

Modélisation et étude de la conversion électromécanique

Parmi les différentes solutions envisageables pour la réalisation d'un microgénérateur présentées au chapitre précédent, nous avons étudié plus particulièrement la configuration où des nanofils (NFs) sont sollicités en flexion simple. La première étape permettant d'étudier la faisabilité et l'utilité d'un microgénérateur piézoélectrique dont les éléments actifs sont des NFs de ZnO en flexion concerne la modélisation physique d'un NF. Ce modèle étudie la flexion statique d'un NF et permet le calcul du potentiel électrique induit par couplage piézoélectrique. Le potentiel électrique peut être considéré comme un facteur d'appréciation de la conversion électromécanique du NF. Un modèle statique semi-analytique de NF encastré-libre soumis à une force ponctuelle située à son extrémité est proposé. Le tenseur des contraintes \mathbf{T} et la densité de charge électrique créée par effet piézoélectrique ρ_P sont déterminés analytiquement. Le potentiel électrostatique ϕ est calculé dans une section du NF par la méthode des éléments finis avec le logiciel Comsol[®]. L'originalité du modèle vient de la prise en compte des propriétés semiconductrices du ZnO et de l'influence de la charge libre sur la conversion électromécanique de l'énergie. Dans la première partie sont présentés le modèle et les hypothèses sur lesquelles il repose. Par la suite, on pose et on résout le problème de Saint-Venant pour déterminer \mathbf{T} . ϕ est régi par l'équation de Poisson et provient de l'existence de deux types de charge électrique : Q_P la charge piézoélectrique et Q_L la charge libre. La concentration en porteurs de charge libres au sein du NF est notamment calculée à l'aide de la statistique de Fermi-Dirac. Enfin, les paramètres influençant la répartition du potentiel électrostatique sont présentés, notamment la force appliquée F , le facteur de forme du NF f_f , la température Θ et la concentration en impuretés

ou taux de dopage N_d .

2.1 Présentation du modèle

2.1.1 Description du système

Le système modélisé est un NF de ZnO en configuration verticale. Celui-ci croît orthogonalement à un substrat selon son axe c . D'un point de vue mécanique et pourvu que le NF ait une longueur L suffisamment grande devant a son côté, on peut considérer le NF comme une poutre encastrée en $x_1 = 0$ et libre à son autre extrémité. Le NF présente une section hexagonale parfaite provenant à la fois de l'axe de croissance et de la structure wurtzite du ZnO. Sur l'extrémité libre en $x_1 = L$, on impose une force F orientée selon x_3 qui entraîne une flexion du NF. Le système d'axes est choisi de sorte que x_2 et x_3 coïncident avec le repère central principal d'inertie de la poutre, x_1 étant tangent à sa ligne moyenne (courbe passant par les centres de gravité des sections de la poutre). Le NF et le système d'axes associé sont représentés sur la figure 2.1.

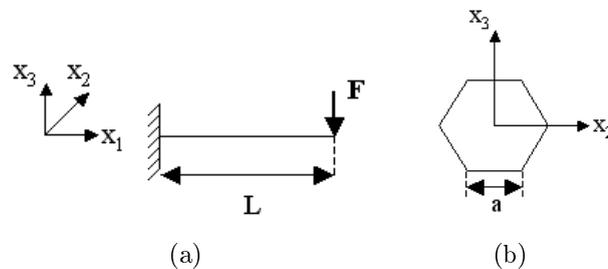


FIGURE 2.1 – a) NF chargé à son extrémité et b) section du NF.

2.1.2 Equations du problème

Les grandeurs mécaniques et électriques du problème sont régies par quatre équations : l'équation d'équilibre mécanique, l'équation de compatibilité géométrique, les équations constitutives de la piézoélectricité et l'équation de Gauss. Les deux premières équations sont des équations purement mécaniques dont la résolution permet de déterminer le tenseur des contraintes \mathbf{T} . Dans le cas où on néglige l'action de forces de volume, l'équation d'équilibre mécanique devient :

2.1. PRÉSENTATION DU MODÈLE

$$\nabla \cdot \mathbf{T} = 0 \quad (2.1)$$

et l'équation de compatibilité géométrique s'écrit :

$$\frac{\partial^2 S_{ik}}{\partial x_j \partial x_l} + \frac{\partial^2 S_{jl}}{\partial x_i \partial x_k} - \frac{\partial^2 S_{jk}}{\partial x_i \partial x_l} - \frac{\partial^2 S_{il}}{\partial x_j \partial x_k} = 0 \quad (2.2)$$

(2.2) assure que le tenseur des déformations \mathbf{S} dérive bien d'un champ de déplacement en imposant des contraintes géométriques que doit vérifier \mathbf{S} [104]. Les équations constitutives traduisent les propriétés piézoélectriques du matériau et relient le tenseur des contraintes \mathbf{T} et le déplacement électrique \mathbf{D} au tenseur des déformations \mathbf{S} et au champ électrique \mathbf{E} :

$$\begin{aligned} \mathbf{T} &= \mathbf{c}^E \mathbf{S} + \mathbf{e}^t \mathbf{E} \\ \mathbf{D} &= \mathbf{e} \mathbf{S} + \epsilon^S \mathbf{E} \end{aligned} \quad (2.3)$$

avec \mathbf{c}^E la matrice des rigidités à champ électrique constant, \mathbf{e} la matrice des constantes piézoélectriques, \mathbf{e}^t sa transposée et ϵ^S la matrice des permittivités électriques à déformation constante. Enfin, en tenant compte de la présence d'une densité de charge libre ρ_L , l'équation de Gauss s'écrit :

$$\nabla \cdot \mathbf{D} = \rho_L \quad (2.4)$$

Afin de faciliter la recherche d'une solution analytique pour \mathbf{T} et ρ_P , on formule deux hypothèses fortes. Tout d'abord, les équations de la piézoélectricité ont été simplifiées. En appliquant la théorie de la perturbation à (2.3), on peut réécrire les équations constitutives pour différents ordres d'approximation. Au 1^{er} ordre, on ne prend en compte que l'effet piézoélectrique direct [105]. L'effet de \mathbf{E} sur \mathbf{T} est négligé. Les équations de la piézoélectricité au 1^{er} ordre s'écrivent alors :

$$\begin{aligned} \mathbf{T} &= \mathbf{c}^E \mathbf{S} \\ \mathbf{D} &= \mathbf{e} \mathbf{S} + \epsilon^S \mathbf{E} \end{aligned} \quad (2.5)$$

Le premier terme de (2.5) n'est autre que la loi de Hooke. \mathbf{T} et \mathbf{S} ne sont liés que par les propriétés élastiques du matériau. Le ZnO étant un matériau hexagonal de classe $6mm$, les matrices \mathbf{c}^E , \mathbf{e} et ϵ^S s'écrivent, en utilisant la notation de Voigt [106] :

2.1. PRÉSENTATION DU MODÈLE

$$c_{\alpha\beta}^E = \begin{bmatrix} c_{11}^E & c_{12}^E & c_{13}^E & 0 & 0 & 0 \\ c_{12}^E & c_{11}^E & c_{13}^E & 0 & 0 & 0 \\ c_{13}^E & c_{13}^E & c_{33}^E & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & c_{44}^E & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & c_{44}^E & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{c_{11}^E - c_{12}^E}{2} \end{bmatrix} \quad (2.6)$$

$$e_{i\alpha} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & e_{15} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e_{15} & 0 & 0 \\ e_{31} & e_{31} & e_{33} & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad \epsilon_{ij}^S = \begin{bmatrix} \epsilon_{11}^S & 0 & 0 \\ 0 & \epsilon_{11}^S & 0 \\ 0 & 0 & \epsilon_{33}^S \end{bmatrix}$$

Par la suite, on omet les exposants E et S au niveau des composantes de \mathbf{c} et ϵ . Toujours dans le souci de trouver une solution analytique au problème de Saint-Venant, on fait l'hypothèse que le tenseur des rigidités est similaire à celui d'un matériau isotrope. On peut *a priori* formuler une telle hypothèse du fait de la faible anisotropie du ZnO. Ainsi, on a :

$$c_{\alpha\beta,iso} = \begin{bmatrix} c_{11} & c_{12} & c_{12} & 0 & 0 & 0 \\ c_{12} & c_{11} & c_{12} & 0 & 0 & 0 \\ c_{12} & c_{12} & c_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{c_{11} - c_{12}}{2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{c_{11} - c_{12}}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{c_{11} - c_{12}}{2} \end{bmatrix} \quad (2.7)$$

Les rigidités du matériau isotrope équivalent sont déterminées en cherchant le couple de valeurs $(c_{11,iso}; c_{12,iso})$ qui minimise l'erreur quadratique ϵ_{iso}^2 introduite par l'approximation :

$$\epsilon_{iso}^2 = \frac{\sum_{\alpha,\beta} (c_{\alpha\beta} - c_{\alpha\beta,iso})^2}{\sum_{\alpha,\beta} c_{\alpha\beta}^2} \quad (2.8)$$

En utilisant les propriétés élastiques du ZnO données dans [34], on trouve un matériau isotrope équivalent possédant un module d'Young $Y = c_{11} - 2\frac{c_{12}^2}{c_{11} - c_{12}} = 142$ GPa et un coefficient de Poisson $\nu = \frac{c_{12}}{c_{11} + c_{12}} = 0.323$, pour une erreur minimisée $\epsilon_{iso} = 21\%$. Même si ϵ_{iso} est élevée, l'erreur relative n'est pas la même suivant la composante de \mathbf{c} . Lorsqu'on développe la première équation de 2.5, seules les

2.1. PRÉSENTATION DU MODÈLE

composantes c_{11} , c_{12} , c_{13} et c_{33} interviennent dans le calcul de \mathbf{T} . Les erreurs relatives associées à chacune d'elles sont : $\varepsilon_{c_{11}} = 2.3\%$, $\varepsilon_{c_{12}} = 19.3\%$, $\varepsilon_{c_{13}} = 7.0\%$ et $\varepsilon_{c_{33}} = 2.9\%$. Finalement, seule l'erreur induite sur c_{12} est conséquente.

La validité de ces deux hypothèses simplificatrices (matériau isotrope, effet piézoélectrique indirect négligé) est vérifiée *a posteriori* en comparant les contraintes T_{11} et T_{13} calculées pour un modèle spécifique de NF développé à l'aide d'Ansys[®]. Ce modèle basé sur la méthode des éléments finis permet de changer aisément les propriétés piézoélastiques du matériau (isotrope ou anisotrope, piézoélectrique ou non) et la nature des déformations. Des simulations en grandes déformations dont quelques résultats sont présentés en Annexe B ont montré la nécessité de déterminer un critère de non-linéarité qui fixe le domaine de validité du modèle semi-analytique. Le calcul du tenseur des contraintes ainsi que la validation des hypothèses par le modèle numérique sont présentés dans la partie suivante.

2.2 Détermination du tenseur des contraintes

Pour déterminer \mathbf{T} , il est nécessaire de définir le cadre physique de l'étude du problème mécanique. Au vu des dimensions des NFs, la fréquence du premier mode de résonance en flexion est de l'ordre de la centaine de kHz. La gamme de fréquence des sources d'énergie mécanique visées est largement inférieure (quelques kHz tout au plus). Dans ce cas, on est en régime quasi-statique, les effets dynamiques sont négligeables et on peut considérer que même si la poutre est déformée par une force variant dans le temps, la poutre passe par des états d'équilibre successifs. On se place *a priori* dans l'hypothèse de petites déformations, les sections restent donc perpendiculaires à la ligne moyenne de la poutre. Le modèle de poutre utilisé est choisi en fonction de son facteur de forme $f_f = \frac{L}{2a}$ avec L la longueur et a le rayon du NF. Les NF de ZnO présentant généralement des facteurs de formes élevés ($f_f \geq 10$), le modèle de poutre d'Euler-Bernoulli est satisfaisant. Si $f_f \leq 10$, on ne peut plus négliger l'inertie en rotation de la section. Il faut alors avoir recours à d'autres approches comme le modèle de poutre de Timoshenko.

2.2.1 Torseur des efforts intérieurs

Les contraintes mécaniques apparaissant dans le NF résultent des actions mécaniques extérieures qui lui sont appliquées. Celles-ci sont de deux natures distinctes : la force fléchissante \vec{F} qui est une charge concentrée et les actions de liaisons apparaissant aux conditions limites mécaniques de la poutre.

