui convertit le flux solaire concentré incident en énergie thermique disponible. Ce dernier est constitué d'un matériau fortement absorbant tel que le carbure de silicium en raison de sa forte absorptivité dans le domaine du visible, de sa bonne résistance mécanique et de sa grande résistance à la corrosion à haute température ($> 1000^{\circ}\text{C}$).

Néanmoins, le SiC présente une émissivité élevée dans le domaine infrarouge qui génère des pertes radiatives importantes. Dans le cadre de cette thèse, nous avons analysé l'impact du dopage chimique et de l'inclusion de carbure de titane sur les propriétés thermo-radiatives de deux structures cristallographiques de SiC (3C et 6H). Pour mener ces études, nous avons eu recours à des simulations par dynamique moléculaire (DM). Cette technique de simulation permet d'évaluer des grandeurs macroscopiques à partir de la description à l'échelle microscopique des vitesses, positions et accélérations des atomes. Les quantités évaluées par DM ont été ensuite utilisées comme données d'entrée dans un code basé sur un modèle nodal afin d'évaluer les performances des CST.

Nous avons notamment montré que la structure SiC 6H permet d'assurer un rendement de conversion solaire/thermique meilleur que celui de la structure SiC 3C et qu'il en va de même pour les récepteurs volumiques poreux en comparaison des récepteurs surfaciques.

Title: Multiscale modelling by ab-initio and atomistic approaches of thermal radiative properties of real semiconductor materials: Application to the design of innovative solar receivers for tower solar power plant

Keywords : Tower solar power plants, solar receivers, silicon carbide, molecular dynamics simulations

Abstract: Concentrated Solar Thermodynamic Power (CSTP) technologies are among the most promising technologies for energy transition. Among these, Tower Solar Power Plants (TSPPs) are those that could guarantee a high electricity production despite periods without sun. This thanks to their thermal energy storage module. In addition, new research line is growing on the use of TSPPs for biofuel production.

The limitations of this technology are related to the low solar/electric conversion efficiencies and the relatively high investment cost. One of the ways to improve the efficiency of TSPPs consists in optimizing the thermal-radiative properties of the receiver, which converts the incident concentrated solar flux into available thermal energy. Receivers are made of a highly absorbent material such as, among others, silicon carbide (SiC) thanks to its high absorptivity in the visible range, good mechanical strength, and high corrosion resistance at high temperatures ($>1000^{\circ}\text{C}$).

Nevertheless, SiC shows a high emissivity in the infrared range which causes significant radiative losses. In this thesis, we studied the impact of chemical doping and titanium carbide inclusion on the thermal radiative properties of two SiC crystallographic structures (3C and 6H). To conduct these studies, we used molecular dynamics (MD) simulations. A simulation technique which allows the evaluation of macroscopic quantities starting from microscopic description of the positions, velocities and accelerations of the atoms. The quantities evaluated by MD were then used as input data in a nodal model code for estimating the performance of TSPP.

In particular, we have shown that 6H SiC structure provides better solar/thermal conversion efficiency than 3C SiC structure and that this is true also for the case of porous volumetric receivers compared to surface receivers.