

Machine thermique électrique

4.1 Introduction

Dans ce chapitre nous allons nous intéresser aux machines thermiques électriques, c'est à dire une machine thermique dont le fluide moteur a été remplacé par des électrons. Ce type de machine est continu, il n'y a pas l'aspect cyclique des machines usuelles en thermodynamique. La machine thermique que nous envisageons est constituée de deux surfaces séparées par une distance nanométrique, ce qui est une configuration classique en AFM (Atomic Force Microscopy). Ce chapitre s'intéresse donc aux transferts d'énergie, en terme de densité de courant électrique et de flux de chaleur, entre les deux électrodes afin d'en tirer des valeurs de puissance électrique et de rendement.

De telles configurations ont été étudiées auparavant, sur des distances toujours plus réduites, allant d'une séparation inter-électrode macroscopique à une distance microscopique. Les résultats obtenus sont présentés en table 4.1. Ces machines utilisent les transferts thermoïoniques pour fonctionner, les températures de fonctionnement sont donc relativement élevées car il faut vaincre le travail de sortie des émetteurs (voir section 2.2.2). Dès 1959 des études théoriques ont montré que dans les cas les plus favorables le rendement d'une telle machine thermique pouvait atteindre 90% du rendement de Carnot [8], qui reste la limite ultime pour les machines thermiques. En pratique ce rendement est inatteignable car les températures élevées de fonctionnement induisent de lourdes pertes thermiques par d'autres canaux. La présence de vapeur de Césium entre les électrodes permet de réduire les travaux de sortie et donc de diminuer la température de fonctionnement [9, 10] ou d'augmenter la puissance du courant en restant à température constante.

A mesure que la séparation inter-électrodes se réduit les puissances augmentent mais les rendements diminuent de façon conséquente sur le plan expérimental. En théorie cependant, même en prenant en compte différents canaux de pertes thermiques, il est possible d'atteindre des rendements de l'ordre de 40% du rendement de Carnot. Peu d'études ont été menées sur des convertisseurs thermoïoniques sur des distances nanométriques. A ces échelles un canal de conduction par effet tunnel devient possible et c'est à cet effet que nous voulons nous intéresser. Pouvoir passer en dessous de la barrière de potentiel entre les électrodes pourrait permettre d'abaisser la température de fonctionnement du dispositif et de créer une machine thermique qui repose entièrement sur ces transferts. De plus comme nous le verrons par la suite il existe des niveaux d'énergies résonants dans ce type de géométrie, ce qui peut agir en filtre énergétique et potentiellement améliorer le rendement [11].

Source	Type	Dispositif	Puissance	Rendement
[1]	Thermoélectrique	$T_c = 349K$ $T_h = 644K$	$35W/m^2$	6%
<i>SunPower</i> [®] E20-327 [2]	Panneau solaire	$T_c = 300K$ $T_h = 1000K$	$200W/m^2$	20%
[3]	Macro	$T_c < 1000K$ $T_h = 2500 - 2900K$	$10 - 200kW/m^2$	0,7 - 10%
[3]	Gap rempli de vapeur de césium	$T_f = 600K$ $T_h = 1600 - 2700K$	$25 - 400kW/m^2$	9 - 18%
[4]	Micro gap	Écart de $2000K$	$1mW/m^2$	10^{-9}
[5]	Micro gap	$T_C = ?$ $T_H = 1100K$	$0,25W/m^2$	10^{-6}
[6]	Micro gap	$T_C = 500K$ $T_H = 1100K$	$115W/m^2$	4.10^{-5}
[7]	Micro gap	$T_C = 900K$ $T_H = 2000K$	$1MW/m^2$	40%

Table 4.1 – Résumé de différents résultats pour des convertisseurs d'énergie thermoioniques dans des configurations différentes. Ces résultats sont issus de travaux expérimentaux, sauf la dernière ligne qui est un travail théorique, et le rendement associé est normalisé au rendement de Carnot. A titre indicatif la puissance générée à la surface du soleil est de $1,4kW/m^2$.

4.2 Oscillations de Gundlach

Dans le but de réaliser la machine thermique électrique envisagée il nous faut deux réservoirs d'électrons à des températures différentes, ce qui requiert la présence d'une contre électrode. En soit dans le cadre d'un calcul de Fowler Nordheim cette contre électrode est forcément présente pour appliquer la tension d'extraction. Cependant comme elle est à priori éloignée son influence n'est pas prise en compte. Dans notre cas nous voulons faciliter le transit d'électrons entre les deux réservoirs et donc la distance entre les électrodes est grandement réduite. Elle devient alors suffisamment faible pour ne plus être négligeable. En effet dans le cas où deux surfaces sont proches des oscillations dans la densité de courant passant d'une électrode à l'autre ont été observées expérimentalement [12, 13, 14, 15, 16, 17, 18, 19, 20]. L'émergence de ce phénomène a été décrite par K.H. Gundlach en 1966 [21] et s'explique par la réflexion des ondes électroniques à la surface de la contre électrode. La géométrie type est présentée sur la figure 4.1. On peut y voir deux métaux séparés par du vide. Dans un premier temps nous considérons une température de $0K$. Dans le vide entre les deux métaux, il existe une zone d'énergie permise pour les électrons entre le bas de la barrière de potentiel et le niveau de Fermi (zone hachurée en rouge sur la figure 4.1). La contribution principale au courant passant d'une électrode à l'autre provient des niveaux proches du niveau de Fermi car c'est là que la fonction d'apport est la plus grande (voir section 2.2.3.3). Si la longueur de la zone permise dans le vide est de l'ordre d'un multiple de la longueur d'onde électronique alors une onde stationnaire peut s'établir, ouvrant un canal de conduction privilégié. Cela se traduit par une oscillation dans la densité de courant J quand la distance entre les électrodes varie, car alors les niveaux énergétiques dans la zone permise bougent et l'un d'eux peut se trouver aligné avec le niveau de Fermi.

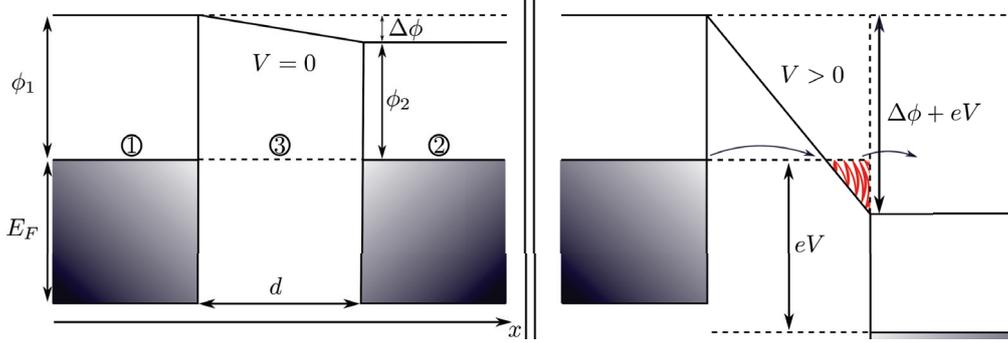


Figure 4.1 – Géométrie étudiée pour les oscillations de Gundlach : deux métaux 1 et 2 sont séparés par une région de vide 3. **Gauche** : le contact électrique des deux métaux entraîne un équilibrage des niveaux de Fermi E_F . Cela se traduit par une différence de potentiel $\Delta\phi$ si les travaux de sortie ϕ_1 et ϕ_2 sont différents. On fait la supposition que les niveaux de Fermi sont les mêmes dans les deux électrodes, ce qui fait que le bas des bandes de conduction sont alignés. **Droite** : l'application d'une tension V entraîne une circulation des électrons d'un métal à l'autre (dans ce cas de 1 vers 2).

4.2.1 A température nulle

Nous revenons dans cette section sur le développement fait par Gundlach dans son article original [21]. On se place dans la géométrie présentée sur la figure 4.1. Les zones 1 et 2 sont les métaux de l'électrode et de la contre électrode avec leur travail de sortie respectif ϕ_1 et ϕ_2 à priori différents (sur la figure nous avons $\phi_1 > \phi_2$). Dans la partie gauche les surfaces des métaux sont proches mais pas en contact (une distance d les sépare). Comme les travaux de sortie sont différents, les énergies de Fermi des deux métaux sont différentes (par rapport au vide). Les deux métaux n'ont donc pas le même potentiel chimique interne; des électrons vont transiter d'un métal à l'autre afin de créer un champ électrique qui va contrebalancer cette différence d'énergie. Une fois passé ce régime transitoire les potentiels électrochimiques (qui prend en compte le potentiel chimique interne et les effets électrostatiques) des deux matériaux sont les mêmes [22] et on a une chute de potentiel $\Delta\phi = \phi_1 - \phi_2$ entre les deux. Quand on applique une tension V entre les deux métaux alors on déforme la barrière de potentiel et les charges recommencent à circuler.

Pour bien prendre en compte les phénomènes de réflexion à l'interface avec le métal 2 nous sortons du cadre du calcul WKB standard que nous avons utilisé dans la section 2.2.3.

Pour traiter le calcul nous revenons donc à l'équation stationnaire de Schrödinger :

$$\frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} - \frac{2m}{\hbar^2} (U(x) - E_x) \psi(x) = 0 \quad (4.1)$$

Dans la zone 1 la solution générale est sous la forme d'onde planes :

$$\begin{aligned} \psi_1(x) &= A_1 \exp(ik_1 x) + B_1 \exp(-ik_1 x) \\ k_1 &= \frac{a}{2} \sqrt{E_x} \end{aligned} \quad (4.2)$$

Avec $a = 2\sqrt{2m}/\hbar$. Dans la zone 2 on considère le même type de solution mais il ne peut pas y avoir d'onde réfléchie (demi plan infini). De plus on considère que les valeurs de

niveau de Fermi sont les même dans les deux métaux donc E_x a la même référence dans les deux zones, la différence d'énergie vient de la tension appliquée entre les électrodes.

$$\begin{aligned}\psi_2(x) &= A_2 \exp(ik_2x) \\ k_2 &= \frac{a}{2} \sqrt{E_x + eV}\end{aligned}\quad (4.3)$$

Avec V la tension appliquée entre les électrodes. Dans la zone 3 inter-électrode le potentiel $U(x)$ est une droite. La référence de position $x = 0$ est placée à l'interface 1/3 et $x = d$ marque l'interface 3/2. Nous définissons $U(0) = U_0 = E_F + \phi_1$ le maximum de la barrière de potentiel dans la zone 1. A l'interface avec le métal 2 la figure 4.1 montre facilement que $U(d) = U_0 - (\Delta\phi + eV)$. On en déduit que le potentiel dans la zone 3 est de la forme :

$$U(x) = U_0 - \frac{x}{d}(\Delta\phi + eV) \quad (4.4)$$

En injectant cela dans l'équation (4.1) nous avons :

$$\frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} - \frac{2m}{\hbar^2} \left[W_- - \frac{x}{d}(\Delta\phi + eV) \right] \psi(x) = 0 \quad (4.5)$$

Avec $W_- = U_0 - E_x$. Nous posons $2mW_-/\hbar^2 = \lambda/l^2$ et $2m(eV + \Delta\phi)/(\hbar^2 d) = 1/l^3$ de telle façon que :

$$\frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} - \frac{1}{l^2} \left[\lambda - \frac{x}{l} \right] \psi(x) = 0 \quad (4.6)$$

En appliquant le changement de variable $z = \lambda - x/l$ cette équation devient :

$$\frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial z^2} - z\psi(z) = 0 \quad (4.7)$$

La solution de cette équation est connue et est du type :

$$\begin{aligned}\psi_3(x) &= A_3 A_i(z(x)) + B_3 B_i(z(x)) \\ z(x) &= \left(\frac{ad}{2(eV + \Delta\phi)} \right)^{2/3} \left[W_- - \frac{x}{d}(eV + \Delta\phi) \right]\end{aligned}\quad (4.8)$$

A_i et B_i sont respectivement les fonctions d'Airy de première et seconde espèce. Ce qui nous intéresse ensuite est le coefficient de transmission D entre le milieu 1 et le milieu 2. Il est obtenu par le rapport des courant de probabilité associés aux ondes ψ_1 et ψ_2 . Le courant de probabilité s'exprime comme :

$$j = \frac{\hbar}{2mi} \left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} - \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial x} \right) \quad (4.9)$$

Où $*$ dénote le complexe conjugué. Pour une onde plane de la forme $A \exp(ikx)$ on montre aisément que $j = |A|^2 \hbar k / m$. Pour la transmission de 1 vers 2 on considère que la propagation de la gauche vers la droite et on ne prend donc pas la partie en $\exp(-ik_1x)$ dans le calcul du courant de probabilité. Ainsi le coefficient de transmission est donné par :

$$D = \frac{k_2}{k_1} \frac{|A_2|^2}{|A_1|^2} \quad (4.10)$$

Finalement en reprenant les solutions dans chaque zone et en appliquant la continuité des fonctions d'ondes et de leur dérivée aux interfaces on peut exprimer A_1 en fonction de A_3 . On montre alors que :

$$D = \frac{k_2}{k_1} \frac{4}{\pi^2} \left[\left(\frac{z'}{k_1} \{A'_i(z_d)B'_i(z_0) - A'_i(z_0)B'_i(z_d)\} + \frac{k_2}{z'} \{A_i(z_d)B_i(z_0) - A_i(z_0)B_i(z_d)\} \right)^2 + \left(\frac{k_2}{k_1} \{A_i(z_d)B'_i(z_0) - A'_i(z_0)B_i(z_d)\} + \{A_i(z_0)B'_i(z_d) - A'_i(z_d)B_i(z_0)\} \right)^2 \right]^{-1} \quad (4.11)$$

Avec $z_d = z(x = d)$, $z_0 = z(x = 0)$ et ' dénote la dérivée par rapport à x . Gundlach met en avant le régime haute tension $eV > W_- - \Delta\phi$ ou D peut être approximé par :

$$D \sim 8K \frac{\exp\left(-\frac{2}{3}ad\frac{W_-^{3/2}}{eV+\Delta\phi}\right)}{2\frac{eV-W_-+\Delta\phi}{U_0-\Delta\phi} + 1 + \sin\left(\frac{2}{3}ad\frac{(W_- - \Delta\phi - eV)^{3/2}}{eV+\Delta\phi}\right)} \quad (4.12)$$

$$K = \frac{k_2}{k_1} \frac{E_x \sqrt{W_- |eV - W_- + \Delta\phi|}}{U_0(U_0 - \Delta\phi)}$$

Cette forme met en avant le caractère oscillant du coefficient de transmission via le terme en $\sin(d)$. Pour calculer la densité de courant nous revenons à la même équation que dans la partie 2.2.3.3 avec :

$$J = e \int_0^\infty N(E_x) D(E_x) dE_x \quad (4.13)$$

A 0 Kelvin on montre facilement que :

$$J = \frac{em}{2\pi^2\hbar^3} \int_0^{E_F} D(E_x)(E_F - E_x) dE_x \quad (4.14)$$

Etant donné la complexité du coefficient de transmission nous ne poussons pas plus loin le développement analytique.

4.2.2 A température non nulle

L'article originel étudie l'effet d'oscillation à 0K, mais dans notre cas nous souhaitons nous intéresser par la suite à une géométrie où l'électrode et la contre électrode sont chauffées. Nous avons besoin de la dépendance en température. Par le même traitement que dans la section 2.2.3.3, c'est à dire sans faire l'approximation de la distribution de Fermi Dirac à 0K, on montre que :

$$J = \frac{emk_B T}{2\pi^2\hbar^3} \int_0^{E_F+\phi} D(E_x) \ln \left[1 + \exp\left(-\frac{E_x - E_F}{k_B T}\right) \right] dE_x \quad (4.15)$$

L'intégration s'arrête à $E_F + \phi$ car nous ne nous intéressons pas aux électrons qui transitent au dessus de la barrière et qui passent donc par le canal thermoionique.

4.3 Simulation des oscillations de Gundlach

Nous avons désormais les formules nécessaires à la simulation des oscillations de Gundlach qui sont menées sur le logiciel Matlab R2016b. L'algorithme en soit est une simple intégration sur les énergies comme le montrent les formules (4.14) et (4.15). Pour que l'algorithme soit fiable pour une large gamme de paramètres d'entrée, il faut néanmoins prendre quelques précautions, ne serait-ce que sur les fonctions d'Airy présentes dans le coefficient de transmission. Nous commencerons par détailler ces quelques écueils puis nous présenterons les premiers résultats de simulation qui portent sur l'effet de la température sur les oscillations de Gundlach et la comparaison de nos résultats avec des résultats expérimentaux issus de la littérature afin de vérifier la viabilité de nos programmes.