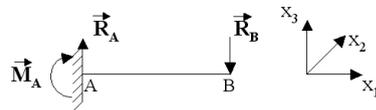


FIGURE 2.2 – Actions mécaniques extérieures exercées sur la poutre.

Les actions de liaisons sont de deux natures : \vec{R}_M et \vec{M}_M désignent respectivement des forces réactives et des moments appliqués en un point M . A l'extrémité libre du NF, le moment fléchissant est nul, le torseur de la charge extérieure au point B s'écrit :

$$\mathcal{T}_{charge} = \left\{ \begin{array}{c} \vec{R}_B \\ 0 \end{array} \right\}_B \quad (2.9)$$

2.2. DÉTERMINATION DU TENSEUR DES CONTRAINTES

Au niveau de l'encastrement (supposé parfait), aucun déplacement de la poutre n'est possible. Une force et un moment apparaissent en réaction à la force exercée en B. Le torseur de liaison au point A s'écrit alors :

$$\mathcal{T}_{liaison} = \left\{ \begin{array}{c} \vec{R}_A \\ \vec{M}_A \end{array} \right\}_A \quad (2.10)$$

Le principe fondamental de la statique appliqué au point A permet de déterminer les inconnues de liaison. Il s'écrit :

$$\begin{aligned} \vec{R}_B + \vec{R}_A &= \vec{0} \\ \vec{AB} \wedge \vec{R}_B + \vec{M}_A &= \vec{0} \end{aligned} \quad (2.11)$$

ce qui donne :

$$\begin{aligned} \vec{R}_A &= -\vec{R}_B = F\vec{x}_3 \\ \vec{M}_A &= -\vec{AB} \wedge \vec{R}_B = FL\vec{x}_2 \end{aligned} \quad (2.12)$$

Finalement, $\mathcal{T}_{liaison}$ et \mathcal{T}_{charge} s'écrivent :

$$\mathcal{T}_{liaison} = \left\{ \begin{array}{cc} 0 & 0 \\ 0 & FL \\ F & 0 \end{array} \right\}_A, \quad \mathcal{T}_{charge} = \left\{ \begin{array}{cc} 0 & 0 \\ 0 & 0 \\ -F & 0 \end{array} \right\}_B \quad (2.13)$$

On cherche à présent le torseur des efforts intérieurs à la poutre \mathcal{T}_{int} . Pour ce faire, on effectue une coupure au point C d'abscisse x_1 qui divise le milieu en deux parties distinctes 1 et 2 :

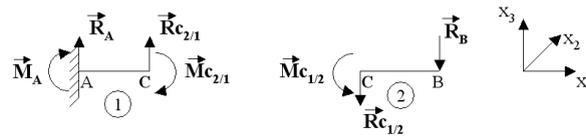


FIGURE 2.3 – Efforts intérieurs à la poutre.

On détermine \mathcal{T}_{int} grâce au principe fondamental de la statique qui, appliqué sur une des deux parties au choix, stipule que $\mathcal{T}_{ext} + \mathcal{T}_{int} = \vec{0}$. Sur la partie 1, le torseur des efforts extérieurs \mathcal{T}_{ext} n'est autre que $\mathcal{T}_{liaison}$ précédemment défini. Au point C, le torseur des actions de la partie 2 sur la partie 1 constitue le torseur des efforts intérieurs \mathcal{T}_{int} . On a :

2.2. DÉTERMINATION DU TENSEUR DES CONTRAINTES

$$\begin{aligned}\vec{R}_A + \vec{R}_{C_2/1} &= \vec{0} \\ \vec{M}_A + \vec{M}_{C_2/1} + \vec{AC} \wedge \vec{R}_{C_2/1} &= \vec{0}\end{aligned}\quad (2.14)$$

ce qui conduit à :

$$\mathcal{T}_{int} = \left\{ \begin{array}{c} \vec{R}_C \\ \vec{M}_C \end{array} \right\}_C = \left\{ \begin{array}{cc} 0 & 0 \\ 0 & M_{f_2} \\ F_{t_3} & 0 \end{array} \right\}_C = \left\{ \begin{array}{cc} 0 & 0 \\ 0 & F(x_1 - L) \\ -F & 0 \end{array} \right\}_C \quad (2.15)$$

\mathcal{T}_{int} est composé d'un effort tranchant suivant \vec{x}_3 ($F_{t_3} = \vec{R}_C \cdot \vec{x}_3 = -F$) et d'un moment fléchissant autour de \vec{x}_2 ($M_{f_2} = \vec{M}_C \cdot \vec{x}_2 = F(x_1 - L)$). L'effort tranchant est constant, le moment fléchissant est linéaire et maximal au niveau de l'encastrement et nul à l'extrémité libre.

La détermination des efforts intérieurs et des réactions de liaisons est un problème classique de mécanique des solides où on assimile la poutre à un système unidimensionnel. La recherche du tenseur des contraintes nécessite dorénavant de considérer la poutre comme un milieu tridimensionnel. En effectuant une démarche similaire à celle de la figure 2.3, la coupure de la poutre au point C fait apparaître sa section A . Sur la figure 2.4, on appelle M le point courant de A et dA un élément infinitésimal (ou facette) orienté suivant \vec{n} . C est le centre de gravité de A .

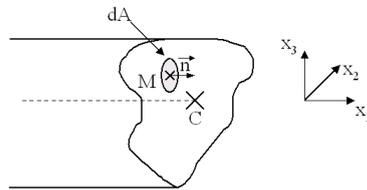


FIGURE 2.4 – Détail d'une section de la poutre.

Le torseur des actions de la partie 2 sur la partie 1 de la poutre est l'expression intégrale des contraintes apparaissant dans la section A :

$$\begin{aligned}\vec{R}_C &= \int_A \mathbf{T}_M \otimes \vec{n} dA \\ \vec{M}_C &= \int_A \vec{CM} \wedge \mathbf{T}_M \otimes \vec{n} dA\end{aligned}\quad (2.16)$$

\mathbf{T}_M est le tenseur des contraintes au point M . \otimes est l'opérateur produit tensoriel. Sur la base locale de la poutre $(C, \vec{x}_1, \vec{x}_2, \vec{x}_3)$, \mathbf{T}_M s'écrit :

$$\mathbf{T}_M = \begin{bmatrix} T_{11} & T_{12} & T_{13} \\ T_{12} & T_{22} & T_{23} \\ T_{13} & T_{23} & T_{33} \end{bmatrix} \quad (2.17)$$

En projetant (2.16) sur $(C, \vec{x}_1, \vec{x}_2, \vec{x}_3)$ et connaissant \mathcal{T}_{int} (2.15), on peut écrire :

$$\begin{aligned} F_{t_3} &= \int_A T_{13} dA \\ M_{f_2} &= \int_A x_3 T_{11} dA \end{aligned} \quad (2.18)$$

La contrainte tangentielle T_{13} ne dépend que de l'effort tranchant F_{t_3} , tandis que la contrainte longitudinale T_{11} ne dépend que du moment fléchissant M_{f_2} .

Si on a établi la relation entre les efforts intérieurs et le tenseur des contraintes, ce dernier est loin d'être défini de manière unique. En effet, l'équation (2.18) admet une infinité de solutions [104]. Il est nécessaire de formuler des hypothèses supplémentaires sur \mathbf{T} pour déterminer une solution unique. Ceci est traité dans la partie suivante.

2.2.2 Problème de Saint-Venant

L'équation (2.18) lie les efforts intérieurs aux contraintes dans le cas d'une poutre encastree-libre chargée par une force ponctuelle située à son extrémité libre. Dans le cas général, on démontre que les efforts intérieurs dépendent uniquement des seules contraintes T_{11} , T_{12} et T_{13} [107]. Cette constatation suggère que \mathbf{T} soit de la forme :

$$\mathbf{T} = \begin{bmatrix} T_{11} & T_{12} & T_{13} \\ T_{12} & 0 & 0 \\ T_{13} & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (2.19)$$

Cette condition est suffisante pour assurer l'unicité de \mathbf{T} . La formulation de \mathbf{T} repose sur le principe empirique de Saint-Venant. Si \mathcal{T}_{int} n'est pas réparti convenablement sur A , la perturbation des zéros de \mathbf{T} n'est que locale. En d'autres termes, la forme de \mathbf{T} donnée par l'équation (2.19) est valable loin des zones d'application des sollicitations mécaniques extérieures. En pratique, (2.19) est valable dans des zones éloignées de 2 à 3 diamètres des sections chargées [107]. Dans le cas étudié, les sections chargées se situent au niveau de l'encastrement et de l'extrémité libre. Enfin, comme on s'est placé dans l'hypothèse des petites déformations, on utilise le principe de superposition. Les contraintes dans une

2.2. DÉTERMINATION DU TENSEUR DES CONTRAINTES

section A de la poutre sont dues à la somme des contraintes induites par chaque effort intérieur qui sont l'effort tranchant F_{t_3} et le moment fléchissant M_{f_2} .

\mathbf{T} est déterminé sur un tronçon de poutre de longueur ΔL délimité par les sections A_0 et A_1 et de surface latérale extérieure A_L (voir la figure 2.5). On résout le problème sous sa forme locale définie par l'équation d'équilibre (2.1) et l'équation de Beltrami (2.20) qui n'est autre que l'équation de compatibilité géométrique (2.2) exprimée en contraintes [107] :

$$\nabla^2 \mathbf{T} - \frac{1}{1 + \nu} \nabla \nabla (\text{Tr}(\mathbf{T})) = 0 \quad (2.20)$$

ν est le coefficient de Poisson déterminé au § 2.1.2. En tenant compte des conditions limites sur A_0 , A_1 et A_L et d'après le principe de superposition, la résolution de ces équations donne [104] :

$$\begin{aligned} T_{11} &= \frac{M_{f_2}}{I_2} x_3 \\ T_{12} &= \partial_3 \varphi \\ T_{13} &= \partial_2 \varphi - \frac{F x_3^2}{I_2} + f(x_2) \end{aligned} \quad (2.21)$$

où $I_2 = \frac{5\sqrt{3}a^4}{16}$ est le moment quadratique de la section suivant l'axe principal d'inertie \vec{x}_2 . f est une fonction arbitraire qui ne dépend que de x_2 . $\varphi(x_2, x_3)$ est appelée fonction de contrainte et dépend de la forme de A [104]. Une version détaillée du calcul est proposée en Annexe A.

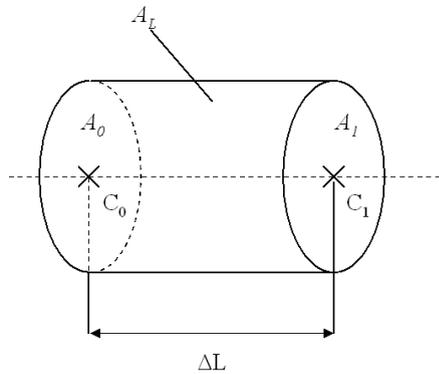


FIGURE 2.5 – Domaine de résolution du problème de Saint-Venant.

Une solution analytique existe pour quelques cas de sections simples (sections circulaire, elliptique et rectangulaire). Dans le cas présent (section hexagonale), le calcul de φ ne peut se faire que de manière numérique. On peut cependant trouver

2.2. DÉTERMINATION DU TENSEUR DES CONTRAINTES

une solution approchée des contraintes tangentielles grâce à l'approximation de Bredt [107, 108]. Une propriété du champ des contraintes tangentielles $\vec{\tau} = T_{12}\vec{x}_2 + T_{13}\vec{x}_3$ stipule que, dans le cas étudié et sur un contour fermé Ω^* de normale extérieure \vec{n}^* , situé à l'intérieur d'une section droite A de la poutre on a :

$$\int_{\Omega^*} \vec{\tau} \otimes \vec{n}^* dl = -\frac{F_{t3}}{I_2} B_{(A^*, \vec{x}_2)} \quad (2.22)$$

avec $B_{(A^*, \vec{x}_2)} = \int_{A^*} x_3 dA^*$ le moment statique par rapport à \vec{x}_2 de la surface A^* s'appuyant sur Ω^* .

T_{12} et T_{13} sont déterminées de la manière suivante (voir figure 2.6) : on définit le segment BB' parallèle à l'axe x_2 et séparant A en deux parties. On appelle A' la section sous BB' et h' la longueur de BB' (dépendant de x_3). Soit Ω' le contour de A' de normale extérieure \vec{n}' .