4.3.1 Détails sur l'algorithme

Une rapide étude des fonctions d'Airy fournies par Matlab montre que l'évaluation devient impossible dès lors que l'argument adimensionné dépasse 103,996 pour les fonctions B_i et B'_i . La valeur renvoyée est alors *Inf*. Les fonctions de première espèce, elles, tendent vers 0 quand l'argument atteint la centaine. Nous pouvons voir avec l'équation (4.8) qu'à une distance inter-électrode donnée, dès que nous étudions la géométrie pour des tensions appliquées trop faibles des erreurs vont apparaître car alors $z \propto (eV + \Delta\phi)^{-2/3}$ devient grand. Cependant si l'on se réfère à l'équation (4.11) on peut voir que le coefficient de transmission ne fait apparaître que des produits de fonctions d'Airy : une fonction de première espèce multipliée par une de deuxième espèce. On peut donc penser que si l'une diverge et que l'autre tend vers 0 le produit peut ne pas diverger. Pour cela on va se ramener aux formes asymptotiques des quatre fonctions d'Airy que nous utilisons. Les formules utilisées lorsque $|z| \rightarrow \infty$, à l'ordre 0 en $1/z^{3/2}$, sont :

$$\begin{aligned}
 A_i(z) &= \frac{1}{2\sqrt{\pi}z^{1/4}} \exp\left(-\frac{2}{3}z^{3/2}\right) \\
 A'_i(z) &= -\frac{z^{1/4}}{2\sqrt{\pi}} \exp\left(-\frac{2}{3}z^{3/2}\right) \\
 B_i(z) &= \frac{1}{\sqrt{\pi}z^{1/4}} \exp\left(\frac{2}{3}z^{3/2}\right) \\
 B'_i(z) &= \frac{z^{1/4}}{\sqrt{\pi}} \exp\left(\frac{2}{3}z^{3/2}\right)
 \end{aligned} \tag{4.16}$$

A partir de ces formules nous pouvons voir que dans le pire des cas le produit d'une fonction de première espèce avec une fonction de deuxième espèce varie en \sqrt{z} qui est évaluable sur Matlab bien au delà de 100. Il reste un problème qui est que dans le coefficient de transmission de l'équation (4.11) l'argument n'est pas le même pour les deux fonctions de chaque produit (nous avons à chaque fois z_0 et z_d). Le problème est donc de savoir, quand l'un des arguments atteint la limite de Matlab, ce qu'il se passe pour l'autre. En revenant à la définition de z donnée par l'équation (4.8) on montre que :

$$\begin{aligned}
 \Delta z &= z_0 - z_d \\
 &= \left(\frac{ad}{2}\right)^{2/3} (\Delta\phi + V)^{1/3}
 \end{aligned} \tag{4.17}$$

L'écart est d'autant plus grand que d et $V + \Delta\phi$ sont grands. Cependant pour être dans la zone où z est grand nous devons supposer V petit. En prenant $d = 10nm$ (limite

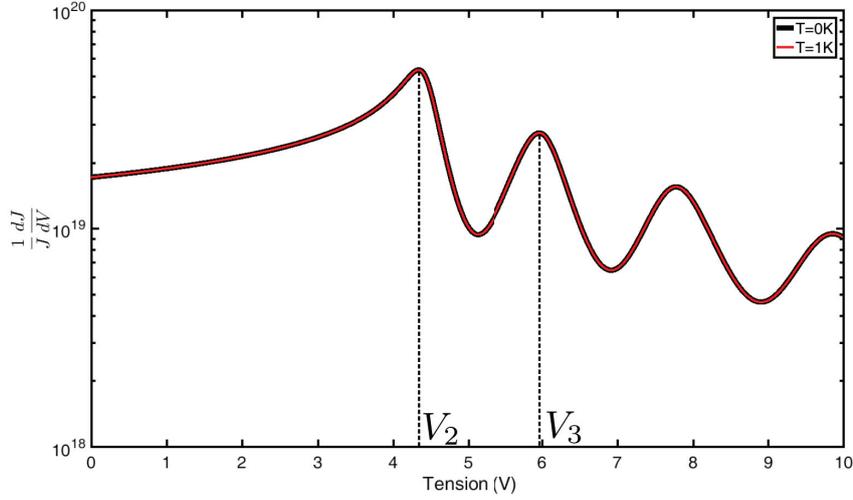


Figure 4.2 – Comparaison basse température des deux modèles. Pour le tracé on a utilisé $E_F = 5eV$, $\phi_1 = 3,5eV$, $\phi_2 = 3eV$, $d = 2nm$.

supérieure des écarts que nous allons explorer), $\Delta\phi = 0,5eV$ (valeur typique) et $V = 1mV$ nous trouvons $\Delta z \sim 11$.

Nous vérifions numériquement que les produits avec et sans approximation sont les mêmes pour $z > 60$ dans tous les cas de figure (avec un argument identique pour les deux fonctions). En prenant $z = 90$ comme limite d'utilisation des formes asymptotiques nous nous assurons de pouvoir évaluer les fonctions mais également de ne pas quitter le domaine de validité dans des conditions défavorables. Dès que z_0 ou z_d atteint cette limite nous savons que nous pouvons appliquer la forme asymptotique sur les deux composantes du produit.

4.3.2 Effet de la température

Dans cette section nous allons étudier l'effet de la température sur les oscillations de Gundlach et vérifier que ce phénomène existe toujours à des températures plus élevées. Pour cela nous nous fixons une géométrie et nous calculons numériquement les intégrales présentées en (4.14) pour la situation à $0K$ et en (4.15) pour prendre en compte l'effet de la température. Nous prenons comme référence des notations la figure 4.1. La figure 4.2 montre la comparaison entre la formule de Gundlach à $0K$ et le modèle avec la dépendance en température à $1K$. L'idée est de vérifier que les courbes coïncident, ce qui est le cas. Pour améliorer la visibilité des oscillations, nous avons choisi de tracer la résistance différentielle dJ/dV normalisée par rapport à la densité de courant J .

Le tracé de cette grandeur en fonction de la tension V appliquée entre les électrodes montre clairement un caractère oscillant. L'interprétation est la suivante : quand aucune tension n'est appliquée les niveaux de Fermi sont alignés. L'application d'une tension décale les niveaux de Fermi et déforme la barrière de potentiel. Il se forme une zone permise pour les électrons (zone hachurée en rouge sur la figure 4.1). Dans cette zone il va se former des niveaux résonants car à cause des réflexions à la surface du deuxième métal il peut se former des ondes électroniques stationnaires. Un tel niveau va se former quand la longueur de cette zone est proportionnelle à la longueur d'onde électronique. Si l'on

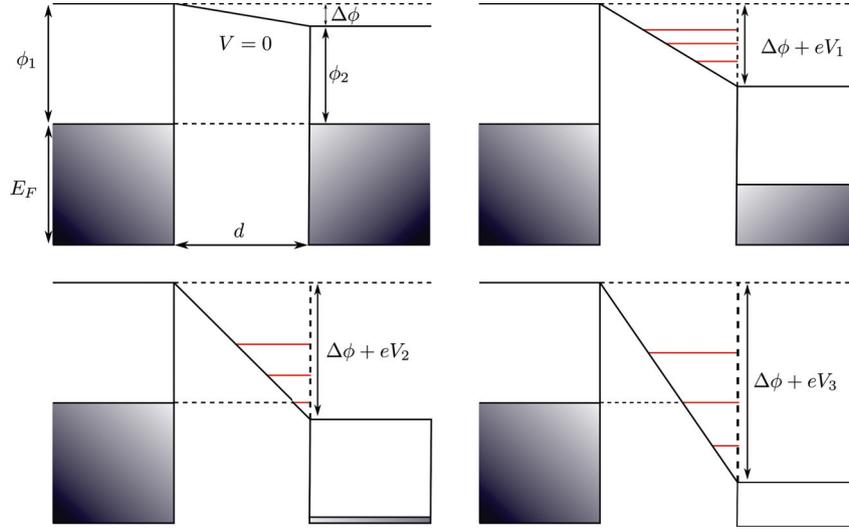


Figure 4.3 – Représentation schématique des niveaux résonants dans la zone inter électrodes et de leur évolution en fonction de la tension appliquée. Les tensions V_2 et V_3 ont été indiquées sur la figure 4.2

considère une approximation semi classique alors une formulation plus mathématique est celle de la quantification de Bohr-Sommerfeld qui stipule que :

$$\frac{2m}{\hbar} \int_{x_0}^d \sqrt{E_x - U(x)} dx = n\pi \quad (4.18)$$

Avec x_0 la position où l'impulsion de l'électron est nulle (l'extrémité gauche de la zone permise). Un niveau résonant n'étant pas utile sans électrons pour le traverser un canal privilégié de conduction va vraiment s'ouvrir quand un de ces niveaux sera aligné avec un niveau d'énergie du métal capable de fournir des électrons. Or les électrons qui participent à la conduction sont quasiment tous issus des énergies proches du niveau de Fermi. Chaque maximum de résistance différentielle observé sur la figure 4.2 correspond donc à un niveau résonant aligné avec le niveau de Fermi du métal qui fournit les électrons. Cela est illustré sur la figure 4.3 en écho à la figure 4.2. Par ailleurs si l'on relève la tension nécessaire pour avoir la première oscillation (celle pour laquelle nous avons le premier maximum de la résistance différentielle) nous trouvons $3,527V > \phi_2$. Cela place bien le bas de la zone permise sous le niveau de Fermi du métal émetteur d'électrons.

La figure 4.4 montre l'effet de la température du métal émetteur sur les oscillations de la résistance différentielle. On peut remarquer un certain nombre de phénomènes. Premièrement l'amplitude des oscillations diminue mais l'effet reste bien visible même en considérant une température élevée de $1000K$. Deuxièmement on peut voir que la position en tension des maxima se décale vers des valeurs inférieures. Cela s'explique par le fait que sous l'action de l'agitation thermique des niveaux d'énergie supérieurs au niveau de Fermi se peuplent d'électrons excités. Les électrons du niveau de Fermi qui à $0K$ contribuaient majoritairement au courant sont partiellement transférés vers des énergies supérieures et le niveau d'énergie résonant de la zone inter-électrode n'a plus besoin d'être aligné avec celui-ci mais un peu plus haut en énergie. La tension à appliquer sur le système est donc moins grande. Le troisième point rejoint la remarque précédente, on remarque que les oscillations s'élargissent un peu. Cela est lié à cet étalement de la distribution en énergie

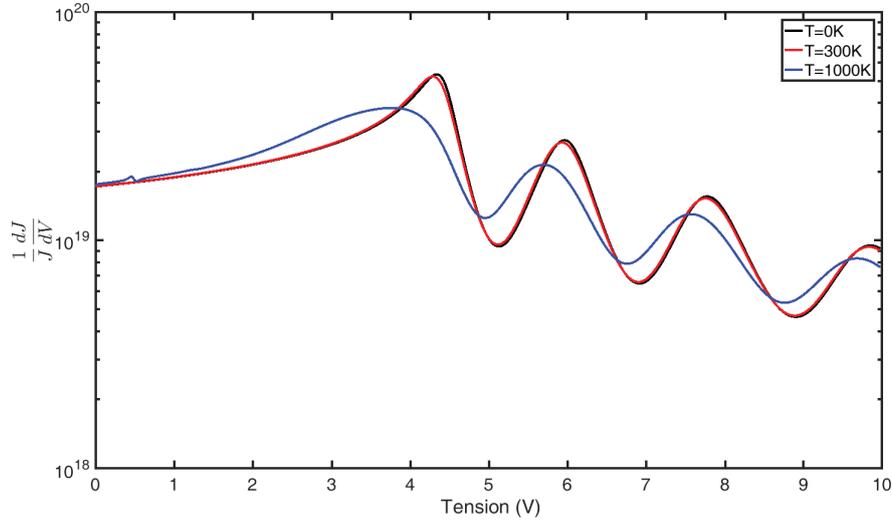


Figure 4.4 – Effet de la température sur les oscillations, tous les autres paramètres étant fixés. Pour ce tracé on a $E_F = 5eV$, $\phi_1 = 3,5eV$, $\phi_2 = 3eV$, $d = 2nm$.

des électrons qui ont accès à des niveaux d'énergie de plus en plus élevés avec la température.

Nous voyons donc que les oscillations de Gundlach survivent jusqu'à des températures élevées. Divers résultats expérimentaux ont été obtenus à température ambiante [15, 16] aussi bien qu'à des températures cryogéniques [12, 13, 14, 17, 18, 19, 20]. En effet on voit sur la figure 4.4 que les modifications à 300K sont minimes. A notre connaissance il n'y a pas de références dans la littérature faisant mention de cet effet dans des expériences à plus haute température.

4.3.3 Reproduction de résultats expérimentaux

N'ayant pas réalisé l'expérience nous même nous nous employons dans cette section à reproduire les courbes obtenues par Coombs et Gimzewski [15] dans une expérience en configuration STM (Scanning Tunneling Microscope) à température ambiante. Nous commençons par extraire les paramètres utiles à l'algorithme. L'expérience a été faite à température ambiante nous prenons donc $T = 300K$. Pour la géométrie une pointe d'Iridium (Ir) est placée devant une surface de Tantale (Ta), nous prenons des travaux de sortie standards pour ces éléments : $\phi_{Ir} = 5,6eV$ et $\phi_{Ta} = 4,22eV$. Nous n'avons pas l'information sur la valeur de l'énergie de Fermi mais sa valeur comptant peu nous prenons $E_F = 10eV$.

La mesure que nous étudions dans cet article est celle qui donne la courbe présentée en figure 4.5.a. Il s'agit d'un tracé de la résistance différentielle dI/dV en fonction de la tension V . I étant le courant circulant entre la pointe et la surface et V étant la tension appliquée entre les deux. Le principe est le suivant : la mesure est faite à un courant constant de $1nA$. Quand la tension change la densité de courant change et la distance entre les deux électrodes est variée pour maintenir le courant de $1nA$. La résistance différentielle est mesurée par détection synchrone. Comme les données sont en courant et que notre algorithme donne des densités de courant la première chose à faire est de retrouver la surface émettrice S de la pointe. Pour cela on prend un point de la courbe expérimentale qui donne d en fonction

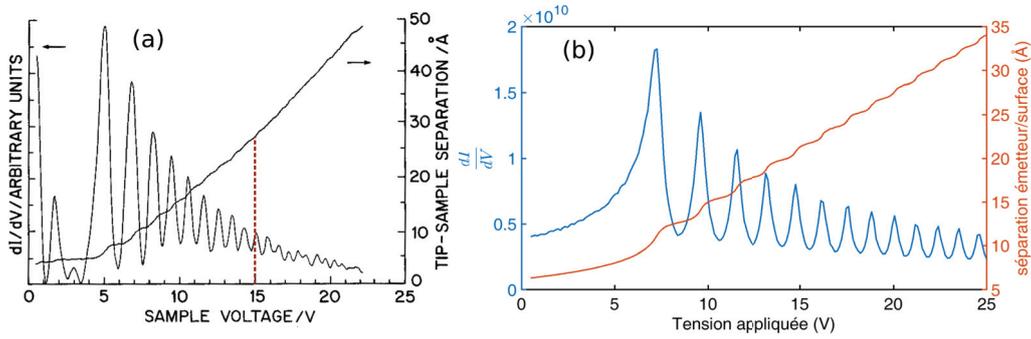


Figure 4.5 – (a) Courbe expérimentale issue de l'article de Coombs et Gimzewski. On note une rupture de pente dans la courbe de la distance pointe/électrode en fonction de la tension. Celle-ci est indiquée par les pointillés rouges à 15V. (b) Reproduction avec notre algorithme calculant la densité de courant J avec le modèle de Gundlach.

de V . Nous avons choisi $d = 15\text{\AA}$ pour une tension de 10V. Avec ces paramètres notre algorithme nous donne $J = 2,644 \cdot 10^8 \text{ A} \cdot \text{m}^{-2}$ soit une surface $S = 3,78 \text{ nm}^2$.

Pour reproduire la courbe nous scannons ensuite en tension, soit de 0 à 25V et pour chaque point de tension nous itérons sur la distance jusqu'à trouver celle qui donne un courant de 1 nA avec la surface calculée précédemment. Cela nous donne la courbe $d(V)$. Pour tracer la courbe de la résistance différentielle en chaque point de la courbe $d(V)$ nous recalculons le courant sur une plage s'étendant sur 50 mV de part et d'autre de la tension V . En chaque point nous avons donc une courbe $I(V)$ que nous pouvons ajuster avec un polynôme d'ordre 1 dont la pente est la résistance différentielle. Nous vérifions a posteriori que le coefficient de corrélation sur tous ces ajustements est proche de 1 car sinon il faut réduire l'excursion en tension. Nous obtenons ainsi la courbe de la figure 4.5.b.

Nous pouvons voir que la courbe expérimentale et la courbe reproduite présentent bien les mêmes caractéristiques, c'est à dire des pics dans la résistance différentielle dont l'amplitude diminue et une oscillation dans la distance inter-électrode en fonction de la tension appliquée. Sur la courbe expérimentale on remarque cependant une rupture de pente dans la droite $d(V)$ et la partie basse tension de la résistance différentielle présente des pics supplémentaires. Pour expliquer cela plusieurs choses peuvent intervenir : une nanoprotusion peut dominer à faible voltage ; quand la distance augmente le courant devient moins sensible à la séparation émetteur/surface et plus aux zones avec un faible travail de sortie.

Une dernière vérification faisable est de tracer la tension à laquelle apparaissent les pics en fonction de leur indice élevé à la puissance $2/3$. Ce tracé doit donner une droite si la mesure correspond bien à des oscillations de Gundlach [13, 14]. Ce tracé pour notre résultat de simulation est présenté en figure 4.6, ce qui achève de confirmer la validité de notre algorithme.

4.4 Machine thermique électrique

Dans cette section nous développons le modèle entier de la machine thermique électrique avec les flux de courant et de chaleur complets. Ces formules reposent sur le formalisme développé dans la section 4.2.

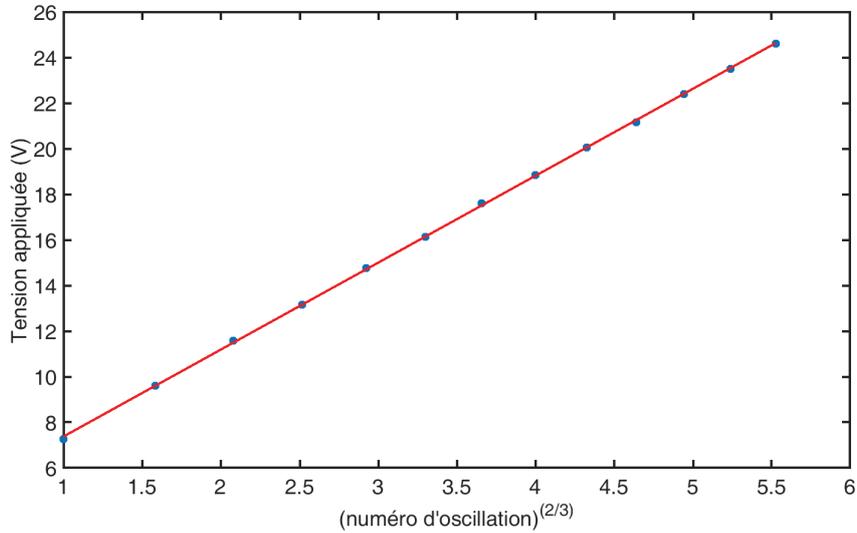


Figure 4.6 – Tracé permettant de vérifier que les oscillations observées sont bien des oscillations de Gundlach.

4.4.1 Densité de courant

Pour modéliser la machine thermique complète, la densité de courant circulant dans un sens (de gauche à droite jusqu'à maintenant) ne suffit plus. Il nous faut connaître le courant net circulant d'une source à l'autre. Tout d'abord pour calculer la densité de courant passant d'une électrode à l'autre nous reprenons la formule générale présentée dans le chapitre 2 :

$$J = e \int_0^{U_0} N(E_x) D(E_x) dE_x \quad (4.19)$$

La différence est que la borne supérieure de l'intégrale n'est plus ∞ mais $U_0 = E_F + \phi$ car nous souhaitons nous restreindre à un régime où l'émission thermoionique intervient peu ou pas. Le coefficient de transmission D est celui obtenu avec le modèle de Gundlach, sans modification supplémentaire. En revanche nous modifions quelque peu la définition de la fonction d'apport. Pour rappel nous avons défini :

$$N(E_x) = \frac{m}{2\pi^2 \hbar^3} \int_{E_x}^{\infty} f(E) dE \quad (4.20)$$

Cette formule correspond au fait qu'à chaque énergie E_x nous avons un certain nombre d'électrons disponibles pour transiter à travers la barrière de potentiel. Ce nombre dépend de la statistique de Fermi Dirac dans le réservoir de départ, c'est à dire de la probabilité d'avoir un électron disponible à cette énergie. Cependant maintenant nous considérons deux réservoirs en vis-à-vis et la distance entre les deux peut être inférieure à $2nm$. Or dans ce cas pour savoir si un électron va transiter il faut prendre en compte l'état du réservoir qui va accueillir l'électron. La fonction d'apport pour un transfert d'électrons d'un réservoir 1 vers un réservoir 2 devient alors :

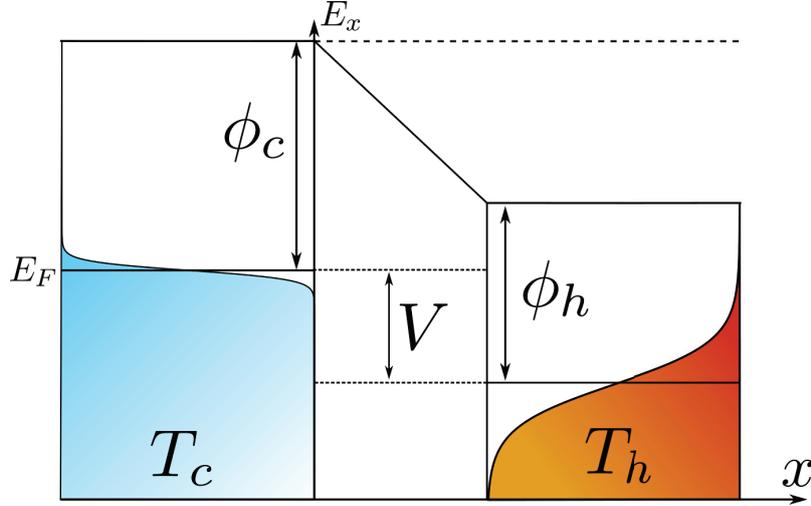


Figure 4.7 – Représentation de la machine thermique. L'indice c référence la source froide à la température T_c et h la source chaude à la température T_h . Une différence de potentiel V est appliquée entre les deux électrodes. ϕ est le travail de sortie.

$$N_{1 \rightarrow 2}(E_x) = \frac{m}{2\pi^2 \hbar^3} \int_{E_x}^{\infty} f_1(E) (1 - f_2(E)) dE \quad (4.21)$$

Cette formule retranscrit le fait que non seulement il doit y avoir un électron disponible pour transiter à l'énergie E_x dans le réservoir 1 mais il faut également une place vacante à cette même énergie dans le réservoir 2. Malheureusement cette intégrale n'a de solution analytique que lorsque les températures des réservoirs 1 et 2 sont identiques, ce qui n'est pas notre cas. Nous nous contenterons donc d'un traitement numérique pour cette intégrale.

Nous présentons sur la figure 4.7 la géométrie envisagée pour notre machine thermique. Dans la suite l'indice c référence la source froide à la température T_c et l'indice h référence la source chaude à la température T_h . Nous voyons sur cette figure qu'une différence de potentiel est appliquée entre les deux électrodes, on a donc un décalage en énergie pour les électrons en passant d'une électrode à l'autre. Nous remplaçons les indices 1 et 2 par h et c , les niveaux de Fermi vérifient la relation : $E_{Fh} = E_{Fc} - eV$.

Ce qui donne dans la fonction d'apport :

$$N_{c \rightarrow h}(E_x) = \frac{m}{2\pi^2 \hbar^3} \int_{E_x}^{\infty} f_c(E, E_{Fc}) (1 - f_h(E, E_{Fh})) dE \quad (4.22)$$

Le but de la machine thermique est de faire passer des électrons de la source chaude à la source froide en luttant contre une différence de potentiel. Ce qui nous intéresse est donc la densité de courant nette entre le réservoir chaud et le réservoir froid soit $J_{net} = J_{h \rightarrow c} - J_{c \rightarrow h}$. Ce qui nous donne l'expression suivante :

$$J_{net} = \frac{em^2}{2\pi^2\hbar^3} \left[\int_{eV}^{U_{max}} \int_{E_x}^{\infty} f_h(E, E_{Fh}) (1 - f_c(E, E_{Fc})) D(E_x) dE dE_x - \int_0^{U_{max}} \int_{E_x}^{\infty} f_c(E, E_{Fc}) (1 - f_h(E, E_{Fh})) D(E_x) dE dE_x \right] \quad (4.23)$$

Nous remarquons que la référence des énergies est placée au bas de la bande de conduction de la source froide. Les électrons situés sous ce niveau dans la source chaude ne peuvent traverser la barrière car il n'y a pas de niveaux d'énergie situés en face. L'intégration doit se faire en prenant en compte le décalage en énergie des deux réservoirs. La borne inférieure pour l'intégrale du courant de la source chaude à la source froide est donc eV .

Pour la borne supérieure sur E_x nous intégrons jusqu'au maximum des deux réservoirs. En fonction de la géométrie choisie cela peut être sur l'un ou l'autre. On a donc $U_{max} = \max(E_{Fc} + \phi_C, E_{Fh} + \phi_H)$.

4.4.2 Flux de chaleur

L'expression du flux de chaleur est similaire à celle du courant à ceci près qu'on remplace la charge électrique par la quantité de chaleur transportée par un électron. Cette quantité de chaleur correspond à l'écart entre l'énergie de l'électron et le niveau de Fermi du réservoir, plus $k_B T$ qui est la contribution moyenne des deux autres composantes de l'énergie (dans la direction tangentielle à la surface)[23]. En effet E_F qu'on appelle énergie de Fermi définit le potentiel électrochimique μ . C'est par définition le travail thermodynamique requis pour ajouter un électron au solide. L'écriture du premier principe pour l'ajout d'un électron au solide donne donc $\Delta U = Q + \mu$ soit $Q = \Delta U - \mu = \Delta U - E_F$ avec ΔU l'énergie de l'électron. La chaleur apportée par l'électron au réservoir est donc $E - E_F$ avec $E = E_x + E_y + E_z$ l'énergie de l'électron décomposable dans les 3 dimensions de l'espace x, y et z . Supposons que le système soit confiné dans la direction x . Dans les deux autres directions y et z non confinées les énergies E_y et E_z prennent la valeur à l'équilibre thermodynamique. L'équipartition de l'énergie nous dit alors qu'on a $k_B T/2$ par terme quadratique et donc $E_y = E_z = k_B T/2$. Soit au final $Q = E_x + k_B T - E_F$.

Supposons ici qu'on veuille faire le bilan thermique sur un réservoir, ici sur la source chaude car nous étudions la configuration moteur. Ce flux de chaleur a deux composantes : ce qui sort de la source chaude en direction de la source froide et ce qui vient de la source froide.

Nous allons nommer ces termes $Q_{h \rightarrow c}$ et $Q_{c \rightarrow h}$. Leur expression sera comme suit :

$$Q_{h \rightarrow c} = \frac{m^2}{2\pi^2\hbar^3} \int_{eV}^{U_{max}} (\epsilon + k_B T_h - E_{Fh}) D(\epsilon) N_{h \rightarrow c}(\epsilon) d\epsilon$$

$$Q_{c \rightarrow h} = -\frac{m^2}{2\pi^2\hbar^3} \int_0^{U_{max}} (\epsilon + k_B T_c - E_{Fh}) D(\epsilon) N_{c \rightarrow h}(\epsilon) d\epsilon \quad (4.24)$$

Un électron sortant du réservoir chaud avec une énergie $\epsilon + k_B T_h$ supérieure au niveau de Fermi va prélever une quantité de chaleur $\epsilon + k_B T_h - E_{Fh}$ à la source chaude. Cette chaleur est sortante et on prend la convention du flux sortant positifs. Le terme suivant est donc compté négativement. Un électron arrivant de la source froide avec une énergie $\epsilon + k_B T_c$ va apporter une quantité de chaleur $\epsilon + k_B T_c - E_F$ à la source chaude.

Le flux de chaleur total sortant de la source chaude est :

$$Q_h = Q_{h \rightarrow c} + Q_{c \rightarrow h} \quad (4.25)$$

4.4.3 Rendement

Le rendement d'une machine thermique motrice est défini de la façon suivante :

$$\eta = \frac{J_{net} V}{Q_h} \quad (4.26)$$

J_{net} est le courant net circulant de la source chaude à la source froide, Q_h est le flux de chaleur net sortant de la source chaude, V est la différence de potentiel entre les deux électrodes. Dans l'expression de la tension on ne prend en compte que la tension appliquée entre les deux électrodes car c'est la différence de potentiel électrochimique qui compte pour le régime permanent (voir section 4.2.1). Cette valeur va être limitée par le rendement de Carnot comme dans le cas d'une machine thermique cyclique. Dans le cas d'une géométrie confinée dans une seule direction (distance inter-électrode ici) il est théoriquement impossible d'atteindre ce rendement [23]. En effet si on suppose un confinement dans la direction x le moment dans cette direction est restreint à une seule valeur. Cependant le moment dans les deux autres directions y et z non confinées peut prendre n'importe quelle valeur, donnant au spectre en énergie une largeur finie et rendant les échanges énergétiques irréversibles. Pour atteindre la réversibilité et donc le rendement de Carnot on peut par exemple limiter les transferts à une seule énergie totale pour laquelle l'occupation d'états est constante (par exemple avec un confinement 3D type boîte quantique ou le filtrage est idéal et la largeur du spectre en énergie est donnée par un Dirac) ou à des énergies extrêmement élevées pour lesquels l'occupation tend vers 0 (par exemple avec un semi conducteur ou la gap tend vers l'infini ou un matériau thermoionique avec une barrière infiniment haute). Dans notre géométrie simple il n'est donc pas possible d'atteindre le rendement de Carnot mais il serait possible de s'en approcher sur d'autres géométries, même avec un confinement 1D. Nous chercherons cependant les paramètres qui permettront de maximiser ce rendement.

De la même façon que le rendement de Carnot n'est pas atteignable dans notre système, la définition du rendement à puissance maximale (RPM) ne tient pas [24, 25, 26]. Nous estimerons la valeur du RPM lors de nos simulations mais nous n'avons pas de formule qui permette de la prédire.

4.5 Résultats de simulation

4.5.1 Premier cas d'étude

Nous nous plaçons dans un premier cas d'étude avec des paramètres qui ne sont pas forcément très réalistes mais qui permettent de mettre en avant le type de phénomène que nous étudions. Les paramètres utilisés sont les suivants : $\phi_C = 1eV$, $T_C = 300K$, $\phi_H = 3eV$, $T_H = 1500K$, $d = 10nm$. La tension appliquée varie entre 0 et 4V. La figure 4.8 présente les résultats obtenus. On peut y voir les courbes de flux de chaleur et de courant normalisées à leur valeur maximale, la courbe de rendement maximal (RM) normalisé par rapport au rendement de Carnot ainsi qu'un trait représentant la position du rendement à puissance maximale (RPM).

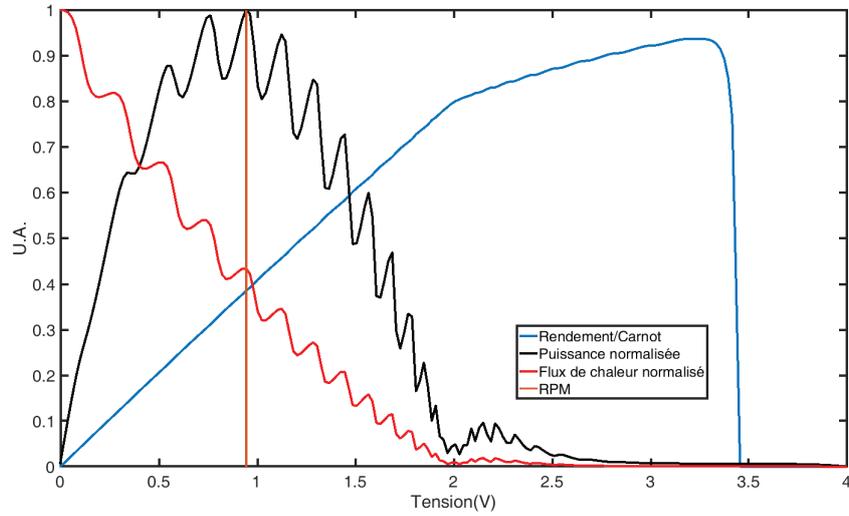


Figure 4.8 – Tracé des courbes de rendement normalisé par rapport au rendement de Carnot, courant et flux de chaleur normalisés à leur valeur maximale et position du rendement à puissance maximale (RPM). Les paramètres utilisés sont : $\phi_C = 1eV$, $T_C = 300K$, $\phi_H = 3eV$, $T_H = 1500K$, $d = 10nm$.

Nous voyons clairement les oscillations de Gundlach dans les courbes de courant et de flux de chaleur. Les oscillations étant synchronisées en tension entre le courant et la chaleur nous ne retrouvons pas ou peu cet effet d'oscillations sur la courbe de rendement. Le rendement augmente jusqu'à atteindre une valeur proche du rendement de Carnot (93,7% de la valeur du rendement de Carnot) pour une puissance de $10,6mW/m^2$. La puissance est relativement faible étant donné la différence de température et les travaux de sortie. Si l'on s'intéresse au RPM il est de 38,46% du rendement de Carnot pour une puissance de $39W/m^2$. Si l'on compare à la valeur théorique du RPM qui est $\eta_{PM} = 1 - \sqrt{T_C/T_H}$ alors nous n'atteignons que 55,66% de cette valeur, ce qui confirme que cette expression du RPM n'est pas utilisable dans notre cas.

Sur cette figure nous remarquons que les oscillations de Gundlach permettent de localement maximiser la puissance à rendement égal. Au fur et à mesure que la tension augmente, des niveaux résonants vont se former entre les deux électrodes. Les électrons de la source chaude, qui du fait de la température élevée sont excités bien au delà du niveau de Fermi, vont pouvoir transiter par ces canaux privilégiés. Les électrons de la source froide qui sont peu excités thermiquement n'y ont pas accès sur toute une plage de tension. Le courant net circule donc de la source chaude à la source froide en luttant contre une différence de potentiel, nous avons bien une machine thermique fonctionnant en mode moteur. Quand la tension devient trop grande et que les niveaux résonants approchent du niveau de Fermi de la source froide, le courant se renverse car il est alors beaucoup plus facile pour les électrons de la source froide de transiter à travers la barrière de potentiel que pour ceux de la source chaude. A partir de ce point le rendement chute à 0 car il n'est défini que pour un courant net circulant de la source chaude à la source froide.