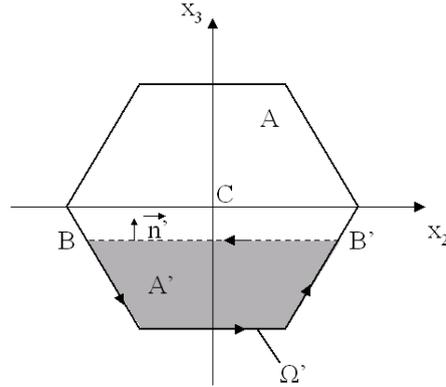


FIGURE 2.6 – Choix du contour Ω' sur lequel est calculé $\vec{\tau}$.

Partant de (2.22) et en notant que sur le contour extérieur de la section droite A de la poutre $\vec{\tau} \otimes \vec{n} = 0$ (voir Annexe B), on obtient :

$$\int_{\Omega'} \vec{\tau} \otimes \vec{n}' dl = \int_{BB'} \vec{\tau} \otimes \vec{x}_3 dl \quad (2.23)$$

L'approximation de Bredt consiste à faire sur $\vec{\tau}$ la double hypothèse simplificatrice suivante : sur BB' , $\vec{\tau}$ est orienté selon \vec{x}_3 et réparti de manière uniforme ($\vec{\tau}$ ne dépend pas de x_2). Appliquée à (2.23), on obtient :

$$\int_{BB'} \vec{\tau} \otimes \vec{x}_3 dl = T_{13} h' \quad (2.24)$$

2.2. DÉTERMINATION DU TENSEUR DES CONTRAINTES

Aoit finalement, d'après (2.22) :

$$T_{13} = -\frac{F_{t_3}}{I_2} \frac{B_{(A^*, \vec{x}_2)}}{h'} \quad (2.25)$$

La seconde hypothèse stipule que T_{12} et T_{13} dépendent uniquement de F_{t_2} et F_{t_3} respectivement. Ainsi, comme $F_{t_2} = 0$ on a $T_{12} = 0$.

On a donc complètement défini \mathbf{T} :

$$\begin{aligned} T_{11} &= \frac{F(L-x_1)}{I_2} x_3 \\ T_{12} &= 0 \\ T_{13} &= \frac{F}{I_2} \frac{-2\sqrt{3}/9|x_3^3|+a|x_3^2|-1/2a^3}{2(a-\sqrt{3}/3|x_3|)} \end{aligned} \quad (2.26)$$

Sur la figure 2.7, on représente les contraintes T_{11} et T_{13} apparaissant dans un NF de longueur $L = 1 \mu\text{m}$ et de côté $a = 50 \text{ nm}$ fléchi par une force $F = 0.04 \mu\text{N}$. La flèche maximale atteinte à l'extrémité libre est $\delta_{max} = \frac{FL^3}{3YI_2} = 27.8 \text{ nm}$.

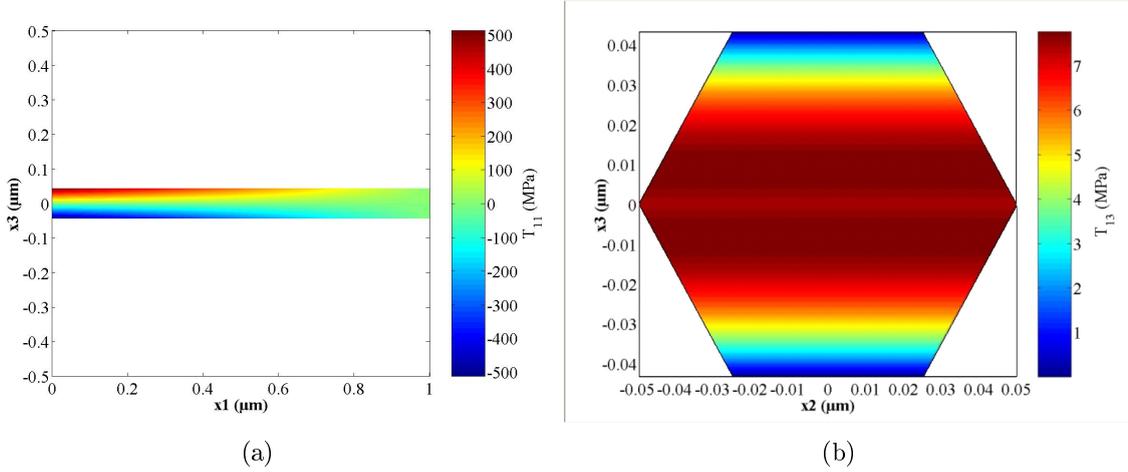


FIGURE 2.7 – a) Contrainte longitudinale T_{11} et b) contrainte tangentielle T_{13} apparaissant dans un NF de longueur $L = 1 \mu\text{m}$ et de rayon $a = 50 \text{ nm}$ fléchi par une force de $0.04 \mu\text{N}$.

On peut remarquer que la répartition de T_{11} est antisymétrique : la partie du NF située au dessus de la ligne moyenne est en extension, la partie inférieure est en compression. Cela a une conséquence directe sur la répartition du potentiel électrostatique (voir § 2.3). Comme le laisse supposer la répartition des efforts intérieurs, la section critique se situe au niveau de l'encastrement où T_{11} est maximale. Cependant, \mathbf{T} n'est valide que loin des sections chargées, et la valeur de T_{11} calculée à l'encastrement est inférieure à la valeur réelle de la contrainte.

2.2. DÉTERMINATION DU TENSEUR DES CONTRAINTES

Concernant les contraintes de cisaillement, l'approximation de Bredt entraîne $T_{12} = 0$ et $T_{13} = f(x_3)$. La pertinence de la solution analytique ainsi que le domaine de validité du modèle sont étudiés dans la partie suivante.

2.2.3 Domaine de validité du modèle

La formulation analytique de \mathbf{T} repose sur quatre hypothèses simplificatrices, à savoir :

- \mathbf{T} est déterminé à l'aide du principe de Saint-Venant.
- On considère un matériau isotrope équivalent.
- L'effet piézoélectrique indirect n'est pas pris en compte.
- T_{13} est calculé analytiquement grâce à l'approximation de Bredt.

Pour valider ces différents points, un modèle de NF basé sur la méthode des éléments finis a été développé à l'aide d'Ansys[®]. Ce modèle permet de changer aisément les propriétés mécaniques et piézoélectriques. De plus, le calcul des tenseurs \mathbf{S} , \mathbf{T} , \mathbf{E} et \mathbf{D} tient compte des effets de bords. On compare les contraintes calculées dans le cadre du modèle semi-analytique à quatre résultats de simulations obtenus grâce au modèle éléments finis. Les spécificités des différentes approches sont résumées dans le tableau 2.1.

Nom	Structure cristalline	Propriétés piézo-électriques	Propriétés semi-conductrices	Méthode de résolution
SA	Isotrope	Effet piézoélectrique direct	Oui	semi-analytique
PAI	Isotrope	Non	Non	éléments finis
PAA	$6mm$	Non	Non	éléments finis
PZI	Isotrope	Oui	Non	éléments finis
PZA	$6mm$	Oui	Non	éléments finis

TABLE 2.1 – Caractéristiques des différents simulations.

Les modèles semi-analytique et éléments finis sont développés dans le cadre des petites déformations. Cette hypothèse est valable si le rayon de courbure maximal de la poutre fléchie $\alpha_{max} = \frac{YI_2}{FL}$ vérifie $\alpha \geq 10L$ [109]. Pour une géométrie donnée, on détermine l'amplitude maximale de la force imposée : $F_{max} = \frac{YI_2}{10L^2}$. De même, connaissant la force imposée et la longueur L , le rayon minimal du NF est $a_{min} = \sqrt[4]{\frac{32FL^2}{\sqrt{3}Y}}$. Dans les simulations, on modélise un NF de dimensions $L = 1 \mu\text{m}$ et $a = 50 \text{ nm}$. L'amplitude maximale de la force respectant l'hypothèse des petites

2.2. DÉTERMINATION DU TENSEUR DES CONTRAINTES

déformations est alors $F = 0.048 \mu\text{N}$.

On définit la ligne \mathcal{L}_1 d'équation $x_2 = 0$ contenue dans le plan $(\vec{x}_1, \vec{x}_2, x_3 = 0.9\frac{\sqrt{3}}{2}a)$ et la ligne \mathcal{L}_2 d'équation $x_2 = 0$ de la section du NF située à mi-hauteur ($x_1 = \frac{L}{2}$) sur lesquelles on calcule la répartition des contraintes T_{11} et T_{13} obtenus pour les différentes simulations (voir en figure 2.8). \mathcal{L}_1 est située à l'intérieur du NF car sur la surface latérale les contraintes tangentielles sont supposées nulles. Afin de déterminer le domaine de validité de manière objective, on choisit \mathcal{L}_2 de manière à ce que la contrainte T_{13} obtenue par le modèle éléments finis passe par sa valeur maximale.

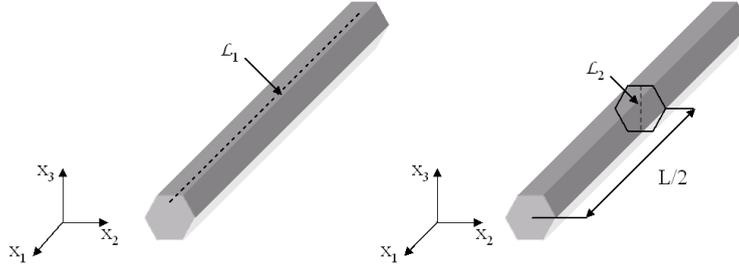


FIGURE 2.8 – Définition des lignes \mathcal{L}_1 et \mathcal{L}_2 .

Dans un premier temps on détermine le domaine de validité de l'hypothèse de Saint-Venant. En pratique, la forme du tenseur des contraintes est valide pour des zones situées à une distance de 2 à 3 diamètres des points d'application des charges. La figure 2.9 représente T_{11} et T_{13} le long de \mathcal{L}_1 dans le cas du modèle semi-analytique SA et dans le cas PZA, choisi comme résultat de référence (celui-ci tient compte des effets de bord, de l'anisotropie du ZnO et de l'effet piézoélectrique indirect).

Les conditions limites mécaniques perturbent effectivement \mathbf{T} , cependant on voit que l'erreur relative sur T_{11} est inférieure à 5% pour $0.03 < x_1 < 0.89 \mu\text{m}$. L'erreur relative sur T_{13} est quant à elle inférieure à 5% pour $0.18 < x_1 < 0.9 \mu\text{m}$. Dans le cas étudié, le principe de Saint-Venant est bien valable lorsqu'on se situe à 2 diamètres des points d'application des charges.

On cherche ensuite à valider les hypothèses faites sur le matériau (élasticité isotrope, effet piézoélectrique indirect négligé). On compare les valeurs de T_{11} et T_{13} le long de \mathcal{L}_2 obtenues pour les cinq simulations présentées dans le tableau 2.1 (voir figure 2.10). Pour informations, on compare les valeurs maximales de T_{12} obtenues grâce au modèle éléments finis dans la section à mi-hauteur du NF. En