Dans la suite il va nous falloir étudier l'influence des divers paramètres, à savoir les travaux de sortie des électrodes ainsi que leur températures respectives et la distance les

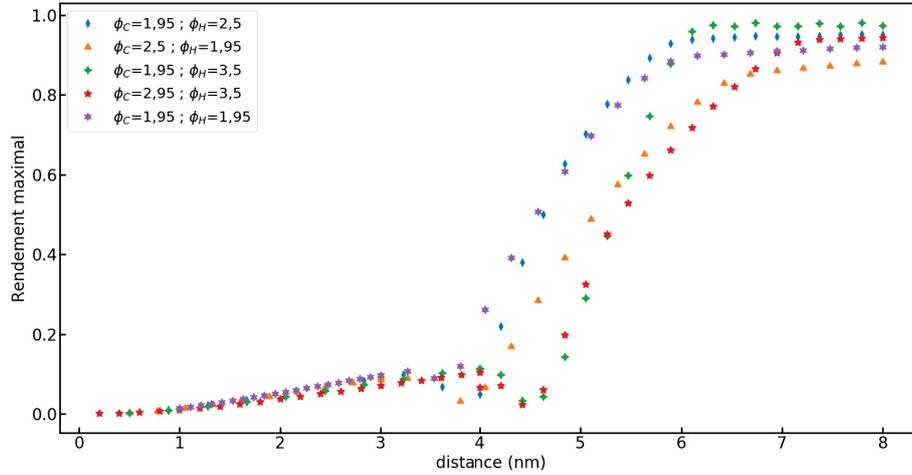


Figure 4.9 – RM normalisé au rendement de Carnot en fonction de la distance inter-électrodes pour différents couples de travaux de sortie. La source froide est à température ambiante et la source chaude à $500K$.

séparant, pour essayer de maximiser à la fois le rendement et la puissance utile en sortie.

4.5.2 Influence de la distance et du travail de sortie

Dans cette section nous étudions la puissance de sortie et le rendement en fonction de la distance, le tout pour diverses configurations de travail de sortie. Pour cette étude les températures de la source froide et de la source chaude sont fixées à $T_C = 300K$ et $T_H = 500K$. Nous fixons un écart de température volontairement bas car nous souhaitons atteindre un point de fonctionnement où les écarts de température ne sont pas trop importants, c'est à dire un régime qui n'est pas encore le régime thermoionique. Pour tracer les différentes courbes nous fixons la géométrie et les divers paramètres puis nous faisons varier la tension appliquée entre les électrodes. Pour chacune de ces courbes nous relevons le RM obtenu et la puissance associée ainsi que le RPM et la puissance associée. La tension appliquée entre les électrodes pour chaque distance sur les courbes présentées n'est donc pas la même, on notera V_{opt} la tension correspondante qui maximisera le rendement ou la puissance selon le cas. La figure 4.9 montre les RM obtenus normalisés à la valeur du rendement de Carnot pour les températures utilisées. La figure 4.10 montre les puissances associées. Les figures 4.14 et 4.15 montrent le RPM (toujours normalisé par rapport au rendement de Carnot) et la puissance associée.

4.5.2.1 $\phi_C(1,95eV) < \phi_H(2,5eV)$

Ceci est notre cas de base. Il donne un RM grandement augmenté dès que la distance est assez grande pour permettre l'apparition des oscillations de Gundlach. Dans l'exemple qu'on prend à $500K$ on a peu de puissance : à $3nm$ le rendement est seulement de 10% et la puissance est de $4,10^{-12}W/m^2$. Pour améliorer le rendement il faut augmenter la distance entre les électrodes pour améliorer le filtrage des électrons grâce aux niveaux résonants. Ce faisant la puissance diminue, à $7,6nm$ on a 95% de rendement mais la puis-

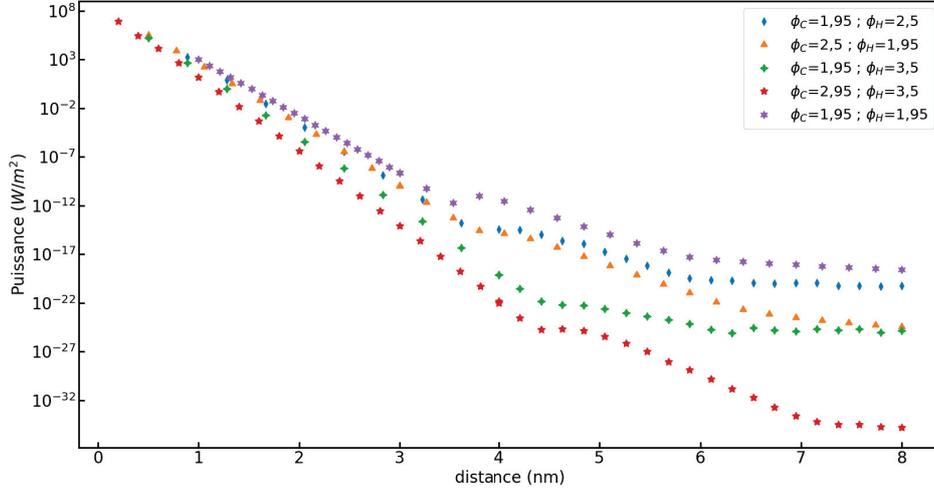


Figure 4.10 – Puissance traversant le dispositif lorsque le rendement est maximal en fonction de la distance inter-électrodes pour différents couples de travaux de sortie. La source froide est à température ambiante et la source chaude à $500K$

sance n'est plus que de $5,7 \cdot 10^{-21} W/m^2$. Si l'on diminue la distance entre les électrodes on augmente alors la puissance car le passage des électrons est facilité et la densité de courant augmente. Mais ce faisant le flux de chaleur augmente aussi et le rendement chute. A $0,5nm$ la puissance atteint $0,34 MW/m^2$ ce qui est une valeur intéressante mais le rendement n'est plus que de $0,31\%$.

Quand la distance est suffisamment grande (ici $\sim 4nm$), la densité de courant et le flux de chaleur ont une évolution liée : leur rapport tend vers une valeur finie. Le rendement n'est plus sujet qu'aux variations de V_{opt} . A ces distances les électrons qui sortent de la source chaude le font par des niveaux résonnants que ce soit pour le RM ou pour le RPM. La figure 4.11 illustre ce comportement. Comme V_{opt} est sensible à la géométrie, la modification de celle-ci avec la distance et donc les changements de V nécessaires à l'arrangement optimal des niveaux résonnants entraîne des sauts dans la courbe de V_{opt} . Comme à longue distance le rendement ne dépend que de V_{opt} ce comportement se répercute directement sur lui. La comparaison des figures 4.14 et 4.12 montre que l'évolution de V_{opt} (pour obtenir la puissance maximale) et du RPM sont les mêmes à partir de $4nm$, quand le rapport J/Q ne varie plus.

A courte distance la géométrie ne permet pas le passage par les niveaux résonnants de Gundlach, en tout cas pour des températures modérées. Les échanges se font au niveau de Fermi. Comme les électrodes sont proches on gagne en puissance mais on perd en rendement (on ne passe plus par des résonances). La figure 4.13 montre les courbes ND (fonction d'apport multipliée par le coefficient de transmission de la barrière) en fonction de l'énergie dans la direction normale à la surface E_x . Ces courbes sont superposées à la géométrie et permettent de mettre en avant les régions énergétiques dont les électrons sont issus. **A faible distance les électrons sont issus des alentours du niveau de Fermi dans chaque réservoir. A plus longue distance ce canal n'est plus majoritaire et les électrons sont issus de niveaux en énergie plus proches du niveau du vide et**

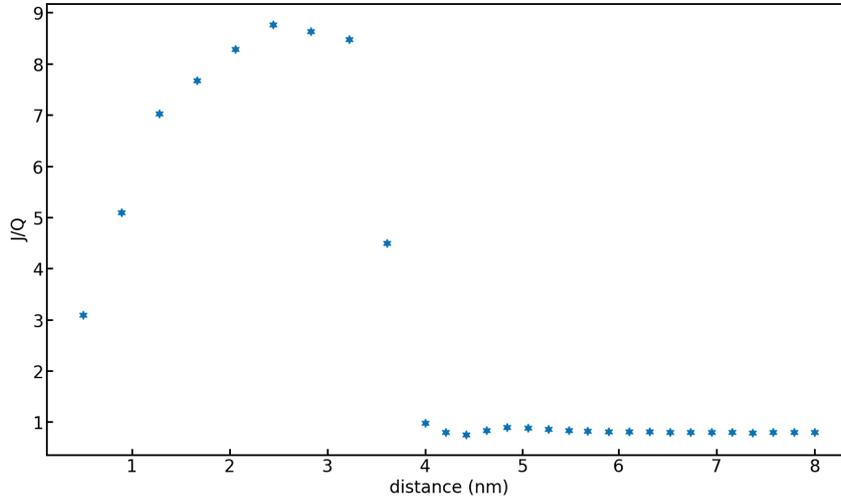


Figure 4.11 – Rapport J/Q en fonction de la distance pour la géométrie $\phi_C = 1,95eV$, $\phi_H = 2,5eV$, $T_C = 300K$, $T_H = 500K$. A partir de $4nm$ d'écartement le rapport J/Q devient constant et le rendement ne dépend plus que de V_{opt} . Le rapport J/Q tracé est celui du rendement maximal. Pour la courbe du rendement à puissance maximale on obtient le même comportement mais valeur de convergence est différente.

transitent par des niveaux résonants de Gundlach.

4.5.2.2 $\phi_C(2,5eV) > \phi_H(1,95eV)$

On renverse la situation par rapport au cas précédent. Le régime petite distance est indépendant de la géométrie, il ne dépend que de la distance. La zone grande distance, elle, dépend fortement de la géométrie. Cela est visible sur les courbes 4.9 et 4.14 si l'on compare la dispersion des points entre avant $d = 4nm$ et après. On remarque sur la figure 4.9 que les valeurs de RM sont peu impactées par le renversement de géométrie. La valeur de V_{opt} change très peu dans ce cas mais J/Q tend vers une valeur constante un peu inférieure dans le régime longue distance, donc le RM baisse un peu. Pour le RPM il devient même plus faible que dans le régime petite distance (voir figure 4.14). **Globalement avoir le plus petit travail de sortie du côté de la température la plus faible et inversement favorise les transferts dans les deux sens. Pour le RM, passer dans le régime grande distance est un gain quelle que soit la grandeur relative de ϕ_C par rapport à ϕ_H .** Par contre dans le cas de figure de cette section, le RPM en pâtit (même avec les résonances les tensions appliquées sont trop faibles).

En ce qui concerne la puissance à faible distance renverser les travaux de sortie n'a pas d'impact. A plus longue distance avoir $\phi_C > \phi_H$ entraîne une diminution de la puissance générée. Par exemple sur la figure 4.10 à $d = 7,16nm$ et $V_{opt} = 1,18V$ la puissance est de $P = 1,14.10^{-20}W/m^2$ pour un rendement de 94,7% dans la configuration $\phi_C(1.95eV) < \phi_H(2.5eV)$. Dans la situation renversée $\phi_1(2.5eV) > \phi_2(1.95eV)$ V_{opt} ne change pas de valeur, le rendement passe à 86,8% mais la puissance baisse à $P = 1,69.10^{-24}W/m^2$. Sur la figure 4.15 dans le cas $\phi_C(1.95eV) < \phi_H(2.5eV)$ toujours pour une distance de $d = 7,16nm$

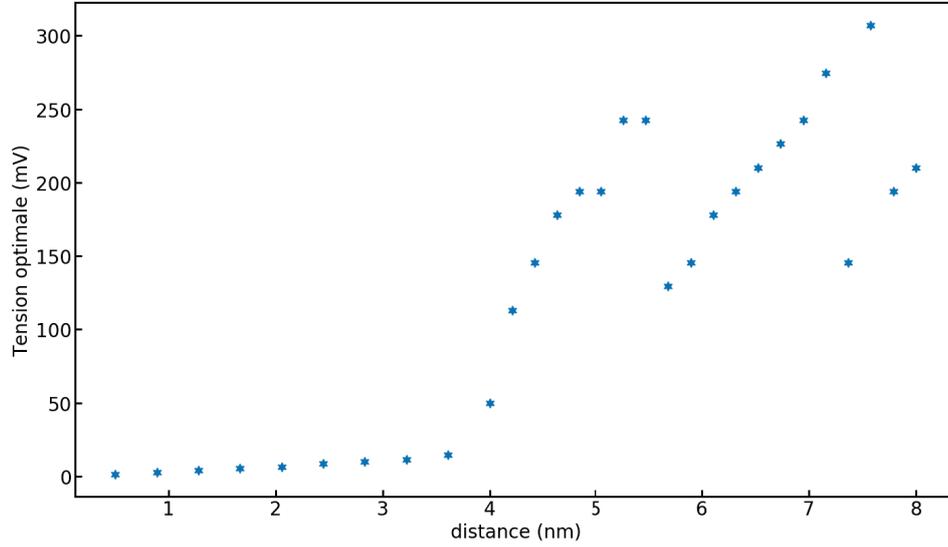


Figure 4.12 – Évolution de la tension optimale nécessaire à l’obtention de la puissance maximale. Son évolution, fortement impactée par la géométrie choisie, dicte l’évolution du rendement à puissance maximale à grande distance. On a $\phi_C = 1,95eV$ et $\phi_H = 2,5eV$.

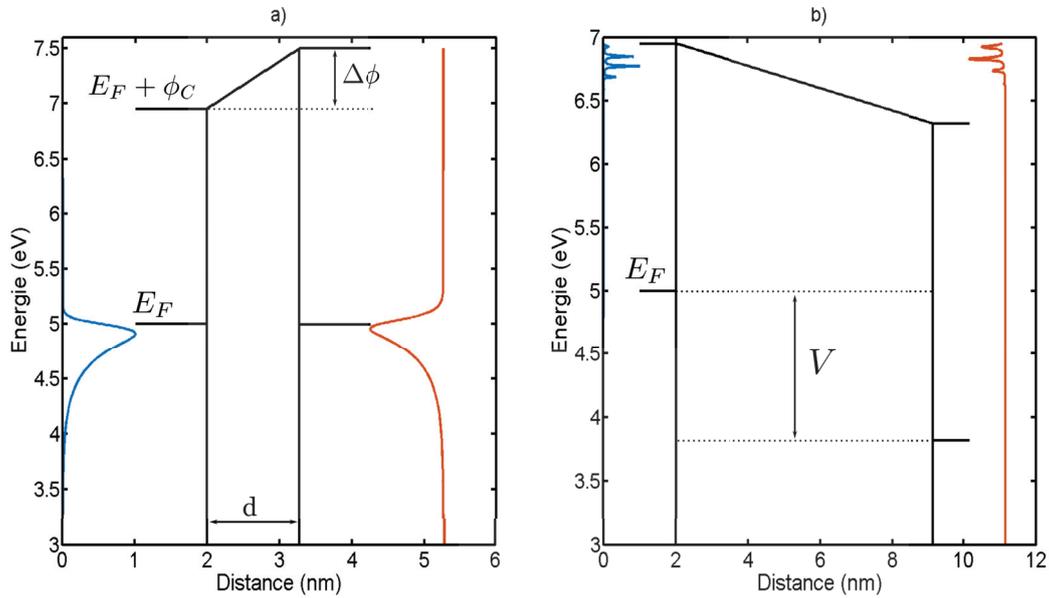


Figure 4.13 – Tracé de la fonction d’apport N multipliée par le coefficient de transmission D en fonction de l’énergie. A gauche on a la source froide à $T_C = 300K$ (courbes bleues). A droite on a la source chaude à $T_H = 500K$ (courbes oranges). Les paramètres sont : $\phi_C = 1,95eV$, $\phi_H = 2,5eV$. **a)** : régime courte distance, $d = 1,28nm$, $V = 3,03mV$. Le passage des électrons se fait vers le niveau de Fermi. **b)** : régime longue distance, $d = 7,16nm$, $V = 1,18V$. Le passage des électrons se fait par des niveaux résonants. La hauteur de la courbe ND n’est pas représentative car ces courbes ont été normalisées entre 0 et 1.

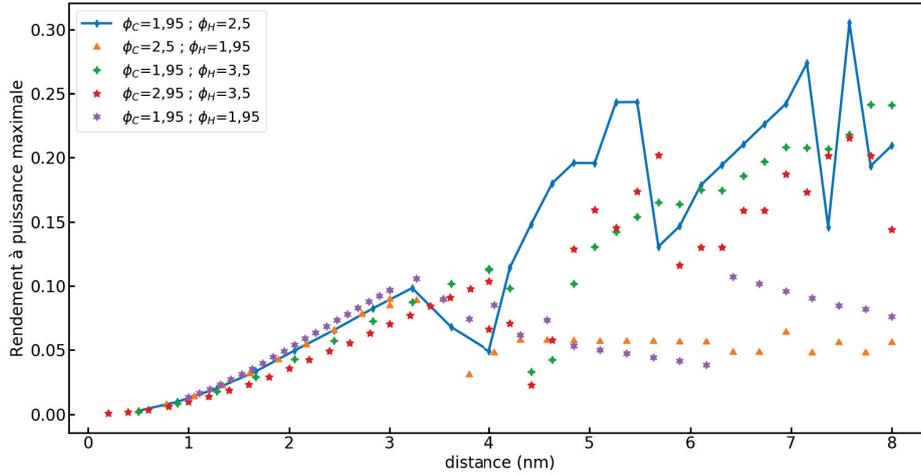


Figure 4.14 – RPM normalisé au rendement de Carnot en fonction de la distance inter-électrodes pour différents couples de travaux de sortie. La source froide est à température ambiante et la source chaude à $500K$

alors $V_{opt} = 275mV$ pour une puissance de $P = 1,82 \cdot 10^{-15} W/m^2$ à un rendement de 27,4%. Dans la situation renversée V_{opt} chute à $48,2mV$, le rendement diminue alors pour passer à 4,8%. Par contre la puissance varie moins et $P = 3,97 \cdot 10^{-16} W/m^2$ (moins d'un ordre de grandeur pour la puissance maximale comparé à 4 ordres de grandeur pour la puissance à rendement max).