2.2. DÉTERMINATION DU TENSEUR DES CONTRAINTES

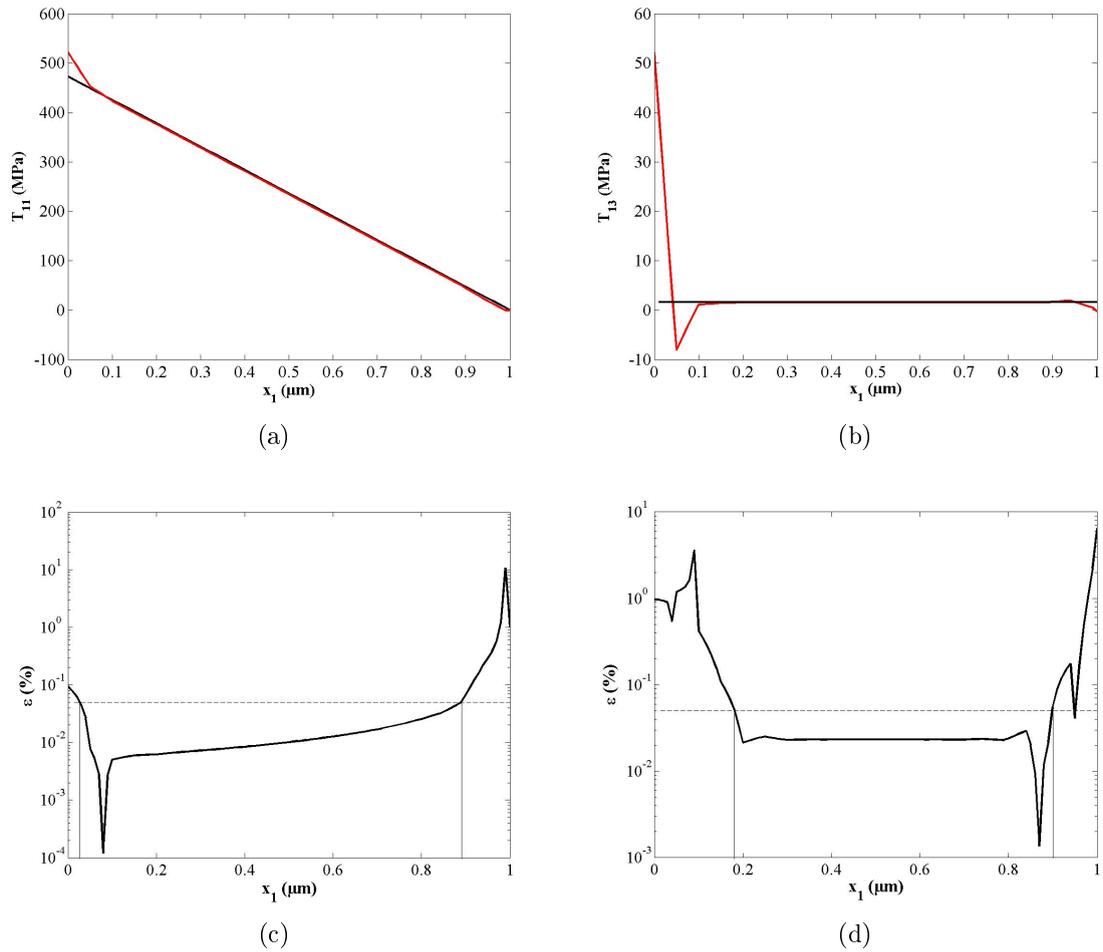


FIGURE 2.9 – Répartition de a) T_{11} et b) T_{13} le long de \mathcal{L}_1 obtenue par le modèle SA (courbe noire) et PZA (courbe rouge) et erreur relative sur c) T_{11} et d) T_{13}

2.2. DÉTERMINATION DU TENSEUR DES CONTRAINTES

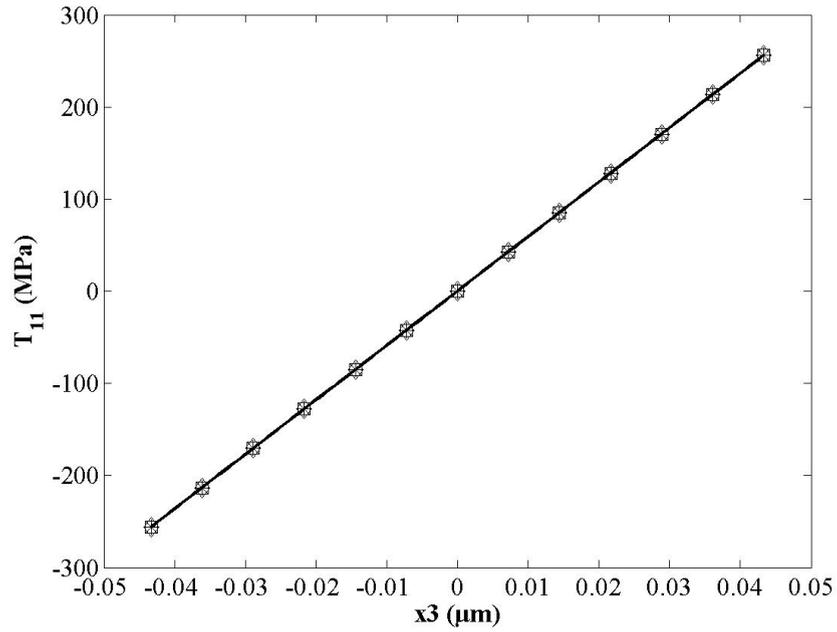
définissant PZA comme référence, on calcule l'erreur quadratique moyenne sur les contraintes pour les différents degrés d'approximations. Les résultats sont résumés dans le tableau 2.2.

ε (%)	PZI	PAA	PAI	SA
T_{11}	0.0003	0.007	0.007	0.003
T_{12}	4.2	0.7	3.6	non défini
T_{13}	1	4	5.8	10.2

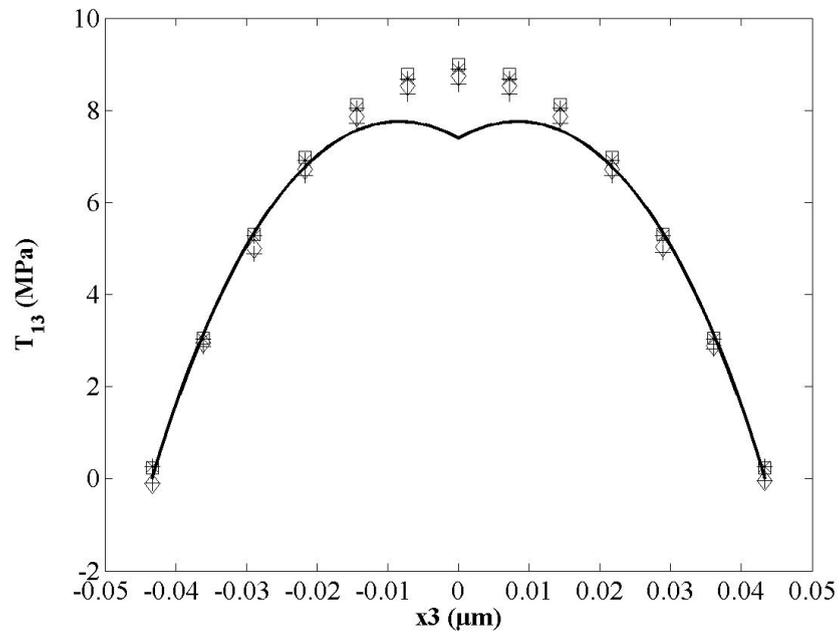
TABLE 2.2 – Erreurs quadratiques moyennes engendrées par les différents degrés d'approximation.

L'erreur sur T_{11} est inférieure à 1%, donc les hypothèses simplificatrices faites sur le matériau et sur \mathbf{T} n'ont pratiquement aucun impact sur T_{11} . Le fait de négliger notamment l'effet piézoélectrique indirect n'a pas de répercussion sur T_{11} . Ceci s'explique par le fait que dans la configuration étudiée, la polarisation \vec{P} est essentiellement orientée suivant \vec{x}_3 . Comme le coefficient piézoélectrique e_{13} est nul, on n'a pas de couplage entre T_{11} et E_3 . Le fait de considérer le matériau comme isotrope a aussi peu d'impact sur T_{11} , car le ZnO a une anisotropie peu prononcée dans le plan transverse ($c_{11} \approx c_{33}$ et $c_{12} \approx c_{13}$). Concernant les contraintes tangentielles, le fait de considérer le matériau isotrope et de négliger l'effet piézoélectrique indirect induit une erreur de 3.6% sur T_{12} et de 5.8% sur T_{13} . Dans le modèle semi-analytique, l'erreur faite sur T_{13} atteint 10.2%. De plus T_{12} est nulle, or les simulations éléments finis montrent que $\frac{T_{12max}}{T_{13max}} \approx 0.5$. Des résultats de simulations présentés en annexe B montrent que l'amplitude maximale du potentiel électrostatique ϕ sera sous-estimé par le modèle semi-analytique (les différents degrés d'approximations engendrent une erreur relative de l'ordre de 30% sur ϕ). Cependant, le but de ce modèle est d'étudier le couplage entre les propriétés piézoélectriques et semiconductrices des NFs de ZnO. Grâce à l'approximation de Bredt, on obtient une solution analytique de \mathbf{T} . Cela nous permet d'établir l'équation de Poisson régissant ϕ et de séparer les charges créées par effet piézoélectrique des charges libres dans le terme source de l'équation. Cela facilite la compréhension des mécanismes de la conversion électromécanique et permet d'exploiter au mieux les résultats du modèle, comme décrit dans la suite du chapitre.

2.2. DÉTERMINATION DU TENSEUR DES CONTRAINTES



(a)



(b)

FIGURE 2.10 – Répartitions de a) T_{11} et b) T_{13} le long de \mathcal{L}_2 obtenues pour SA (courbe noire), PAI (+), PAA (\diamond), PZI (*) et PZA (\square).

2.3 Etablissement du potentiel électrostatique

L'aspect mécanique du problème étant résolu, on aborde à présent la partie électrique. La présence d'une charge électrique libre due aux propriétés semiconductrices du ZnO et d'une charge piézoélectrique provenant de la déformation du NF entraîne l'établissement du potentiel électrostatique ϕ . Partant des équations (2.4) et (2.5), on reformule l'équation de Gauss comme suit :

$$\epsilon \nabla \cdot (\mathbf{E}) = \rho_L - \nabla \cdot (e\mathbf{S}) \quad (2.27)$$

Le second terme du membre de droite de (2.27) est homogène à une densité de charge et dérive du tenseur des déformations \mathbf{S} . C'est la densité de charge ρ_P induite par les propriétés piézoélectriques du ZnO. En utilisant l'équation de Maxwell-Faraday ($\mathbf{E} = -\nabla(\phi)$), on obtient finalement l'équation de Poisson régissant ϕ :

$$\epsilon \nabla^2(\phi) = \rho_P - \rho_L \quad (2.28)$$

Avant de résoudre (2.28), on explicite chaque élément du terme source, à savoir ρ_P et ρ_L .

2.3.1 Densité de charge piézoélectrique

La densité de charge piézoélectrique dérive directement du tenseur des déformations \mathbf{S} . Les équations (2.5) et (2.26) permettent de déterminer analytiquement ρ_P :

$$\begin{aligned} \rho_P &= -\nabla \cdot (e\mathbf{S}) = -\nabla \cdot (ec^{-1}\mathbf{T}) \\ &= -\frac{F}{YI_2} \left[e_{15}(1 + \nu) \frac{\frac{2}{9}x_3^3 - \frac{4\sqrt{3}}{3}a \frac{|x_3^3|}{x_3} + 4a^2x_3 - \frac{\sqrt{3}}{3}a^3 \frac{|x_3|}{x_3}}{4(a - \frac{\sqrt{3}}{3}|x_3|)^2} - (e_{33} - 2\nu e_{31})x_3 \right] \end{aligned} \quad (2.29)$$

ρ_P est représentée en figure 2.11 pour un NF de dimensions $L = 1 \mu\text{m}$ et $a = 50 \text{ nm}$ fléchi par une force $F = 0.04 \mu\text{N}$.

L'hypothèse de Saint-Venant faite sur la forme de \mathbf{T} entraîne que ρ_P est indépendante de x_1 . Dans une section du NF, ρ_P varie uniquement avec x_3 . Ceci est une conséquence de l'approximation de Bredt utilisée pour le calcul de \mathbf{T} . Une autre

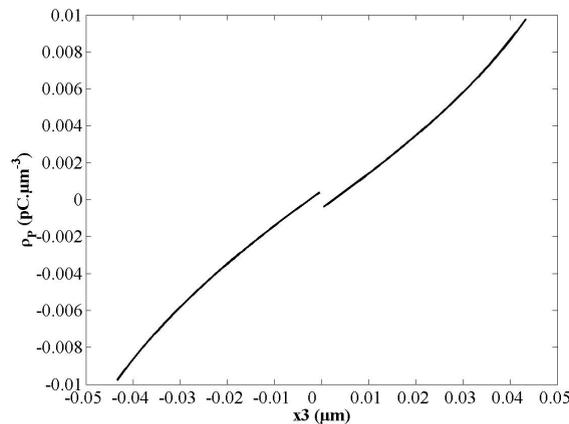


FIGURE 2.11 – Densité de charge piézoélectrique ρ_P dans une section d'un NF.

conséquence de l'approximation de Bredt sur ρ_P est l'apparition d'une discontinuité en $x_3 = 0$ qui vient de l'existence d'un point d'inflexion dans la répartition de T_{13} (voir figure 2.10).