4.5.2.3 $\phi_C(1,95eV) < \phi_H(3,5eV)$

Ici on prend un ϕ_H plus grand que dans le premier cas. La première chose qu'on peut remarquer est que les puissances chutent. Dans ce cas de figure tout se passe sans renverser la barrière, les tensions ne sont jamais supérieures à la différence des travaux de sortie. Pour le RPM, la courbe est toujours un peu erratique. Il est tantôt inférieur au cas avec ϕ_H plus petit (cas $\phi_C(1.95eV) < \phi_H(2.5eV)$), tantôt supérieur. Pour les deux rendements (RM et RPM) on remarque que la transition entre les deux régimes se fait pour des distances plus grandes. On peut améliorer la puissance en réduisant la distance mais globalement ce cas n'est pas très intéressant.

4.5.2.4 $\phi_C(2,95eV) < \phi_H(3,5eV)$

Dans cet avant dernier cas on augmente conjointement les deux travaux de sortie. On ne voit pas de gain sur aucun des deux rendements et on a une nette chute de puissance à rendement maximal et de puissance maximale. **On peut donc écarter ce type de configuration et se limiter aux plus petits travaux de sortie possibles.** En effet on voit sur la figure 4.13 que quand le transfert d'électrons se fait via des niveaux d'énergie résonants ceux-ci sont haut en énergie, proches du niveau du vide. Donc plus le travail de sortie sera élevé et plus il faudra chauffer le matériau pour y accéder. Or nous préférons nous restreindre à des températures les plus faibles possibles.

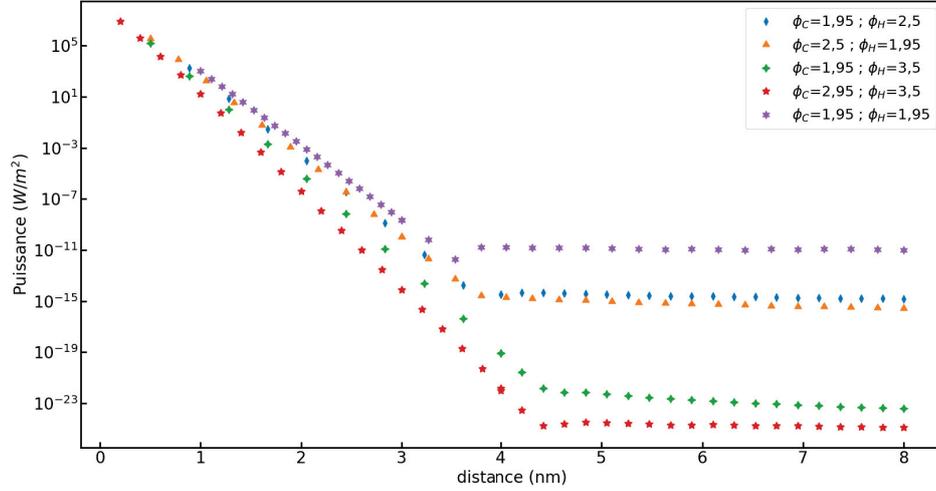


Figure 4.15 – Puissance maximale traversant le dispositif en fonction de la distance inter-électrodes pour différents couples de travaux de sortie. La source froide est à température ambiante et la source chaude à $500K$

4.5.2.5 $\phi_C(1,95eV) = \phi_H(1,95eV)$

Pour essayer de maximiser la puissance on égalise les deux travaux de sortie à la valeur la plus basse explorée jusqu'ici. On peut en tirer un RM similaire et on maximise la puissance. Par contre cela rend le RPM globalement plus mauvais Or ce qui nous intéresse est non seulement d'avoir un bon rendement mais aussi une puissance raisonnable. **Nous allons donc favoriser le RPM, ce qui nous incite à prendre des travaux de sortie proches mais différents.**

4.5.2.6 Conclusion

Nous avons vu qu'il vaut mieux avoir les travaux de sortie les plus petits possibles. Avoir $\phi_C < \phi_H$ tend à favoriser la puissance car cet arrangement est plus logique au vu des températures appliquées. Mais si ϕ_H est trop grand alors on va perdre en puissance car il faudra beaucoup chauffer pour avoir des électrons dans la zone de résonance (au dessus du travail de sortie de la source chaude). Le fait de réduire $\Delta\phi$ entre les électrodes a tendance à améliorer la puissance au détriment du rendement. On va donc chercher à avoir de faibles travaux de sortie dont les valeurs ne sont pas trop éloignées (moins d'un eV), le travail de sortie de la source froide étant plus faible que celui de la source chaude.

4.5.3 Influence de la température

La section précédente a mis en avant l'importance des niveaux résonants dans la machine thermique que nous envisageons et nous avons également vu que les niveaux résonants qui vont nous être utiles sont forcément des niveaux élevés en énergie (plus on applique de tension sur le dispositif plus la zone permise grandit et les niveaux résonants se forment à des énergies plus basses mais dans le même temps on favorise de plus en plus les transferts de la source froide à la source chaude : on doit donc se limiter à des tensions faibles). Il faudra donc chauffer la source chaude pour peupler les niveaux électroniques associés à ces

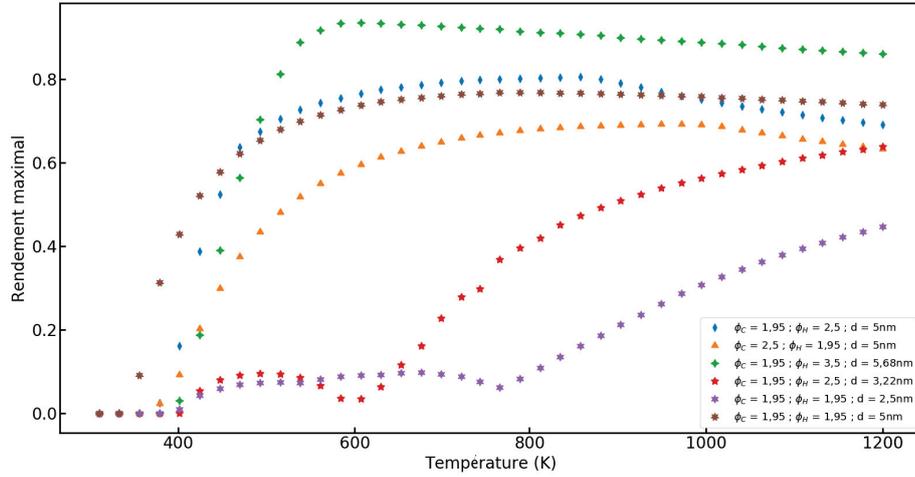


Figure 4.16 – RM normalisé au rendement de Carnot en fonction de la température de la source chaude pour différents couples de travaux de sortie et distance inter électrode. La source froide est à température ambiante (300K).

résonances et maintenir la source froide à une température telle que ses électrons transitent difficilement par ces niveaux. Dans cette section nous allons étudier l'effet de la température de la source chaude sur les rendements et les puissances. Pour obtenir les courbes nous procédons comme dans la section précédente mais au lieu de faire varier la distance celle-ci est fixée et nous faisons varier la température de la source chaude.

4.5.3.1 $\phi_C = 1,95eV$; $\phi_H = 2,5eV$; grande distance (5nm)

Nous reprenons cette configuration car elle remplit les critères que nous nous sommes fixés dans la section précédente. Pour la distance on choisit la valeur de $d = 5nm$ car sur les courbes de distance on est proches d'un maximum local du RPM : 19,6% (voir figure 4.14) et le RM est à une bonne valeur aussi : 70,2% (voir figure 4.9). Pour le RM on peut voir qu'on atteint un maximum de 80,5% aux alentours de 860K. La puissance associée reste très faible, $P = 6,1 \cdot 10^{-11} W/m^2$. Si on continue à augmenter on peut atteindre $0.13 mW/m^2$ à 1200K mais le rendement chute alors à 69,1%, ce qui est acceptable. Nous avons cependant dû dépasser 1000K et la puissance reste faible. Si l'on regarde le RPM il a atteint deux maxima locaux 23,57% et 19,9% respectivement pour $T_C = 447K$ et $T_H = 561K$. Les puissances associées sont respectivement $P = 4,03 \cdot 10^{-18} W/m^2$ et $P = 1,81 \cdot 10^{-12} W/m^2$, ce qui reste bien trop faible.

Sur les différentes courbes, que ce soit pour la puissance à RM (figure 4.18) ou la puissance maximale (figure 4.21) on peut voir que **le chauffage de la source chaude aide à augmenter la puissance** car les niveaux en énergie ou le coefficient de transmission D est plus important se peuplent en électrons. On augmente donc le produit ND pour les hautes énergies. La figure 4.17 montre cet effet.

Pour le rendement on peut voir une augmentation au fur et à mesure que la température de la source chaude s'élève jusqu'à ce que les niveau résonants deviennent les canaux de transport majoritaires. Ensuite l'effet sature voire diminue quand

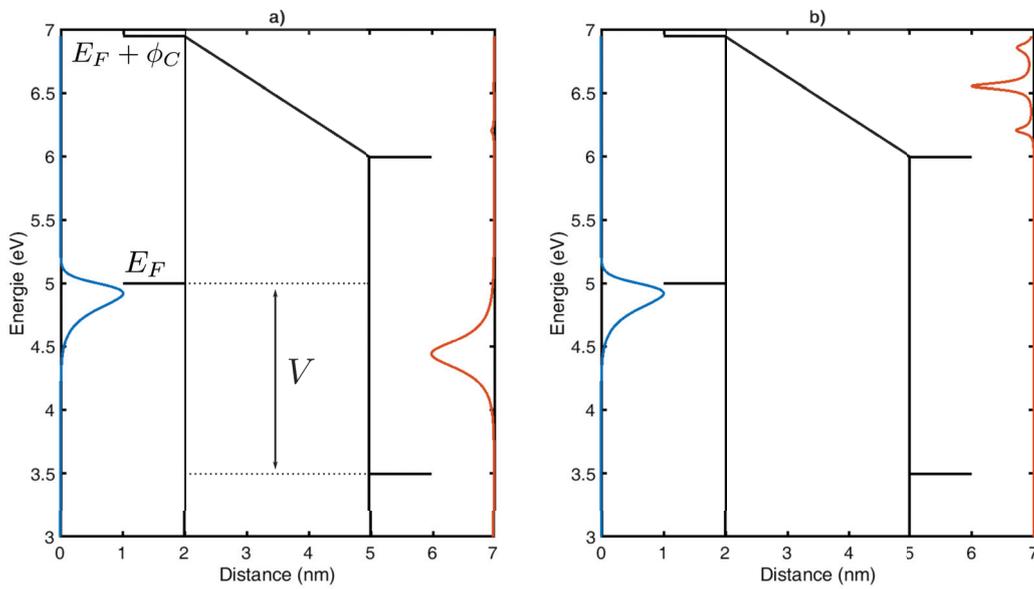


Figure 4.17 – Effet de la température sur le produit ND en fonction de l'énergie. Pour ce tracé on a pris $\phi_C = 1,95eV$, $\phi_H = 2,5eV$, $d = 3nm$, $V = 1,5V$, $T_C = 300K$. Les courbes bleues sont pour la source froide, les courbes oranges pour la source chaude. **a)** : $T_H = 500K$. Les transitions électroniques se font majoritairement un peu au dessus du niveau de Fermi car les niveaux énergétiques dans la source chaude en face de la zone où les niveaux résonants se forment ne sont pas assez peuplés. **b)** : $T_H = 800K$. On fournit suffisamment d'énergie aux électrons pour peupler les niveaux énergétiques en face des niveaux résonants et ces nouveaux canaux dominent la transition globale.

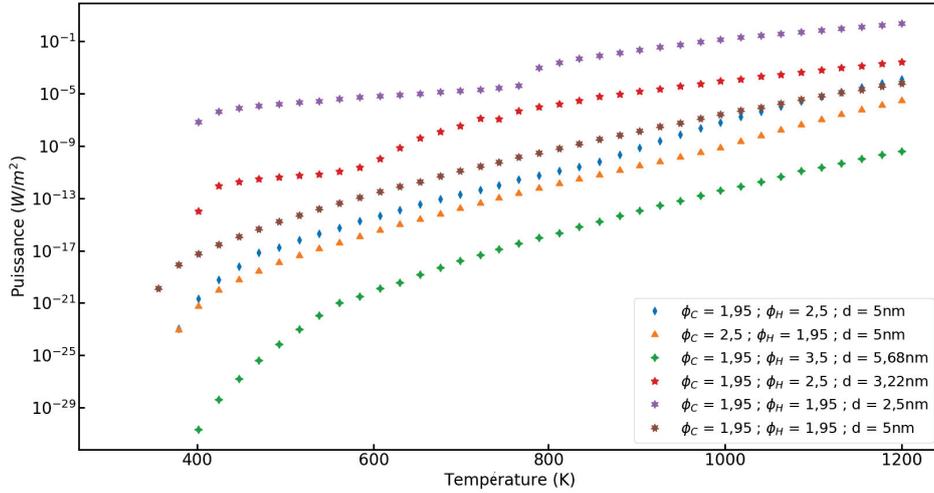


Figure 4.18 – Puissance traversant le dispositif lorsque le rendement est maximal en fonction de la température de la source chaude pour différents couples de travaux de sortie et distance inter-électrode. La source froide est à température ambiante (300K)

la température augmente trop. Ce cas sera décrit dans la section correspondante au cas $\phi_C = 1,95eV$; $\phi_H = 3,5eV$; $d = 5,68nm$ car le phénomène est alors bien visible.

4.5.3.2 $\phi_C = 2,5eV$; $\phi_H = 1,95eV$; grande distance (5nm)

Le fait d'appliquer des températures dans le cas de la géométrie inversée n'améliore ni la puissance ni le rendement, que ce soit pour le RM ou pour le PRM. La conclusion est donc la même que dans la section précédente, cette configuration ne présente pas un grand intérêt même quand les températures sont plus élevées.

4.5.3.3 $\phi_C = 1,95eV$; $\phi_H = 3,5eV$; grande distance (5,68nm)

Sur la courbe correspondant à ces travaux de sortie sur la figure 4.14, le RPM n'a pas de maximum local. Nous prenons donc une distance proche du premier cas dans le but de comparer ces deux géométries. Ici le constat reste le même que dans la partie précédente, nous avons un **gain de rendement intéressant sur le RPM ($\sim 10\%$)** mais **la puissance maximale reste 4 ordres de grandeur en dessous du cas où ϕ_H est plus proche de ϕ_C .**

La figure 4.19 illustre pourquoi **le rendement** (ici nous traitons le cas du RM mais l'argument est le même pour le RPM) **diminue si la température augmente trop**. Nous pouvons voir l'évolution de J/Q sur la courbe de gauche. Contrairement au cas où la distance varie, cette grandeur ne tend pas rapidement vers une valeur finie dans la gamme de température que nous nous sommes fixés. Nous pouvons voir qu'elle diminue rapidement au début puis la pente diminue. Le surplus d'énergie thermique transporté par les électrons quand la température augmente est donc plus important que l'augmentation de la densité de courant traversant la barrière. La tension optimale à appliquer entre les électrodes pour atteindre le RM, présentée sur la courbe de gauche, augmente à mesure que la température augmente. La raison est la suivante : à faible température les niveaux élevés en énergie

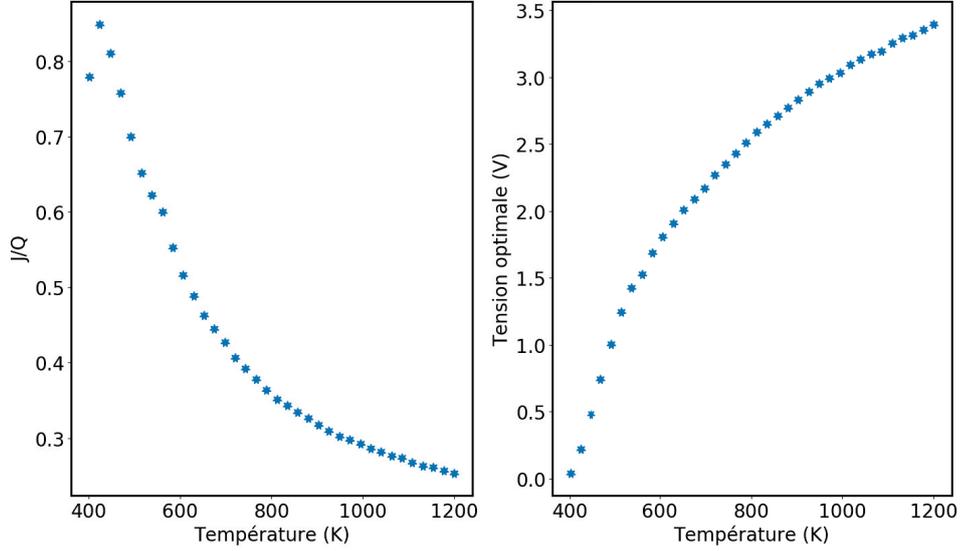


Figure 4.19 – **Gauche** : Évolution du rapport J/Q en fonction de la température de la source chaude. **Droite** : évolution de la tension V_{opt} à appliquer sur la structure pour optimiser le rendement. Les données sont issues du cas $\phi_C = 1,95eV$, $\phi_H = 3,5eV$, $d = 5,68nm$ de la figure 4.16.

de la source chaude sont peu peuplés. Il est intéressant d’appliquer une tension suffisante pour que le produit ND soit plus élevé sur ces niveaux que vers le niveau de Fermi. Mais si on continue à augmenter la tension à température constante, on fini par trop favoriser le passage des électrons de la source froide vers la source chaude, car même si la température est faible on forme des niveaux résonants qui sont de plus en plus proches du niveau de Fermi de la source froide. Quand la température de la source chaude augmente on peut se permettre d’appliquer une tension plus importante car les niveaux d’énergies élevés sont plus peuplés, il devient donc de plus en plus intéressant d’augmenter le nombre de canaux de transmission de la source chaude vers la source froide, sans que le courant inverse ne prenne le pas. Cependant on peut voir que le rapport J/Q diminue un peu plus vite que V_{opt} n’augmente, donc globalement le rendement diminue.