2.3.2 Densité de charge libre

Il existe *a priori* une densité de charge libre ρ_L puisque le ZnO est un matériau semiconducteur du groupe II-VI. De plus, les défauts de la maille cristalline du ZnO agissent comme des impuretés et dopent le matériau. Au chapitre précédent, on a vu que les principaux donneurs « natifs » du ZnO sont les atomes de Zinc interstitiels Zn_i donnant des niveaux légers ainsi que les absences d'atomes d'Oxygène V_O qui donnent des niveaux profonds. Les absences de Zinc V_{Zn} introduisent des niveaux accepteurs profonds [110]. Généralement, les niveaux profonds s'ionisent difficilement et la grande majorité des porteurs de charge libres provient des niveaux légers. Les niveaux profonds ont cependant principalement deux effets :

- les niveaux profonds accepteurs jouent un rôle de compensation (une partie des électrons des niveaux donneurs légers se recombinaient sur les niveaux accepteurs) ce qui diminue le taux de dopage apparent.
- les niveaux profonds se trouvant dans la région centrale de la bande interdite (BI) agissent comme des centres de recombinaison de porteurs de charge dans les dispositifs à jonctions tels que les diodes et transistors [111].

Afin de simplifier le modèle, on considère un seul niveau donneur dû aux impuretés de type Zn_i . On ne prend donc pas en compte d'éventuels effets de compensation. La figure 2.12 représente le diagramme de bandes du ZnO à l'équilibre thermody-

2.3. ETABLISSEMENT DU POTENTIEL ÉLECTROSTATIQUE

namique et isolé de toute perturbation extérieure autre que l'agitation thermique. Il possède un niveau donneur dont le niveau d'énergie E_{d0} est proche du bas de la bande de conduction E_{C0} . C'est un niveau léger dont l'énergie d'activation est $E_{d0} = 30$ meV [16]. Ainsi, à température ambiante, pratiquement tout le niveau est ionisé et des porteurs de charge libres apparaissent dans la bande de conduction (BC). Sur le niveau donneur, il apparaît des impuretés ionisées qui sont des porteurs de charge fixes.

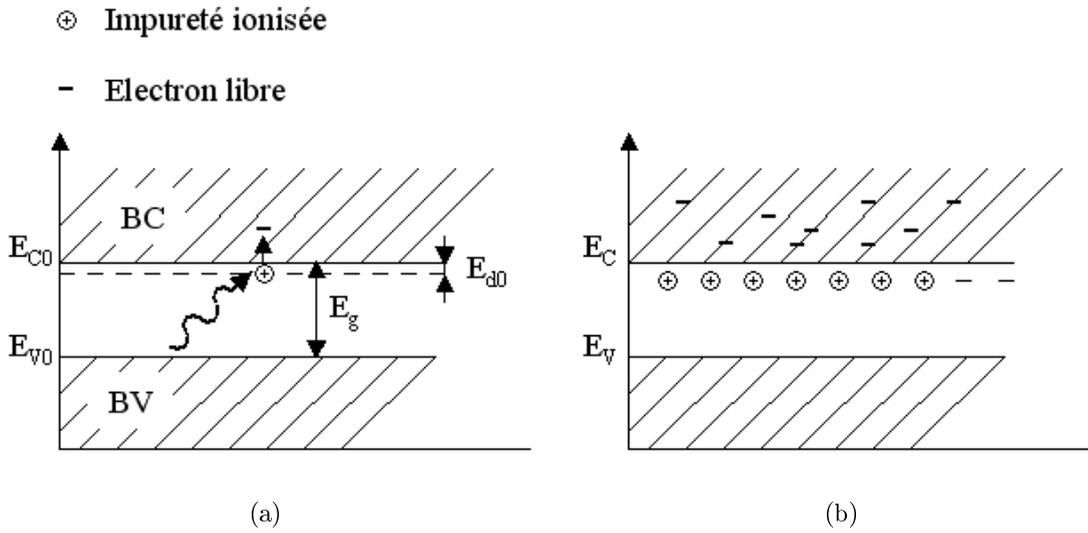


FIGURE 2.12 – Diagramme de bandes du ZnO à un niveau donneur a) faiblement ionisé et b) fortement ionisé.

En notant n et N_{d^+} les concentrations en électrons libres dans la BC et en impuretés ionisées dans la BI respectivement, la densité de charge libre dans le NF s'écrit :

$$\rho_L = q(n - N_{d^+}) \quad (2.30)$$

où q est la charge électrique élémentaire. A l'équilibre thermodynamique, la répartition des porteurs de charge par niveau d'énergie est déterminée par la relation statistique de Fermi-Dirac :

$$n = \int_E N_c(E) f_n(E) dE = N_c \exp\left(\frac{E_F - E_C}{k\Theta}\right) \quad (2.31)$$

$$N_d^+ = N_d(1 - f_n(E_d)) = \frac{N_d}{1 + \exp\left(\frac{E_F - E_d}{k\Theta}\right)} \quad (2.32)$$

2.3. ETABLISSEMENT DU POTENTIEL ÉLECTROSTATIQUE

avec E_C le bas de la BC (en présence de possibles perturbations extérieures), k la constante de Boltzmann, Θ la température et N_d la concentration en impuretés. Dans (2.31), $N_c = 2\left(\frac{2\pi m_e k \Theta}{h^2}\right)^{\frac{3}{2}}$ représente la densité effective d'états de la BC où h est la constante de Planck et m_e la masse effective de l'électron. N_c indique le nombre de places disponibles pour les électrons libres dans la BC. $f_n(E) = \frac{1}{1+\exp\left(\frac{E-E_F}{k\Theta}\right)}$ est la probabilité d'occupation d'un niveau d'énergie E où E_F est le niveau de Fermi. C'est un niveau énergétique de référence qui marque la frontière entre les niveaux d'énergie occupés et les niveaux d'énergie vides [25, 111]. Il est déterminé en calculant l'intégrale de Fermi. Il n'existe pas de solution analytique à l'intégrale de Fermi ; cependant, de nombreuses approximations numériques permettent de trouver une solution approchée. En utilisant une approximation de Joyce-Dixon [112], on détermine E_F :

$$\eta_F = \ln(r) + \frac{1}{\sqrt{8}}r - 4.951 \times 10^{-3}r^2 + 1.484 \times 10^{-4}r^3 - 4.426 \times 10^{-6}r^4 + o(r^5) \quad (2.33)$$

avec $\eta_F = \frac{E_F - E_C}{k\Theta}$ encore appelé critère de dégénérescence et $r = \frac{n}{N_c}$ la concentration en électrons libres réduite. Cette approximation est valable pour $\eta_F \leq 7$. Dans nos simulations, on trouve $\eta_{Fmax} = -0.94$ (en aucun cas $E_F > E_C$).

Ayant déterminé E_F , il reste à évaluer le niveau du bas de la BC noté E_C . A l'équilibre thermodynamique et en dehors de toutes perturbations extérieures, E_C est constant et choisi comme niveau de référence (on prend $E_{C0} = 0$ eV). Lorsque le NF est fléchi, le potentiel électrostatique ϕ créé par effet piézoélectrique a un effet sur les niveaux d'énergie de la BC. Suivant le signe de ϕ , le niveau du bas de la BC se déplace vers le bas ou vers le haut par un apport d'énergie $E_\phi = -q\phi$. De plus, \mathbf{T} interagit avec E_C par couplage électron-phonon : les actions mécaniques entraînent un déplacement des niveaux de la BC. Ceci est modélisé par l'introduction du potentiel de déformation $E_{\mathbf{T}} = a_c \frac{\Delta V}{V_0}$ [28] où $\frac{\Delta V}{V_0}$ est la contraction volumique du NF et $a_c = \frac{\partial E}{\partial \ln(V)}$ est la constante de potentiel de déformation. Concernant la contraction volumique, on a pour un matériau isotrope : $\frac{\Delta V}{V_0} = \frac{1-2\nu}{Y} Tr(\mathbf{T})$. Finalement, le niveau du bas de la BC et le niveau donneur s'écrivent, lorsque le NF est fléchi :

$$E_C = E_{C0} + E_\phi + E_{\mathbf{T}} = -q\phi + \frac{1-2\nu}{Y} \frac{F(L-x_1)}{I_2} x_3 \quad (2.34)$$

$$E_d = E_C - E_{d0} \quad (2.35)$$

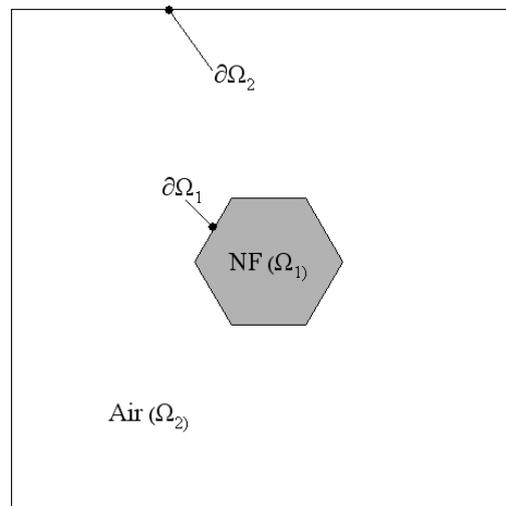


FIGURE 2.13 – Géométrie du domaine de résolution du problème éléments finis.

Ces deux équations sont fondamentales puisqu'elles expriment les couplages entre les propriétés mécaniques, piézoélectriques et semiconductrices.

On a ainsi complètement défini le terme source de l'équation du potentiel (2.28). N_d^+ et n dépendant de ϕ , (2.28) est une équation elliptique non-linéaire de la forme $\nabla^2 \phi = g(\phi)$.

2.3.3 Résolution de l'équation du potentiel

ϕ est calculé dans une section du NF grâce à la méthode des éléments finis à l'aide du logiciel Comsol[®]. La géométrie du problème est définie sur la figure 2.13.

Afin d'assurer la convergence de la solution, le NF est placé dans un milieu diélectrique (air). Le problème est entièrement défini après avoir écrit les équations à résoudre dans chaque milieu ainsi que les conditions aux limites à appliquer sur les frontières des domaines. On appelle Ω_1 le NF et Ω_2 le milieu diélectrique ; leurs frontières sont dénomées respectivement $\partial\Omega_1$ et $\partial\Omega_2$. Dans le domaine Ω_2 , la densité de charge est supposée nulle. ϕ décroît jusqu'à s'annuler lorsqu'on se place suffisamment loin du NF. Ainsi, on impose des conditions aux limites de Dirichlet sur $\partial\Omega_2$. A l'interface entre Ω_1 et Ω_2 , il y a continuité du champ électrique \mathbf{E} et de ϕ . Ceci est modélisé en imposant des conditions aux limites de Neumann sur $\partial\Omega_1$. Nous n'avons pas pris en compte l'existence de charges sur les surfaces latérales du NF qui peuvent provenir de défauts structurels ; concernant les surfaces polaires, la section à l'encastrement est reliée électriquement à la masse et on place une électrode flottante

2.3. ETABLISSEMENT DU POTENTIEL ÉLECTROSTATIQUE

en $x_1 = L$). Les équations du problème sont résumées dans le tableau suivant :

Domaine	Equation
Ω_1	$\nabla^2 \phi = g(\phi)$
Ω_2	$\nabla^2 \phi = 0$
$\partial\Omega_1$	$\vec{n} \cdot \nabla(\phi) = 0$
$\partial\Omega_2$	$\phi = 0$

TABLE 2.3 – Equations du problème éléments finis

Les principaux résultats du modèle sont présentés et discutés dans le paragraphe suivant.

2.4 Etude des paramètres influençant la répartition du potentiel électrostatique

Les calculs ont été effectués pour un NF de longueur $L = 1 \mu\text{m}$ et de rayon $a = 50 \text{ nm}$ fléchi par une force ponctuelle d'amplitude $F = 0.04 \mu\text{N}$. Les dimensions sont choisies afin de coïncider avec celles des NF obtenus par les procédés de fabrication « bottom-up ». La valeur de la force appliquée est déterminée de façon à satisfaire le critère de non-linéarité présenté au § 2.2.3. Les amplitudes de forces utilisées au cours de ce chapitre sont par ailleurs du même ordre de grandeur que les valeurs trouvées dans la littérature concernant les forces appliquées à l'aide de pointes AFM sur des NFs de ZnO [84]. Les constantes élastiques et piézoélectriques du ZnO sont tirées de [34]. Le potentiel de déformation $a_c = -6.05 \text{ eV}$ relie la variation des niveaux d'énergie du NF aux contraintes mécaniques. Sa valeur est tirée de mesures de photoluminescence de NF de ZnO placés en atmosphère pressurisée [113]. La masse effective de l'électron dans un cristal de ZnO est $m_e = 0.21m_0$ [114]. Pour rappel, la masse de l'électron dans le vide est $m_0 = 9.109 \times 10^{-31} \text{ kg}$. Les paramètres influençant la répartition du potentiel sont répartis en trois catégories : les propriétés du matériau, les dimensions du NF et les paramètres extérieurs.

2.4.1 Propriétés du matériau

On étudie l'effet de la charge électrique libre sur le potentiel électrostatique. Les porteurs de charge libres proviennent de la présence d'impuretés. Pour les simulations, la température est fixée à $\Theta = 300 \text{ K}$. La figure 2.14-a représente le cas d'un NF de ZnO quasi-pur ($N_d = 10^{10} \text{ cm}^{-3}$). ϕ est réparti de manière symétrique par rapport à \vec{x}_3 et antisymétrique par rapport à \vec{x}_2 . La partie du NF en extension présente un potentiel positif qui atteint un maximum $\phi^+ = 0.055 \text{ V}$. Dans la partie du NF en compression, le potentiel est de signe opposé et atteint $\phi^- = -0.055 \text{ V}$. D'une manière générale, lorsque le taux de dopage est faible, on a $\rho_L \ll \rho_P$. On peut donc négliger la contribution de la charge libre à l'établissement de ϕ . Sur la figure 2.14-b, le NF est modérément dopé ($N_d = 10^{16} \text{ cm}^{-3}$). ϕ diminue et chute à une valeur de $\phi^+ = 0.030 \text{ V}$ dans la partie du NF en extension. La partie négative du potentiel est préservée et atteint $\phi^- = -0.049 \text{ V}$.

2.4. ETUDE DES PARAMÈTRES INFLUENÇANT LA RÉPARTITION DU POTENTIEL ÉLECTROSTATIQUE

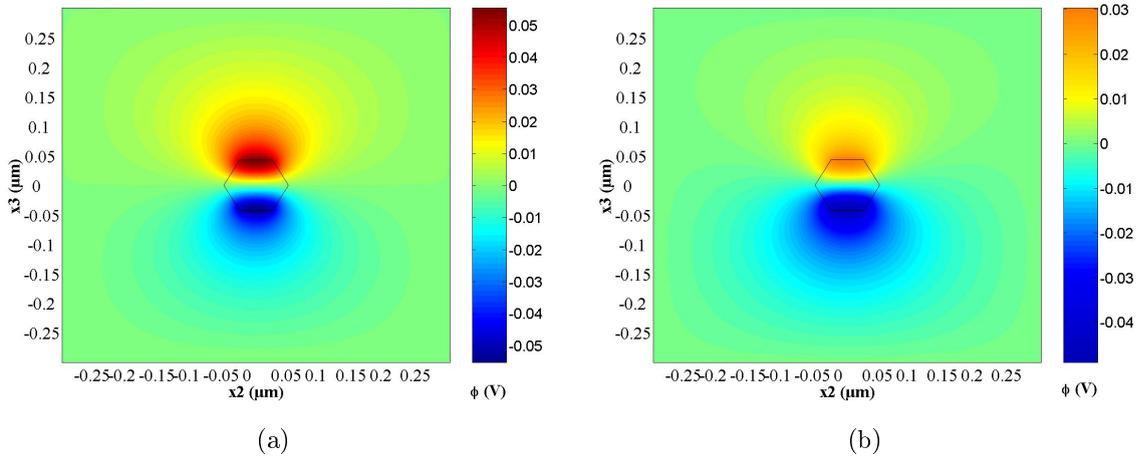


FIGURE 2.14 – Potentiel électrostatique ϕ calculé dans la section à mi-hauteur d'un NF a) légèrement dopé ($N_d = 10^{10} \text{ cm}^{-3}$) et b) modérément dopé ($N_d = 10^{16} \text{ cm}^{-3}$).

La diminution de ϕ est due au phénomène de masquage de la charge piézoélectrique par les charges libres. Lorsque le NF est fléchi, une charge de densité ρ_P est créée par effet piézoélectrique. Cette charge est positive dans la partie du NF en extension et entraîne l'apparition d'un potentiel positif. D'après (2.34), ceci entraîne un abaissement de la bande de conduction du ZnO et une diminution des niveaux d'énergie. A contrario, un potentiel négatif s'établit dans la partie du NF en compression et remonte les niveaux de la BC. Les électrons libres situés dans la BC occupent en priorité les niveaux d'énergie les plus bas [115], ils vont s'accumuler dans la partie du NF en extension où le potentiel est positif et masquer ρ_P . Dans la partie du NF en compression (où ϕ est négatif), une zone de déplétion en électrons libres se forme et on a $n \ll \rho_P/q$ et $n \ll N_d^+$. Ce phénomène est représenté sur la figure 2.15.

La densité de charge totale est, d'après (2.28) et (2.30), $\rho_T = \rho_P + qn - qN_d^+$. Dans la zone de déplétion, la contribution de qn est négligeable par rapport aux deux autres termes. Pratiquement toutes les impuretés ont été ionisées du fait de leur faible niveau d'activation E_d . De plus les charges créées par N_d^+ sont localisées sur E_d et par conséquent ne sont pas libres de se déplacer. De ce fait, N_d^+ est quasiment homogène dans le NF avec $N_d^+ \approx N_d$. D'après (2.29), la densité de charge nette créée par N_d^+ est $qN_d^+ \approx qN_d = 0.0016 \text{ pC} \cdot \mu\text{m}^{-3}$. La densité de charge piézoélectrique maximale est, $\rho_{Pmax} = 0.01 \text{ pC} \cdot \mu\text{m}^{-3} > qN_d$. ρ_P est en partie masquée par la charge créée par N_d^+ .

2.4. ETUDE DES PARAMÈTRES INFLUENÇANT LA RÉPARTITION DU POTENTIEL ÉLECTROSTATIQUE

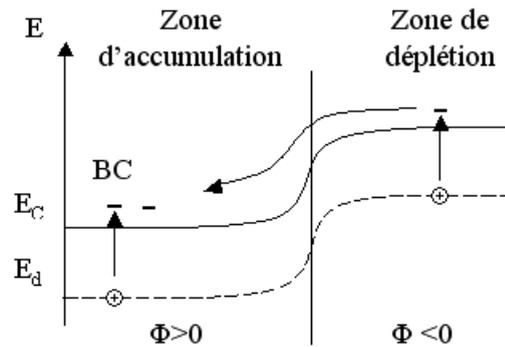


FIGURE 2.15 – Effet de ϕ sur les niveaux d'énergie de la BC et sur la répartition des porteurs de charge libres.

Les valeurs usuelles de concentration en impuretés varient de $N_d = 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ pour les cristaux de ZnO les plus purs et les films épais [16, 17] jusqu'à $N_d = 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ pour les cristaux, les films fins [15] et les NFs [18, 19] les plus dopés naturellement. La figure 2.16 représente la répartition de n , ρ_L , $\rho_T = \rho_P + \rho_L$ et ϕ en fonction du taux de dopage. Les grandeurs sont représentées le long de la ligne \mathcal{L}_2 définie précédemment (§ 2.2.3).

Sur la figure 2.16-a, on voit apparaître la zone de déplétion en électrons du côté des $x_3 < 0$ (partie du NF en extension) ainsi que la zone d'accumulation du côté des $x_3 > 0$ (partie du NF en compression). La frontière entre ces deux zones est bien marquée pour des taux de dopage légers à modérés (de $N_d = 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ à $N_d = 10^{16} \text{ cm}^{-3}$). Pour des valeurs plus élevées ($N_d \geq 5 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$), la différence de concentration entre les deux zones s'estompe. Ceci a une conséquence directe sur la répartition de ρ_L (figure 2.16-b). Pour des taux de dopage légers à modérés, la densité de charge libre apparaissant dans la partie du NF en compression est essentiellement due aux impuretés ionisées ($N_{d+} > n$). Comme pratiquement tout E_d est activé et que les charges créées par les impuretés ionisées sont fixes, ρ_L est homogène. Si ρ_P est suffisamment élevée, cela assure la présence d'une densité de charge ρ_T (figure 2.16-c) et l'établissement de ϕ (figure 2.16-d). Dans la partie du NF en extension, $n > N_{d+}$ et $\rho_L < 0$ et de signe opposé à ρ_P . L'effet de masquage visible sur ρ_T et ϕ est de plus en plus prononcé à mesure que N_d augmente. Pour de forts taux de dopage, n reste élevée dans la zone de déplétion. La répartition de ρ_L est quasiment égale en amplitude (mais opposée en signe) à ρ_P . Au final, l'effet de masquage est présent dans les deux parties du NF. Ces résultats sont résumés en

2.4. ETUDE DES PARAMÈTRES INFLUENÇANT LA RÉPARTITION DU POTENTIEL ÉLECTROSTATIQUE

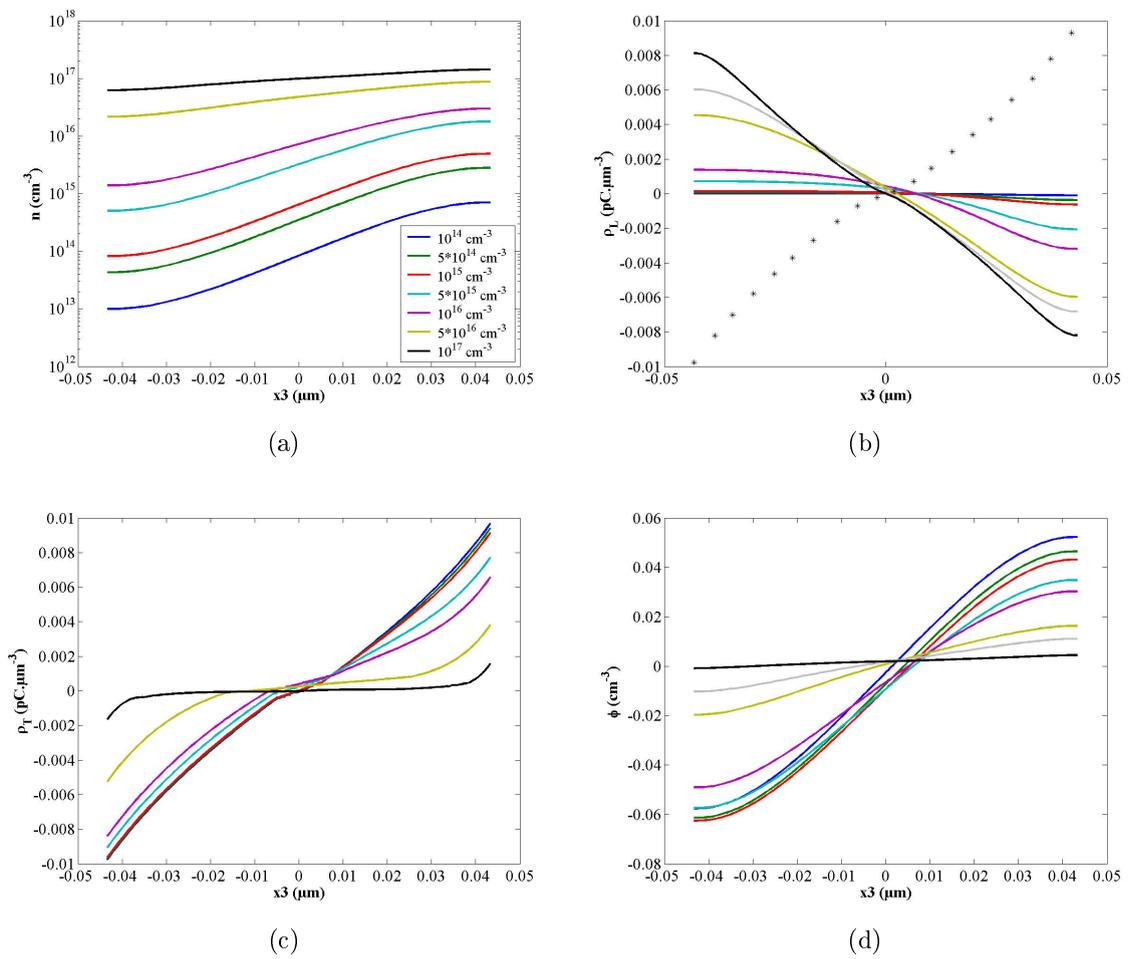


FIGURE 2.16 – Effet du taux de dopage N_d sur la répartition de a) n , b) ρ_L (pour rappel, ρ_P est figurée en pointillés), c) ρ_T et d) ϕ le long de \mathcal{L}_2 en fonction du taux de dopage N_d .