4.5.3.4 $\phi_C = 1,95eV$; $\phi_H = 2,5eV$; petite distance (3,22nm)

Nous revenons au premier cas mais cette fois dans le régime petite distance. Pour choisir la distance on se place au maximum de rendement dans ce régime sur les courbes 4.9 et 4.14. On voit d’ailleurs que la distance est la même quel que soit le type de rendement que l’on veut étudier. On peut voir sur la courbe 4.18 qu’on gagne en puissance au RM (de 7 ordres de grandeurs pour les plus basses températures jusqu’à 1 ordre de grandeur pour les plus hautes). Pour la puissance maximale on voit peu de différence sauf pour les températures les plus basses ou la puissance n’est de toute façon pas très intéressante (on gagne 6 ordres de grandeur mais on atteint seulement le pW/m^2). Si l’on regarde le RM, sur une plage de 800 à 1200K (températures élevées) on peut aller de $1,59\mu W/m^2$ à $2,54mW/m^2$ pour des rendements allant de 42% à 63,8%. En ce qui concerne les puissances maximales et le RPM associé, on a un maximum à 720K qui est de 13,1% pour une

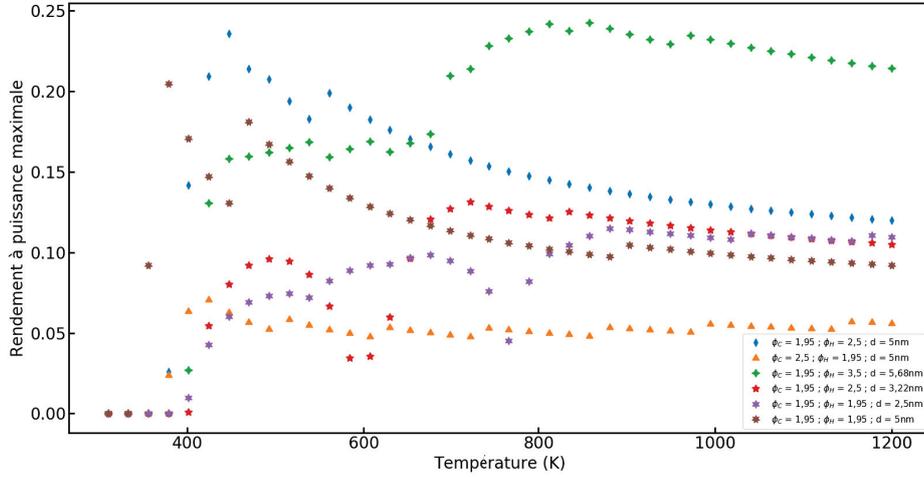


Figure 4.20 – RPM normalisé au rendement de Carnot en fonction de la température de la source chaude. La source froide est à $T_C = 300\text{K}$. Les courbes sont tracées pour différents couples de travaux de sortie et différentes distances inter-électrodes.

puissance de $0,34\mu\text{W}/\text{m}^2$, ce qui est plutôt faible aussi bien en rendement qu'en puissance. Cependant quand on augmente la température on peut aller jusqu'à quelques W/m^2 à une température de 1200K pour un rendement de 10%. Le rendement a diminué mais les puissances commencent à être appréciables. Cependant la variante grande distance atteint quasiment les mêmes performances à 1200K avec un rendement un peu supérieur de 12%. **Le régime petite distance représente donc un gain si l'on travaille avec le RM, mais les puissances sont alors assez faibles.**

4.5.3.5 $\phi_C = 1,95\text{eV}$; $\phi_H = 1,95\text{eV}$; petite distance (3,22nm)

Nous revenons sur le cas où les travaux de sortie sont égaux, d'abord dans le régime petite distance puis dans le régime grande distance. Au niveau du RM cela représente une perte. En effet il ne dépasse pas 10% tant que la température n'atteint pas 800K et atteint 45% lorsque la température atteint 1200K (voir figure 4.16). En comparaison le cas précédent dépasse 10% avant 650K et atteint 65% à 1200K . Comme dans la partie précédente cette **perte de RM est compensée par un gain en puissance** : de 6 ordres de grandeur pour les plus basses températures jusqu'à 3 pour les plus élevées. Nous sommes alors dans une gamme de puissance plus intéressante, entre le $\mu\text{W}/\text{m}^2$ et quelques W/m^2 . **Le RPM dans ce régime petite distance** (sur la figure 4.20) **n'est pas très dépendant des travaux de sortie** et on retrouve des valeurs assez similaires. En revanche pour les **puissances maximales** de la figure 4.21 on a encore une fois un **gain dans cette géométrie**. Ainsi on est entre 1 à 6 ordres de grandeur au dessus par rapport au cas précédent et à 1200K on atteint $70\text{W}/\text{m}^2$ avec un rendement de 11%.

4.5.3.6 $\phi_C = 1,95\text{eV}$; $\phi_H = 1,95\text{eV}$; grande distance (5 nm)

Pour finir nous étudions le cas précédent cette fois dans le régime grande distance. Sur les figures 4.16 et 4.18 nous pouvons voir que ce cas ci est finalement assez proche du premier cas aussi bien en rendement qu'en puissance et nous n'avons pas vraiment ni de perte ni

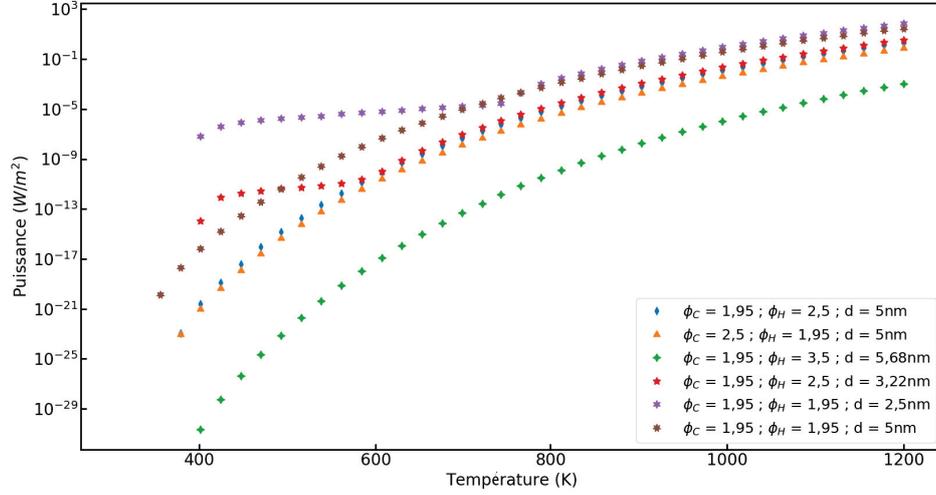


Figure 4.21 – Puissance maximale traversant le dispositif en fonction de la température de la source chaude pour différents couples de travaux de sortie et distance inter-électrode. La source froide est à température ambiante (300K)

de gain. En ce qui concerne la puissance maximale et le RPM (voir figures 4.20 et 4.21) nous sommes très proches du cas précédent sauf pour les températures basses. Au début des courbes le rendement est meilleur dans ce cas (on atteint 20%) mais la puissance est moins bonne (de plusieurs ordres de grandeur). A partir de 700K les courbes se rejoignent et les RPM deviennent équivalents.

4.5.3.7 Conclusion

Cette étude en température conforte nos conclusions précédentes. Il est avantageux de garder les travaux de sortie proches tout en conservant $\phi_H > \phi_C$. Le régime grande distance favorise le rendement, cependant nous avons vu qu'il n'est pas utile de trop chauffer : bien que cela augmente la puissance le rendement finit par diminuer. Le RPM suit également cette règle, il peut avoir un maximum global ou plusieurs maxima locaux mais pour les hautes températures il finit par diminuer de façon monotone. Cependant que ce soit pour le RM ou pour le RPM la diminution est lente et il est donc possible d'explorer des régimes haute température sans trop perdre en rendement. Le régime petite distance favorise la puissance mais cela se fait souvent au détriment du rendement. Il va donc falloir essayer de trouver un compromis qui permette d'avoir une puissance raisonnable (la limite étant qu'elle soit au moins mesurable) mais également un rendement acceptable.

4.5.4 Optimisation des résultats

Si nous faisons le point sur les résultats jusqu'à ce point nous voyons que dans les cas les plus favorables nous atteignons le W/m^2 pour un rendement de 10% ou de l'ordre de $0.1W/m^2$ pour un rendement de 30%. Pour des températures plus faibles il est possible de descendre jusqu'à 800K et avoir un rendement de 10% mais la puissance est alors de l'ordre du mW/m^2 . Si ensuite nous voulons descendre en température ou simplement atteindre un meilleur rendement (sur l'ensemble des courbes nous avons vu qu'il est possible d'atteindre des rendements qui vont jusqu'à 90% du rendement de Carnot) alors les puissances

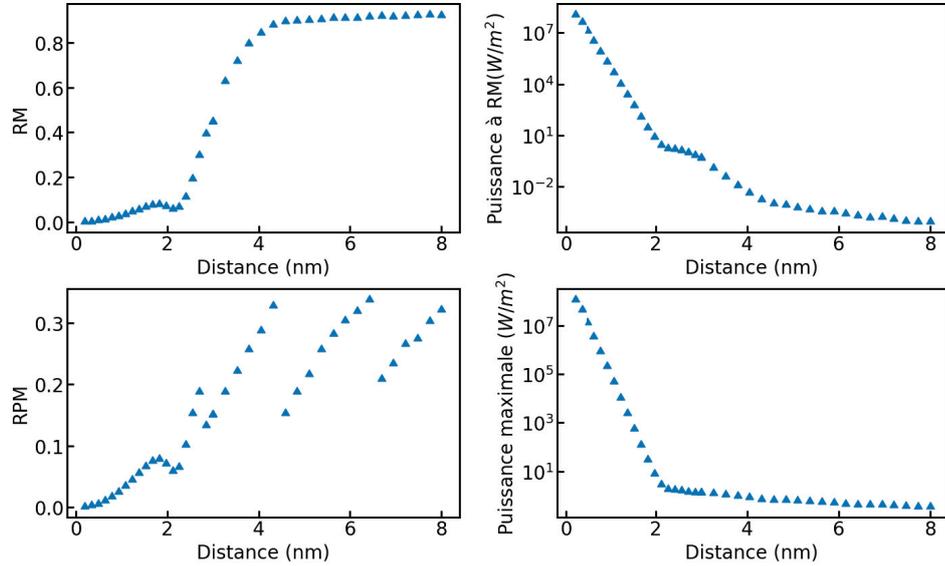


Figure 4.22 – Courbes du RM, puissance au RM, RPM, et puissance maximale en fonction de la distance. Les paramètres sont $\phi_C = 1eV$, $\phi_H = 1,5eV$, $T_C = 300K$, $T_H = 700K$

deviennent trop faibles pour être détectées.

La géométrie que nous avons choisie pour notre machine thermique est en fait confrontée au même problème que les machines basées sur l'émission thermoïonique : il est nécessaire d'avoir un travail de sortie très faible pour les matériaux utilisés. Pour l'émission thermoïonique l'échange d'électrons se fait au dessus du maximum de la barrière de potentiel, il faut donc vaincre les travaux de sortie des deux matériaux. Dans notre cas nous gagnons un peu car les échanges se font à travers la barrière de potentiel. Cependant pour atteindre des rendements intéressants il est capital que les échanges se fassent à travers des niveaux d'énergie résonnants. Et pour cela, dans une configuration comme celle sur la figure 4.1 ou 4.7, il faut tout de même vaincre le travail de sortie de la source chaude. Il est donc favorable de travailler avec un travail de sortie très faible pour la source chaude, or nous avons vu qu'il est également favorable d'avoir un travail de sortie pour la source froide inférieur voire proche. Ce qui nous laisse exactement avec les mêmes problématiques.

Pour essayer d'optimiser les résultats présentés précédemment nous faisons une dernière étude, cette fois avec les travaux de sortie les plus faibles trouvés dans la littérature [27]. Nous choisissons donc $\phi_C = 1eV$ et $\phi_H = 1,5eV$. Pour essayer d'atteindre un compromis entre puissance et rendement nous n'avons pas pris $\phi_C = \phi_H$. Nous commençons par tracer les courbes en distance en fixant la température de la source froide à $T_C = 300K$ et celle de la source chaude à $T_H = 700K$. L'ensemble des résultats est présenté sur la figure 4.22. Nous pouvons voir sur les courbes du RM et du RPM que pour une distance $d = 4nm$ nous sommes dans le plateau haut du RM et vers le premier maximum local du RPM. Dans ces conditions la puissance à rendement maximal est de $4mW/m^2$ et la puissance maximale est de $844mW/m^2$. Les rendements associés sont de 84,7% et 28,8%. Nous pouvons donc voir qu'avec des travaux de sortie beaucoup plus bas nous obtenons des puissances plus intéressantes pour des rendements assez élevés.

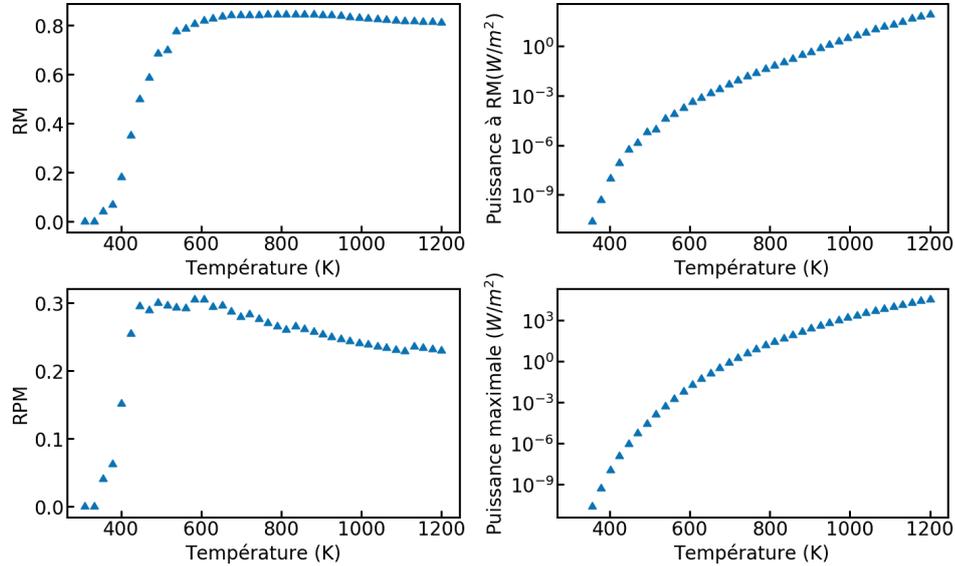


Figure 4.23 – Courbes du RM, puissance au RM, RPM, et puissance maximale en fonction de la température. Les paramètres sont $\phi_C = 1eV$, $\phi_H = 1,5eV$, $T_C = 300K$, $d = 4nm$.

Nous faisons ensuite varier la température pour trouver les points de fonctionnement les plus intéressants. Les résultats obtenus sont présentés sur les courbes de la figure 4.23. Nous pouvons voir qu'à partir de $600K$ le RM stagne voire diminue très lentement jusqu'à $1200K$ (il varie de 82% à 81%) et la puissance, elle, passe de $0,43mW/m^2$ à $87,5W/m^2$. Le RPM atteint un plateau aux alentours de 30% entre $450K$ et $650K$. Ensuite il diminue plus fortement que le RM pour atteindre 23% à $1200K$. La puissance maximale varie entre $0,9\mu W/m^2$ à $450K$ et $35kW/m^2$ à $1200K$ et on commence alors à avoir des puissances importantes pour un rendement qui reste acceptable.

En conclusion on a plusieurs options. Si l'on veut travailler avec des écarts de températures faibles (en comparaison de l'émission thermionique) on peut prendre $650K$ comme point de fonctionnement. On peut alors atteindre une puissance de $1,4mW/m^2$, ce qui est mesurable. Le rendement associé est de 83% , ce qui est proche de ce que l'on peut faire de mieux avec une machine thermique de ce type. Si on s'autorise des températures plus élevées en prenant par exemple $1000K$ comme limite alors on peut atteindre : $3.15W/m^2$ avec un rendement de 83% en favorisant le rendement, $1.56kW/m^2$ avec un rendement de 24% en favorisant la puissance.

4.6 Discussion

4.6.1 Courant thermoïonique

Étant donné que nous avons considéré des températures allant jusqu'à $1000K$ pour des travaux de sortie faibles il devient discutable de ne pas considérer le courant thermoïonique, c'est à dire les électrons qui passent par dessus la barrière de potentiel. Nous revenons dans

un premier temps sur les équations qui décrivent ce phénomène puis nous estimerons son impact sur nos résultats.

4.6.1.1 Densité de courant et flux de chaleur thermionique

La formule décrivant la densité de courant pour ce type d'émission a été trouvée par O.W. Richardson en 1901 [28] lors de ses travaux pionniers sur l'émission thermoïonique (pour lesquels il aura un prix Nobel en 1928). Nous revenons ici succinctement sur l'obtention de cette loi. Pour cela nous reprenons la formule qui donne la densité de courant sortant d'un métal à travers une barrière de potentiel (voir section 2.2.3.3).

$$J = \frac{emk_B T}{2\pi^2 \hbar^3} \int_0^\infty D(E_x) \ln \left[1 + \exp \left(-\frac{E_x - E_F}{k_B T} \right) \right] dE_x \quad (4.27)$$

Jusqu'ici nous nous étions limités à $E_F + \phi$ comme borne supérieure d'intégration, c'est à dire toutes les transitions qui se font à travers la barrière de potentiel. Le courant thermoïonique concerne la partie de cette intégrale allant de $E_F + \phi$ à $+\infty$. Nous allons donc calculer cette intégrale en prenant un coefficient de transmission D égal à 1 car nous sommes au dessus de la barrière de potentiel. Considérons dans un premier temps le cas où $k_B T \ll E_x - E_F$, c'est à dire des températures faibles. Dans ce cas $\exp(-(E_x - E_F)/(k_B T)) \rightarrow 0$ car nous sommes dans une région où $E_x > E_F$. Alors l'intégrande vaut environ $\ln(1) = 0$ et J est nulle. Quand la température augmente, l'argument de l'exponentielle diminue en valeur absolue mais l'exponentielle reste petite car $E_x - E_F \geq \phi$. On peut donc faire l'approximation $\ln(1 + x) \sim x$ où ($x \ll 1$). J se réduit alors à :

$$J = \frac{emk_B T}{2\pi^2 \hbar^3} \int_{E_F + \phi}^\infty \exp \left(-\frac{E_x - E_F}{k_B T} \right) dE_x \quad (4.28)$$

Il est aisé de résoudre cette intégrale pour trouver [29] :

$$J = A_R T^2 \exp \left(-\frac{\phi}{k_B T} \right) \quad (4.29)$$

$$A_R = \frac{emk_B^2}{2\pi^2 \hbar^3}$$

A_R est appelée la constante de Richardson et vaut $120.10^4 \text{ A.m}^{-2}.\text{K}^{-2}$. On s'intéresse maintenant au flux de chaleur. Pour cela on revient aux définitions données dans la section 4.4.2. On définit alors le flux de chaleur sortant d'un réservoir à la température T par :

$$Q = \frac{mk_B T}{2\pi^2 \hbar^3} \int_{E_F + \phi}^\infty \ln \left[1 + \exp \left(-\frac{E_x - E_F}{k_B T} \right) \right] (E_x - E_F + k_B T) dE_x \quad (4.30)$$

Encore une fois nous avons pris un coefficient de transmission unitaire car nous sommes au dessus de la barrière de potentiel. $E_x - E_F$ est l'énergie thermique de l'électron à l'énergie E_x . La composante $k_B T$ est l'énergie thermique moyenne correspondant aux dimensions non confinées. En faisant le même raisonnement sur le logarithme que pour la densité de courant on a alors :

$$Q = \frac{mk_B T}{2\pi^2 \hbar^3} \int_{E_F + \phi}^\infty \exp \left(-\frac{E_x - E_F}{k_B T} \right) (E_x - E_F + k_B T) dE_x \quad (4.31)$$

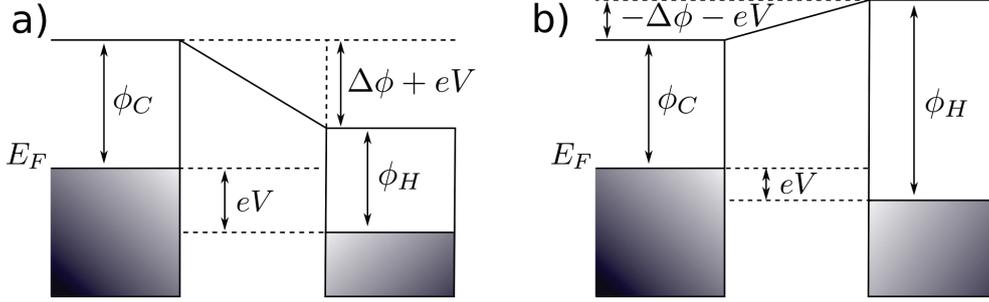


Figure 4.24 – Illustration des deux cas de figure possibles pour le courant Richardson. **a)** : $E_F + \phi_C > E_f + \phi_H - eV$, le maximum de la barrière est du côté de la source froide. **b)** : $E_F + \phi_C < E_f + \phi_H - eV$ le maximum de la barrière est du côté de la source chaude. Nous rappelons que $\Delta\phi = \phi_C - \phi_H$.

Un intégration par parties permet de calculer :

$$Q = A_R T^2 (\phi + 2k_B T) \exp\left(-\frac{\phi}{k_B T}\right) \quad (4.32)$$

Pour ces calculs nous avons considéré un simple émetteur avec une température T et un travail de sortie ϕ . La grandeur qui apparaît dans l'exponentielle est l'énergie qui sépare le niveau de Fermi de la source du maximum de la barrière de potentiel. Dans le cas simple que nous avons traité il s'agit bien de ϕ . Nous allons maintenant revenir au cas de figure ou nous avons une électrode et une contre électrode. Dans ce cas pour calculer des densités de courants et des flux de chaleurs nets il faut prendre en considération ce qui est émis par chacune des sources (chaude et froide). Nous avons en fait deux cas de figure : $E_F + \phi_C > E_f + \phi_H - eV$ et dans ce cas le maximum de la barrière à franchir est du côté de la source froide, soit c'est le contraire et le maximum de la barrière est côté source chaude. La figure 4.24 illustre cela.

Dans le cas où le maximum de la barrière de potentiel est du côté de la source froide alors les électrons de la source froide doivent surmonter une hauteur de barrière ϕ_C . Les électrons de la source chaude doivent eux surmonter une barrière de hauteur $\phi_H + \Delta\phi + eV = \phi_C + eV$. Ce qui donne pour la densité de courant et le flux de chaleur dans ce cas :

$$\begin{aligned} J_R &= A_R \left[T_H^2 \exp\left(-\frac{\phi_C + eV}{k_B T_H}\right) - T_C^2 \exp\left(-\frac{\phi_C}{k_B T_C}\right) \right] \\ Q_R &= A_R \left[(\phi_C + eV + 2k_B T_H) T_H^2 \exp\left(-\frac{\phi_C + eV}{k_B T_H}\right) \right. \\ &\quad \left. - (\phi_C + 2k_B T_C) T_C^2 \exp\left(-\frac{\phi_C}{k_B T_C}\right) \right] \end{aligned} \quad (4.33)$$

Dans le cas où le maximum de la barrière de potentiel est du côté de la source chaude alors les électrons de la source froide doivent surmonter une hauteur de barrière $\phi_C - \Delta\phi - eV = \phi_H - eV$. Les électrons de la source chaude doivent eux surmonter une barrière de hauteur ϕ_H . Ce qui donne pour la densité de courant et le flux de chaleur dans ce cas :

Température T_H		Modèle de base	Ajout thermoïonique	Ajout radiation
650K	RM	$P = 1,4 \text{ mW/m}^2$ $\eta = 83\%$	$P = 2,35 \text{ mW/m}^2$ $\eta = 81,75\%$	$P = 602,32 \text{ mW/m}^2$ $\eta = 0,16\%$
	RPM	$P = 128 \text{ mW/m}^2$ $\eta = 29,3\%$	$P = 605 \text{ mW/m}^2$ $\eta = 57,3\%$	$P = 602,32 \text{ mW/m}^2$ $\eta = 0,16\%$
1000K	RM	$P = 3,43 \text{ W/m}^2$ $\eta = 82,77\%$	$P = 4,92 \text{ W/m}^2$ $\eta = 79,82\%$	$P = 10,83 \text{ kW/m}^2$ $\eta = 39\%$
	RPM	$P = 1,73 \text{ kW/m}^2$ $\eta = 24,39\%$	$P = 16,75 \text{ kW/m}^2$ $\eta = 42,58\%$	$P = 16,64 \text{ kW/m}^2$ $\eta = 38,73\%$

Table 4.2 – Modification des résultats de simulation en ajoutant le courant et le flux de chaleur thermoïonique à notre modèle, puis le flux de chaleur dû aux transferts radiatifs. Les paramètres sont $\phi_C = 1eV$, $\phi_H = 1,5eV$, $d = 4nm$, $T_C = 300K$. RM désigne la situation où la tension appliquée est telle que le rendement est maximal. RPM désigne la situation où la tension appliquée est telle que la puissance est maximale (et donc on est au rendement à puissance maximale).

$$\begin{aligned}
 J_R &= A_R \left[T_H^2 \exp\left(-\frac{\phi_H}{k_B T_H}\right) - T_C^2 \exp\left(-\frac{(\phi_H - eV)}{k_B T_C}\right) \right] \\
 Q_R &= A_R \left[(\phi_H + 2k_B T_H) T_H^2 \exp\left(-\frac{\phi_H}{k_B T_H}\right) \right. \\
 &\quad \left. - (\phi_H - eV + 2k_B T_C) T_C^2 \exp\left(-\frac{(\phi_H - eV)}{k_B T_C}\right) \right]
 \end{aligned} \tag{4.34}$$

Pour ces formules nous avons pris la convention d'un transfert de la source chaude vers la source froide. Ces formules sont celles qui sont utilisées pour les calculs de rendement dans les machines thermiques purement thermoïoniques [8]. Pour calculer le rendement il suffit d'additionner les densités de courant et les flux de chaleur avec ceux du modèle.

4.6.1.2 Impact sur les résultats

Nous utilisons ces formules pour évaluer l'impact de l'ajout des phénomènes thermoïoniques sur nos simulations, notamment pour vérifier que le rendement n'est pas trop dégradé. Nous revenons sur la dernière géométrie étudiée qui a servi à optimiser nos résultats, c'est à dire $\phi_C = 1eV$, $\phi_H = 1,5eV$ et $d = 4nm$. La table 4.2 résume les résultats ainsi obtenus pour deux températures différentes de la source chaude : 650K et 1000K. La source froide reste à 300K.

Nous pouvons voir que pour les configurations RM l'ajout du courant thermoïonique ne change pas grand chose. On gagne moins qu'un facteur 2 en puissance et la différence diminue à mesure que la température augmente. Le rendement se dégrade de quelques % et la dégradation augmente avec la température sans toutefois être dramatique. De façon surprenante les résultats en configuration RPM sont améliorés. Comme on s'y attendait la puissance augmente dans des proportions intéressantes (d'un facteur 4,7 à 650K et d'un facteur 9,7 à 1000K). En revanche là où on aurait pu s'attendre à une diminution du

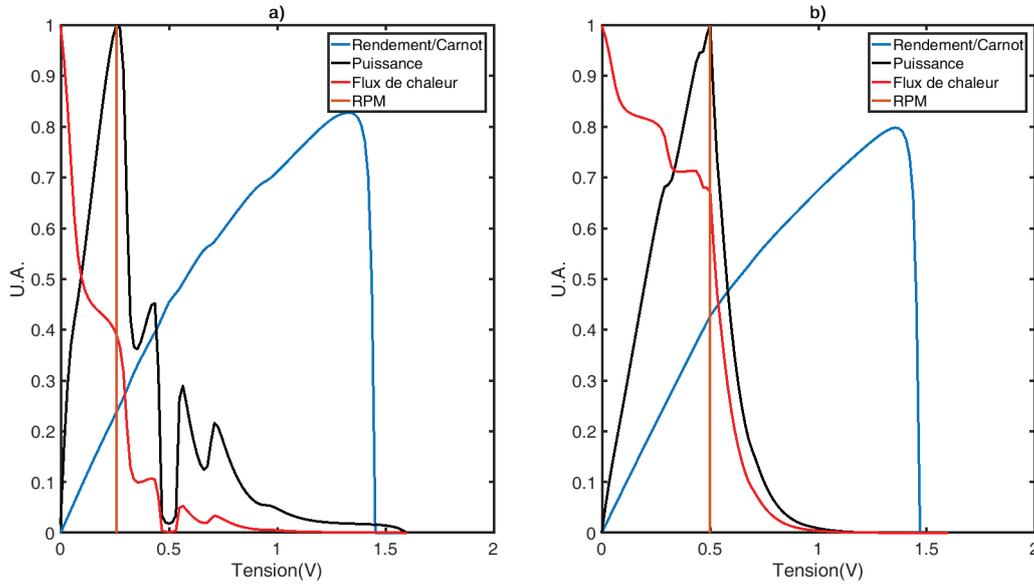


Figure 4.25 – Tracé des courbes de rendement normalisé au rendement de Carnot, de puissance électrique et de flux de chaleur normalisés entre 0 et 1. Le trait vertical indique la position du RPM. **a)** Tracé dans le cas où l'on ne prend en compte que la partie tunnel pour la densité de courant et le flux de chaleur. **b)** Tracé dans le cas où l'on prend également en compte le courant Richardson et le flux de chaleur associé. Sur la figure b) on voit que la tension pour avoir le RPM est décalée à $\sim 0,5V$, ce qui correspond à la différence des travaux de sortie. Les paramètres sont $\phi_C = 1eV$, $\phi_H = 1,5eV$, $d = 4nm$, $T_C = 300K$, $T_H = 1000K$.

rendement on a une augmentation notable d'un facteur 2 dans les deux cas.

Comme nous l'attendions notamment à la température $T_C = 1000K$ l'apport en puissance dû au transport thermoïonique est dominant. Cela a pour effet de nous déplacer sur la courbe de rendement vers des rendements supérieurs. Pour le RM cela n'est pas gênant car on favorise le rendement donc on reste toujours dans un régime où le passage par les niveaux résonants est important. En revanche pour le RPM comme on maximise la puissance on est en fait en train d'optimiser les échanges thermoïoniques. Si l'on regarde la tension à appliquer sur la barrière pour obtenir le cas de figure du RPM à $T_C = 1000K$ dans le régime où les effets thermoïoniques sont pris en compte, elle est proche de $0,5V$, soit la différence de travaux de sortie entre les deux électrodes (voir figure 4.25). Dans cette configuration la zone où les niveaux résonants se forme est quasiment supprimée. Le transport via les niveaux résonants est donc totalement négligeable et on est proches d'un régime purement thermoïonique. Le rendement est bon car théoriquement les émetteurs thermoïoniques peuvent avoir un bon rendement [8], *i.e* dans certains cas ils peuvent approcher 90% du rendement de Carnot, comme dans le modèle que nous avons développé. Dans le cas $T_C = 650K$ nous avons le même problème. Pour les critères de maximisation que nous nous sommes fixés (le RPM) nous tombons dans un régime purement thermoïonique avec une tension V_{opt} proche de $\Delta\phi$. Il convient donc de faire attention au régime dans lequel on se place en fonction de la tension que l'on applique sur la barrière. Il n'est cependant pas fondamentalement gênant d'avoir une partie du courant qui soit thermoïonique (puisque cela nous donne plus de puissance) et le système que nous avons étudié présente surtout l'avantage de pouvoir diminuer la température de la source chaude par rapport à un cas purement thermoïonique

en permettant aux électrons de transiter entre les deux réservoirs en dessous du sommet de la barrière. Notre système a donc l'avantage de donner des puissances mesurables avec un rendement acceptable à des températures inférieures à celles du régime thermoïonique. Le RPM ou le RM ne sont pas forcément les meilleurs critères à se fixer, on peut chercher à atteindre le compromis souhaité entre puissance et rendement en fonction de ce que l'on recherche.

4.6.2 Transfert thermique radiatif

Concernant les autres types de transfert thermique on néglige les transferts par convection car nous sommes sous vide. Il n'y a pas non plus de conduction par les phonons car les matériaux ne sont pas en contact. Cependant nous ne pouvons pas négliger les transferts par radiation dont le support sont les photons, surtout pour des températures avoisinant les $1000K$. Ce nouveau canal permet des échanges thermiques entre les électrodes mais n'augmente en aucun cas la puissance électrique tirée de notre machine thermique. Ce processus va donc dégrader le rendement.