2.4. ETUDE DES PARAMÈTRES INFLUENÇANT LA RÉPARTITION DU POTENTIEL ÉLECTROSTATIQUE

figure 2.17 où est représenté l'effet du taux de dopage sur ϕ_{max}^- et ϕ_{max}^+ .

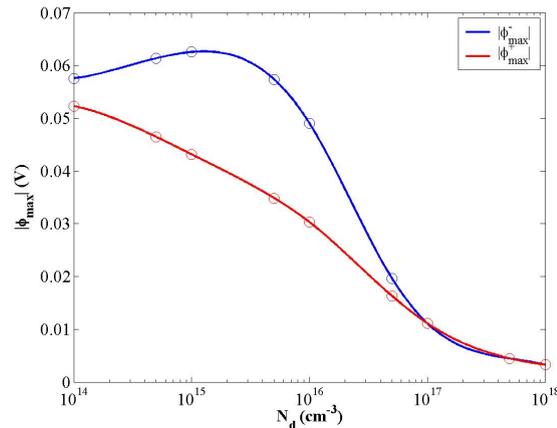


FIGURE 2.17 – Effet de N_d sur les valeurs extrêmes de ϕ .

Pour des NF hautement dopés ($N_d \geq 10^{17} \text{ cm}^{-3}$), on a toujours une zone d'accumulation en électrons du côté du NF où ϕ est positif qui entraîne un effet de masquage. Du côté où ϕ est négatif, le taux de dopage est si élevé que la densité de charge générée par les impuretés ionisées qN_d^+ est du même ordre que ρ_P . Dans ce cas le potentiel sera quasiment nul dans tout le NF. Lorsque le taux de dopage est faible ($N_d \leq 10^{15} \text{ cm}^{-3}$), le phénomène de masquage s'estompe et on se rapproche du cas théorique d'un NF de ZnO quasi-pur. Un résultat intéressant est l'existence d'un dopage optimal à $N_{d_{opt}} = 1.2 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ où la partie négative de ϕ est maximisée.

2.4.2 Dimensions des nanofils

Suivant le processus et les paramètres de croissance, les dimensions des NF varient. Ici, on étudie l'effet du facteur de forme f_f du NF sur le potentiel électrostatique. Fixons dans un premier temps la valeur du rayon du NF ($a = 50 \text{ nm}$) et faisons varier sa longueur. Tous les autres paramètres sont par ailleurs fixés ($F = 0.02 \mu\text{N}$ de façon à respecter l'hypothèse des petites déformations, $\Theta = 300 \text{ K}$ et $N_d = 10^{16} \text{ cm}^{-3}$). Les résultats de simulations ont révélé que L n'a quasiment aucune influence sur la répartition et l'amplitude maximale de ϕ , comme montré sur la figure 2.19-b à la fin de cette partie. Cela s'explique par le fait que d'après (2.29), ρ_P ne dépend ni de L ni de x_1 . Cependant, le niveau du bas de la bande de conduction E_C varie légèrement avec L , ainsi n , ρ_L , ρ_T et ϕ varient (dans de modestes proportions) selon L .

2.4. ETUDE DES PARAMÈTRES INFLUENÇANT LA RÉPARTITION DU POTENTIEL ÉLECTROSTATIQUE

A contrario, la valeur de a est un paramètre crucial pour la conversion électromécanique (voir figure 2.18). Lorsque a décroît et pour une force F fixée, la contrainte tangentielle T_{13} est plus élevée, ce qui induit une augmentation de ρ_P , ρ_T et donc de ϕ comme le montre la figure 2.18-c, 2.18-d et 2.18-e. De plus, il est intéressant d'étudier l'effet de a sur la répartition de n (figure 2.18-a). Pour les plus petites valeurs de rayon, l'amplitude de ϕ augmente, ce qui accentue la différence de concentration en électrons libres entre la zone de déplétion et la zone d'accumulation.

Finalement, plus que le facteur de forme f_f , c'est avant tout le rayon du NF qui a un impact sur la conversion électromécanique. Pour une même force appliquée, la contrainte tangentielle induite dans les NF de faibles rayons est plus élevée, entraînant une augmentation de ρ_T et ϕ . En figure 2.19 on représente les valeurs extrêmes de ϕ dans la partie du NF en extension (courbes rouges) et dans la partie en compression (courbes bleues) en fonction de a à L fixée et en fonction de L à a fixée.

2.4.3 Paramètres extérieurs

Dans cette partie, l'impact des paramètres extérieurs Θ et F est étudié. On observe l'effet de la température du milieu sur n , ρ_L , ρ_T et ϕ en figure 2.20 pour des températures variant de 150 à 500 K. A la différence des matériaux ferroélectriques, les matériaux piézoélectriques n'ont pas de température de Curie. Cependant, certains matériaux comme le Quartz ont une température limite de fonctionnement au-delà de laquelle ils perdent leur propriétés piézoélectriques. L'étude du comportement en température de monocristaux massifs de ZnO a montré que l'effet piézoélectrique est bien présent jusqu'à 800 K [116]. Concernant les résultats des simulations, seule n est affectée de manière significative par Θ dans la zone de déplétion (figure 2.20-a). En effet, lorsque Θ augmente, les électrons libres acquièrent de l'énergie par agitation thermique, ce qui a tendance à diminuer la différence de concentration entre les zones d'accumulation et de déplétion. En ce sens, n diminue légèrement dans la zone d'accumulation pour des températures élevées, une partie plus importante des électrons libres ayant acquis l'énergie nécessaire pour occuper les niveaux de la zone de déplétion. Comme N_d est homogène dans le NF, la tendance observée sur n se répercute sur ρ_L qui diminue légèrement tandis que Θ augmente (figure 2.20-b). Ainsi, ρ_T et ϕ seront plus élevées pour les températures les plus fortes.

Du fait de la présence d'une charge électrique libre, les valeurs extrêmes de

2.4. ETUDE DES PARAMÈTRES INFLUENÇANT LA RÉPARTITION DU POTENTIEL ÉLECTROSTATIQUE

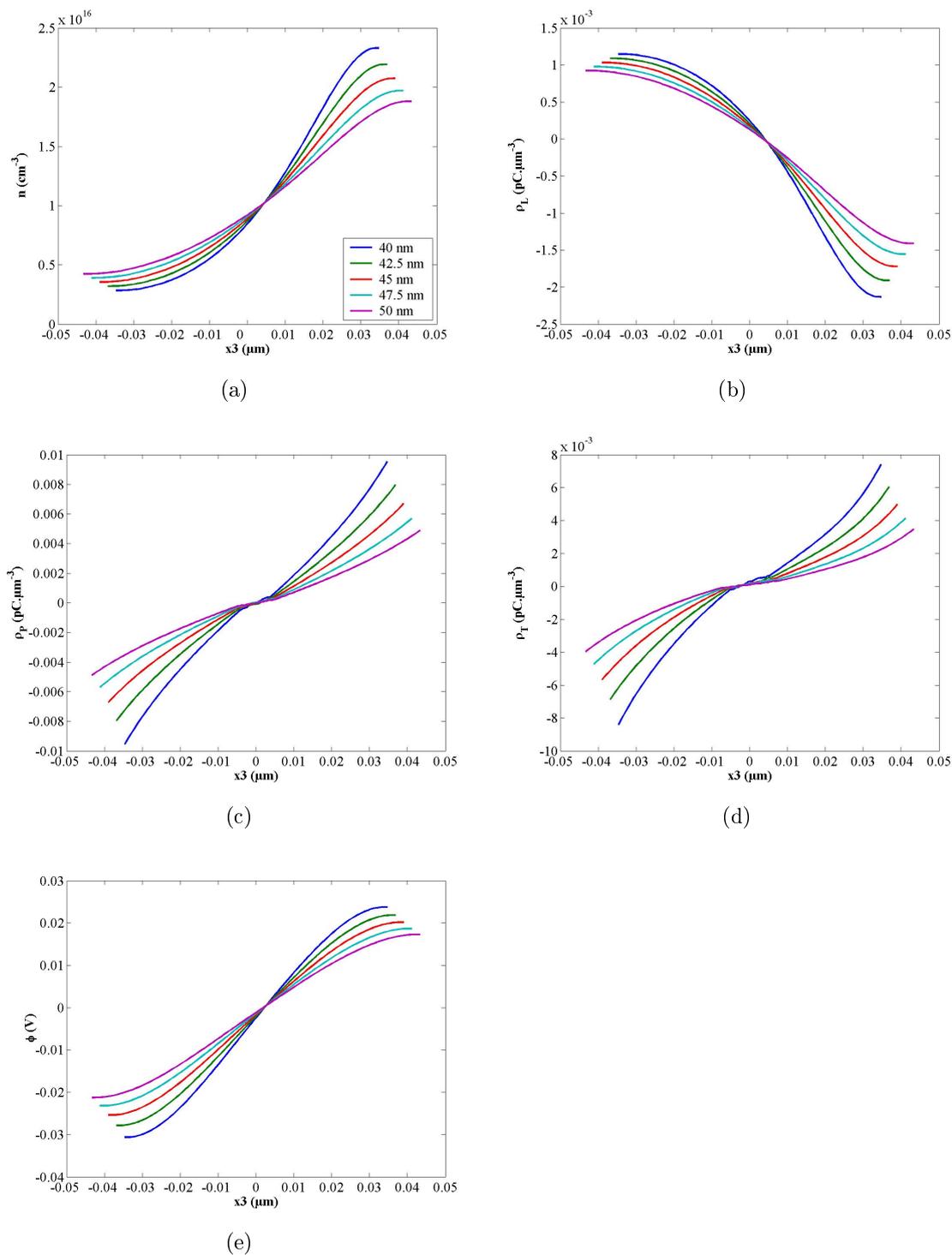


FIGURE 2.18 – Effet du rayon a sur la répartition de a) n , b) ρ_L , c) ρ_P , d) ρ_T et e) ϕ le long de \mathcal{L}_2 .

2.4. ETUDE DES PARAMÈTRES INFLUENÇANT LA RÉPARTITION DU POTENTIEL ÉLECTROSTATIQUE

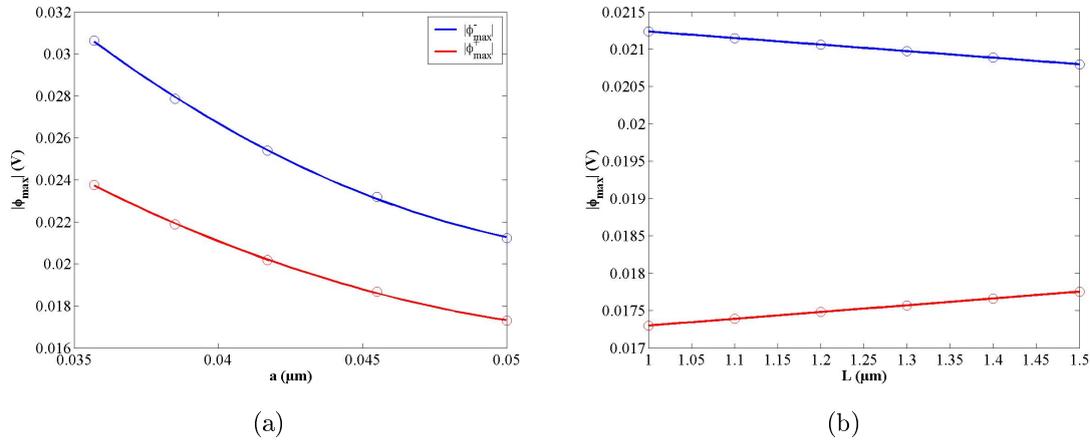


FIGURE 2.19 – Valeurs extrêmes de ϕ en fonction de a) a ($L = 1 \mu\text{m}$) et b) L ($a = 50 \text{ nm}$).

ϕ varie en fonction de Θ comme illustré en figure 2.21. Pour une même force appliquée de $0.02 \mu\text{N}$, si $|\phi_{max}^-|$ est relativement indépendant de Θ , $|\phi_{max}^+|$ varie de plus de 46% sur une plage de température allant de 150 à 500 K. Ce comportement doit être particulièrement pris en compte si on vise des applications de type capteur de force.