La façon la plus simple de modéliser ces transferts est la loi de Stefan-Boltzmann qui stipule que [30, 31] :

$$Q_{rad} = \epsilon \sigma T^4 \quad (4.35)$$

Avec $\sigma = 5,67.10^{-8}W/m^2/K^4$ la constante de Stefan-Boltzmann et ϵ rendant compte de l'émissivité thermique du matériau. ϵ vaut 1 au maximum et sa valeur peut dépendre de la température du matériau. Dans ce type d'échange le flux sortant de la source chaude va être dominant à cause de la dépendance en T^4 . Nous allons nous intéresser aux ordres de grandeur que l'on peut obtenir en flux de chaleur par la radiation thermique. Pour la source chaude nous avons considéré un travail de sortie $\phi_H = 1,5eV$. Pour obtenir des travaux de sortie de cet ordre de grandeur on réalise un dépôt de césium sur un métal avec un travail de sortie élevé (du platine) [9, 10]. Pour estimer l'émissivité thermique d'un métal (on va donc utiliser le platine) on peut utiliser la loi trouvée par Foote en 1915 [32] (et ajustée dans les années qui suivirent [33]) :

$$\epsilon(T) = 0,578(\rho T)^{1/2} - 0,178(\rho T) + 0,0584(\rho T)^{3/2} \quad (4.36)$$

Avec ρ la résistivité électrique du métal en $\Omega.cm$ et T la température en Kelvin. Il est possible d'appliquer des modèles plus sophistiqués [34] mais nous conservons cette formule largement utilisée. La résistivité électrique dépend elle même de la température. Pour le platine elle varie entre $10,81\mu\Omega.cm$ à $300K$ et $35,1\mu\Omega.cm$ à $1000K$ [35]. Ce qui nous donne une émissivité de $0,0323$ à $300K$ et $0,1024$ à $1000K$. Nous pouvons alors estimer Q_{rad} entre $14,83W/m^2$ à $300K$ et $5,8kW/m^2$ à $1000K$. Nous voyons donc que les échanges thermiques par radiation sont loin d'être négligeables et risquent même de dominer totalement les échanges thermiques dans notre machine, ce qui est critique pour le rendement.

Dans la table 4.2 nous pouvons voir l'effet de la prise en compte des transferts thermiques radiatifs. A $650K$ les transfert radiatifs dominent les échanges et le rendement chute. A $1000K$ on arrive à avoir une combinaison de transferts tunnel et thermionique qui domine le transport de chaleur. Le rendement maximal diminue mais reste acceptable avec une contribution du transfert tunnel au total de la puissance (la tension appliquée n'est pas $0,5V$). Cependant à ces températures la contribution du courant tunnel est de l'ordre de

$10^2 W/m^2$ alors que la contribution du courant thermoïonique est de l'ordre de $10^4 W/m^2$, la première reste donc négligeable. Il est donc dans notre intérêt de choisir des matériaux avec une émissivité très réduite car l'impact que nous avons estimé est très limitant.

4.7 Conclusion

Nous avons étudié une géométrie de machine thermique reprenant la configuration classique de STM : deux surfaces séparées par une distance nanométrique dans une enceinte sous vide. La proximité de ces deux interfaces crée la possibilité d'établissement d'ondes électroniques stationnaires dans la zone inter-électrodes à cause des réflexions à l'interface avec les électrodes. Nous avons caractérisé ce phénomène par un coefficient de transmission entre les deux électrodes oscillants issu du modèle développé par Gundlach. Nous avons ensuite développé un modèle dépendant de la température sur la même base et nous l'avons confronté à des résultats expérimentaux. Puis nous avons essayé d'établir un ensemble de critères permettant de créer une machine thermique fonctionnelle dans cette géométrie.

Des études similaires ont été menées sur ce genre de géométrie mais avec des écartements plus importants et sur la base d'une émission thermoïonique. L'émission thermoïonique permet d'atteindre de fortes puissance mais les rendements des machines thermiques ainsi créés sont en général très faibles. L'avantage de notre modèle réside dans son rendement qui à première vue est plus élevé grâce aux niveaux résonants qui agissent comme des filtres en énergie. En revanche notre modèle ne peut rivaliser en terme de puissance avec ce qui se fait en thermoïonique (ou il est possible d'atteindre le MW/m^2). Le deuxième avantage réside dans la température de la source chaude. Les machines thermiques thermoïoniques fonctionnent avec des sources chaudes à plus de $1000K$ et notre modèle permet d'explorer des zones de température inférieure. Il faut noter que nous sommes confrontés à une problématique forte qui est également celle des émetteurs thermoïoniques : pour fonctionner notre machine a besoin d'avoir les niveaux proches du sommet de la barrière peuplés d'électrons. Cela implique soit de fonctionner à haute température soit d'avoir des travaux de sortie très faibles. De plus lorsque l'on commence à étudier les phénomènes parasites de conduction de chaleur, c'est à dire en ajoutant les contributions thermoïoniques et radiatives des transferts de chaleur (qui en pratique limite aussi les émetteurs thermoïoniques) on se rend compte de certains problèmes. Premièrement dans notre cas optimisé à $650K$ nous avons un haut rendement mais une faible puissance. Or pour un écart de température de $350K$ entre les réservoirs le flux thermique radiatif domine les échanges thermiques et fait chuter le rendement. Pour réduire cet effet il faut réduire l'écart de température (donc réduire la température de la source chaude), ce qui a pour effet de diminuer la puissance. Pour une température de la source chaude de $1000K$ on obtient de bonnes valeurs de puissance et de rendement mais le courant obtenu est dominé par le canal thermoïonique, ce qui nous éloigne de la machine thermique que nous voulions construire à la base. Le travail présenté n'est donc qu'une première étape dans la réalisation d'une telle machine.

La suite du travail consistera à limiter au maximum la contribution du courant thermoïonique par rapport au courant tunnel. Pour augmenter le courant tunnel on peut diminuer la distance entre les électrodes et bien sûr réduire les travaux de sortie est toujours un avantage (les matériaux modifiés pour avoir un très faible travail de sortie ont connu une amélioration de leur stabilité et de leur durée de vie). La réduction de distance présente elle même des désavantages auxquels il faut prêter attention. Quand la distance inter-électrodes devient de l'ordre de grandeur de la longueur d'onde thermique alors on peut avoir des phénomènes de transition tunnel de photons, ce qui peut changer l'ordre de grandeur des échanges radiatifs à la hausse. C'est ce que l'on appelle le transfert radiatif en champ proche, le transfert

thermique radiatif varie en $1/d^2$ à faible distance et devient donc vite critique [36, 37, 38, 39, 40, 41]. Ensuite si la distance est trop faible le rendement tend à être mauvais car les échanges se font surtout au niveau de Fermi, ce qui nous impose une limite supplémentaire. Une piste d'amélioration du rendement est la largeur de nos résonances. En effet on a typiquement une largeur de quelques dizaines de meV voire plus (ce qui n'est déjà pas si mal mais sans doute améliorable) et quand on a plusieurs résonances qui se forment elles peuvent se chevaucher partiellement (voir figure 4.17). Une piste serait d'améliorer la géométrie en ajoutant une couche entre le vide et le réservoir d'électron, dans lequel les niveaux électroniques sont confinés, ce qui améliorerait le filtrage des énergies et donc le rendement (simulations en cours). On pourrait par exemple ajouter une fine couche de BN qui est un matériau 2D dont l'épaisseur de dépôt est contrôlable. On pourrait également envisager une géométrie non plane et l'utilisation d'une nanoprotusion afin d'augmenter le nombre de directions confinées, ce qui nous permettrait de nous approcher du régime de Carnot. Enfin à très courte distance le phénomène de charge image entre en jeu et il conviendrait de le prendre en compte également, *i.e* en ajoutant une correction au potentiel et en résolvant la nouvelle équation de Schrödinger [42, 43]. Cet effet abaisse la barrière de potentiel, il pourrait donc nous être favorable dans un régime basse température. Il a d'ailleurs été pris en compte dans des études de gap nanométrique mais plutôt dans des études visant une machine frigorifique avec un coefficient de transmission issu de la méthode WKB [44, 45, 46].

Références

- [1] W.J. BIFANO et L.R. SCUDDER. “Comparison of solar direct-energy conversion systems operating between 1.0 and 0.1 astronomical unit”. Dans : (1967).
- [2] R. ALICKI, D. GELBWASER-KLIMOVSKY et A. JENKINS. “A thermodynamic cycle for the solar cell”. Dans : *Annals of Physics* 378 (2017), p. 71-87.
- [3] J.M. HOUSTON et H.J. WEBSTER. “Thermionic energy conversion”. Dans : *Advances in electronics and electron physics*. T. 17. Elsevier, 1963, p. 125-206.
- [4] J.H. LEE et al. “Microfabricated silicon carbide thermionic energy converter for solar electricity generation”. Dans : *2012 IEEE 25th International Conference on Micro Electro Mechanical Systems (MEMS)*. IEEE. 2012, p. 1261-1264.
- [5] C. ZHANG et al. “Micro combustion-thermionic power generation : feasibility, design and initial results”. Dans : *TRANSDUCERS’03. 12th International Conference on Solid-State Sensors, Actuators and Microsystems. Digest of Technical Papers (Cat. No. 03TH8664)*. T. 1. IEEE. 2003, p. 40-44.
- [6] R.Y. BELBACHIR, Z. AN et T. ONO. “Thermal investigation of a micro-gap thermionic power generator”. Dans : *Journal of Micromechanics and Microengineering* 24 (2014), p. 085009.
- [7] J.H. LEE et al. “Optimal emitter-collector gap for thermionic energy converters”. Dans : *Applied Physics Letters* 100 (2012), p. 173904.
- [8] J.M. HOUSTON. “Theoretical efficiency of the thermionic energy converter”. Dans : *Journal of Applied Physics* 30 (1959), p. 481-487.
- [9] S.Å. LINDGREN et L. WALLDEN. “Electronic structure of clean and oxygen-exposed Na and Cs monolayers on Cu (111)”. Dans : *Physical Review B* 22 (1980), p. 5967.
- [10] G.G. MAGERA et P.R. DAVIS. “Interaction of cesium and barium on partially oxygen covered Nb (110)”. Dans : *Journal of Vacuum Science & Technology A : Vacuum, Surfaces, and Films* 11 (1993), p. 2336-2341.
- [11] T.E. HUMPHREY et al. “Reversible quantum Brownian heat engines for electrons”. Dans : *Physical review letters* 89 (2002), p. 116801.
- [12] D.T. SMITH et al. “An ultrastable platform for the study of single-atom chains”. Dans : *Journal of Applied Physics* 107 (2010), p. 084307.
- [13] O.Y. KOLESNYCHENKO, O.I. SHKLYAREVSKII et H. Van KEMPEN. “Calibration of the distance between electrodes of mechanically controlled break junctions using field emission resonance”. Dans : *Review of scientific instruments* 70 (1999), p. 1442-1446.
- [14] O.Y. KOLESNYCHENKO et al. “Field-emission resonance measurements with mechanically controlled break junctions”. Dans : *Physica B : Condensed Matter* 291 (2000), p. 246-255.
- [15] J.H. COOMBS et J.K. GIMZEWSKI. “Fine structure in field emission resonances at surfaces”. Dans : *Journal of Microscopy* 152 (1988), p. 841-851.
- [16] C. PAULY et al. “Gundlach oscillations and Coulomb blockade of Co nanoislands on MgO/Mo (100) investigated by scanning tunneling spectroscopy at 300 K”. Dans : *Physical Review B* 81 (2010), p. 125446.
- [17] H.C. PLOIGT et al. “Local work function changes determined by field emission resonances : Na Cl/ Ag (100)”. Dans : *Physical Review B* 76 (2007), p. 195404.

- [18] C.L. LIN et al. “Manifestation of work function difference in high order Gundlach oscillation”. Dans : *Physical review letters* 99 (2007), p. 216103.
- [19] T. ESAT et al. “A standing molecule as a single-electron field emitter”. Dans : *Nature* 558 (2018), p. 573.
- [20] E.H. HUISMAN et al. “The mechanical response of lithographically defined break junctions”. Dans : *Journal of Applied Physics* 109 (2011), p. 104305.
- [21] K.H. GUNDLACH. “Zur Berechnung des Tunnelstroms durch eine trapezförmige Potentialstufe”. Dans : *Solid-State Electronics* 9 (1966), p. 949-957.
- [22] R.G. CHAMBERS. “Thermoelectric effects and contact potentials (for teachers)”. Dans : *Physics Education* 12 (1977), p. 374.
- [23] M.F. O’DWYER et al. “Electronic efficiency in nanostructured thermionic and thermoelectric devices”. Dans : *Physical Review B* 72 (2005), p. 205330.
- [24] M. ESPOSITO, K. LINDENBERG et C. Van den BROECK. “Thermoelectric efficiency at maximum power in a quantum dot”. Dans : *EPL (Europhysics Letters)* 85 (2009), p. 60010.
- [25] N. NAKPATHOMKUN, H.Q. XU et H. LINKE. “Thermoelectric efficiency at maximum power in low-dimensional systems”. Dans : *Physical Review B* 82 (2010), p. 235428.
- [26] F.L. CURZON et B. AHLBORN. “Efficiency of a Carnot engine at maximum power output”. Dans : *American Journal of Physics* 43 (1975), p. 22-24.
- [27] K.A.A. KHALID, T.J. LEONG et K. MOHAMED. “Review on thermionic energy converters”. Dans : *IEEE transactions on electron devices* 63 (2016), p. 2231-2241.
- [28] O.W. RICHARDSON. *On the Negative Radiation from Hot Platinum...* University Press, 1901.
- [29] A. MODINOS. *Secondary electron emission spectroscopy*. Springer, 1984.
- [30] J. STEFAN et K.K.H. STAATSDRUCKERIE. *Über die Beziehung zwischen der Wärmestrahlung und der Temperatur*. Aus der kk Hof-und Staatsdruckerei, 1879.
- [31] L. BOLTZMANN. “Ableitung des Stefan’schen Gesetzes, betreffend die Abhängigkeit der Wärmestrahlung von der Temperatur aus der electromagnetischen Lichttheorie”. Dans : *Annalen der Physik* 258 (1884), p. 291-294.
- [32] P.D. FOOTE. “The total emissivity of platinum and the relation between total emissivity and resistivity”. Dans : *Journal of the Washington Academy of Sciences* 5 (1915), p. 1-7.
- [33] Y.S. TOULOUKIAN et P.D. DEWITT. *Thermophysical properties of matter-The tprc data series. volume 7. thermal radiative properties-metallic elements and alloys*. Rapp. tech. THERMOPHYSICAL et ELECTRONIC PROPERTIES INFORMATION ANALYSIS CENTER, 1970.
- [34] A.J. SIEVERS. “Thermal radiation from metal surfaces”. Dans : *JOSA* 68 (1978), p. 1505-1516.
- [35] E.M. SAVITSKIY. “Precious Metals Handbook”. Dans : “*Metallurgiya*”, 1984, (1984), p. 592.
- [36] S. BASU, Z.M. ZHANG et C.J. FU. “Review of near-field thermal radiation and its application to energy conversion”. Dans : *International Journal of Energy Research* 33 (2009), p. 1203-1232.
- [37] D.V.H.M. POLDER et M. Van HOVE. “Theory of radiative heat transfer between closely spaced bodies”. Dans : *Physical Review B* 4 (1971), p. 3303.

- [38] J.J. LOOMIS et H.J. MARIS. “Theory of heat transfer by evanescent electromagnetic waves”. Dans : *Physical Review B* 50 (1994), p. 18517.
- [39] V. CHILOYAN et al. “Transition from near-field thermal radiation to phonon heat conduction at sub-nanometre gaps”. Dans : *Nature communications* 6 (2015), p. 6755.
- [40] M.P. BERNARDI, D. MILOVICH et M. FRANCOEUR. “Radiative heat transfer exceeding the blackbody limit between macroscale planar surfaces separated by a nanosize vacuum gap”. Dans : *Nature communications* 7 (2016), p. 12900.
- [41] K. KIM et al. “Radiative heat transfer in the extreme near field”. Dans : *Nature* 528 (2015), p. 387.
- [42] J.G. SIMMONS. “Generalized formula for the electric tunnel effect between similar electrodes separated by a thin insulating film”. Dans : *Journal of applied physics* 34 (1963), p. 1793-1803.
- [43] A. HARTSTEIN et Z.A. WEINBERG. “On the nature of the image force in quantum mechanics with application to photon assisted tunnelling and photoemission”. Dans : *Journal of Physics C : Solid State Physics* 11 (1978), p. L469.
- [44] G. DESPESE et T. JAGER. “Exploitation of the thermotunnel effect for energy scavenging”. Dans : *Journal of applied physics* 96 (2004), p. 5026-5031.
- [45] Y. HISHINUMA et al. “Refrigeration by combined tunneling and thermionic emission in vacuum : Use of nanometer scale design”. Dans : *Applied Physics Letters* 78 (2001), p. 2572-2574.
- [46] M.F. O’DWYER et al. “Efficiency in nanometre gap vacuum thermionic refrigerators”. Dans : *Journal of Physics D : Applied Physics* 42 (2009), p. 035417.