L'influence de la force est étudiée sur la figure 2.22. D'après (2.29), la densité de charge piézoélectrique ρ_P est proportionnelle à F , ce qui est mis en évidence sur la figure 2.22-c. De même, la densité de charge totale ρ_T ainsi que le potentiel ϕ augmentent avec la force (figure 2.22-d et e). Par couplage piézo-semiconducteur, l'augmentation de ϕ entraîne une remontée des niveaux d'énergie de la zone de déplétion ce qui diminue la concentration en électrons libres ; a contrario, les niveaux de la zone d'accumulation s'abaissent ce qui augmente n en $x_3 > 0$ (figure 2.22-a). Enfin, la figure 2.23 représente les valeurs extrêmes de ϕ en fonction de F . La transduction électromécanique est non-linéaire du fait de la présence de porteurs de charge libres.

2.4.4 Conclusion

Par rapport aux matériaux piézoélectriques classiques, les NF de ZnO ont un comportement non-linéaire provenant du couplage piézo-semiconducteur. Lorsqu'un NF est sollicité mécaniquement, l'établissement et la répartition du potentiel électrostatique ϕ sont affectés par le phénomène de masquage dû à la présence d'électrons libres dans la BC. Dans le cas du NF en flexion simple, les électrons

2.4. ETUDE DES PARAMÈTRES INFLUENÇANT LA RÉPARTITION DU POTENTIEL ÉLECTROSTATIQUE

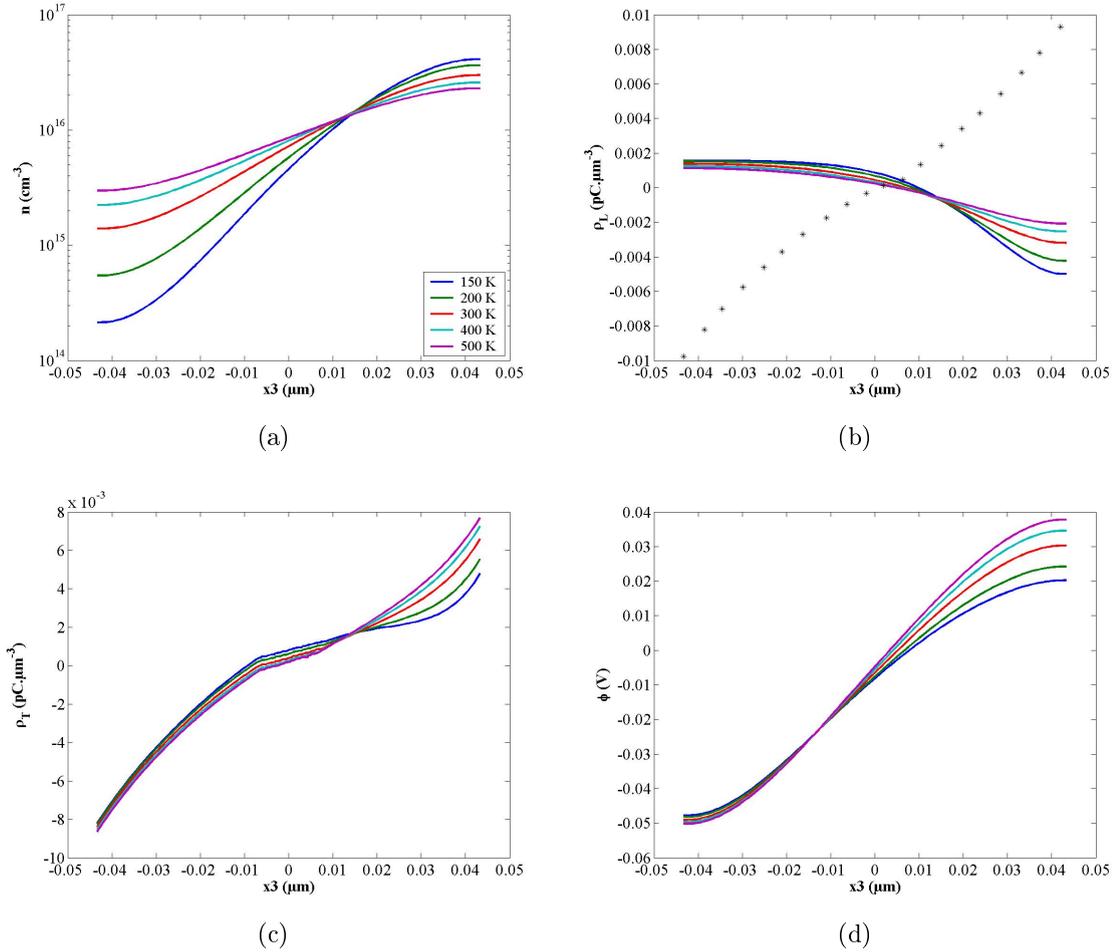


FIGURE 2.20 – Effet de la température du milieu Θ sur la répartition de a) n , b) ρ_L (pour rappel, ρ_P est figurée en pointillés), c) ρ_T et d) ϕ le long de \mathcal{L}_2 en fonction du taux de dopage N_d .

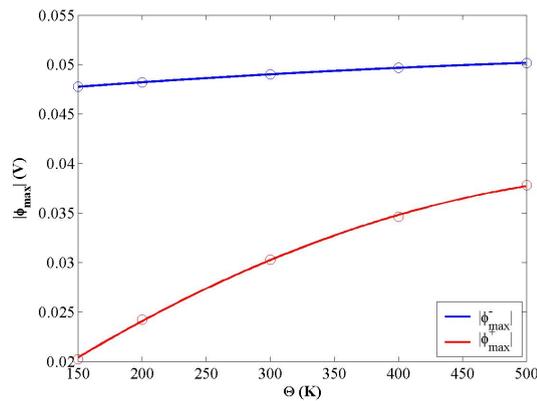


FIGURE 2.21 – Evolution des valeurs extrêmes de ϕ en fonction de Θ .

2.4. ETUDE DES PARAMÈTRES INFLUENÇANT LA RÉPARTITION DU POTENTIEL ÉLECTROSTATIQUE

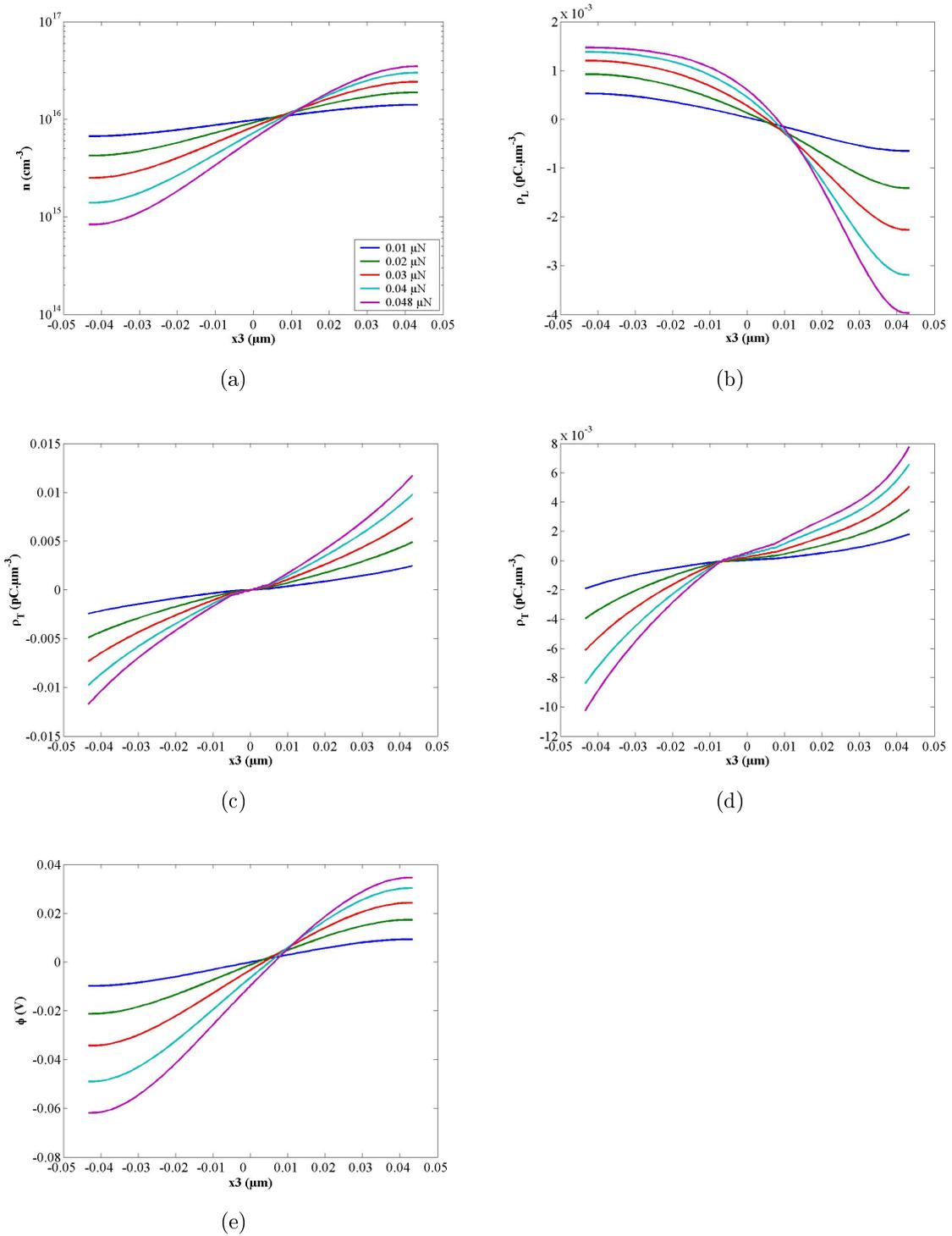


FIGURE 2.22 – Effet de F sur la répartition de a) n , b) ρ_L , c) ρ_P , d) ρ_T et e) ϕ le long de \mathcal{L}_2 .

2.4. ETUDE DES PARAMÈTRES INFLUENÇANT LA RÉPARTITION DU POTENTIEL ÉLECTROSTATIQUE

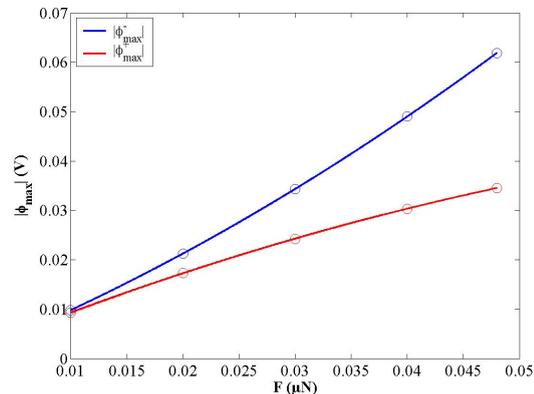


FIGURE 2.23 – Mise en évidence de la non-linéarité avec F de la transduction électromécanique.

libres s'accumulent dans la partie en extension du NF et masquent ϕ . La partie du NF en compression constitue une zone de déplétion où la concentration en électrons est plus faible. ϕ est préservé tant que la charge piézoélectrique (induite par la force appliquée au NF) est supérieure à la charge électrique créée par la présence d'impuretés ionisées. L'étude de l'influence des différents paramètres sur l'établissement et la répartition de ϕ montre que le taux de dopage N_d a un effet significatif : pour les NF de ZnO les moins purs, le potentiel disparaît aussi dans la partie du NF en compression. Les autres paramètres influençant la répartition de ϕ sont F et a : effectivement, ρ_P est directement proportionnelle à F ; de plus, à F fixée, ρ_P est plus élevée pour des NF présentant de petits rayons où la contrainte tangentielle T_{13} est maximisée. Les résultats de cette étude sont résumés en figures 2.24 et 2.25 où sont représentées les valeurs extrêmes de ϕ en fonction de N_d pour différentes valeurs de rayon a (figure 2.24) et de force F (figure 2.24-c et d). Les résultats du modèle montrent l'existence d'un dopage optimal $N_{d_{opt}}$ où l'amplitude de ϕ est maximisée dans la partie du NF en compression. Les valeurs de $N_{d_{opt}}$ calculées pour des nanofils de différents rayon a et pour différentes amplitude F de la force fléchissante sont répertoriées dans les tableaux 2.4 et 2.5.

a (nm)	40	42.5	45	47.5	50
$N_{d_{opt}}$ (cm^{-3})	1.3×10^{15}	1.1×10^{15}	9.5×10^{14}	8.4×10^{14}	7.4×10^{14}

TABLE 2.4 – Taux de dopage optimal pour différentes valeurs de a ($F = 0.02 \mu\text{N}$).

2.5. CONCLUSION

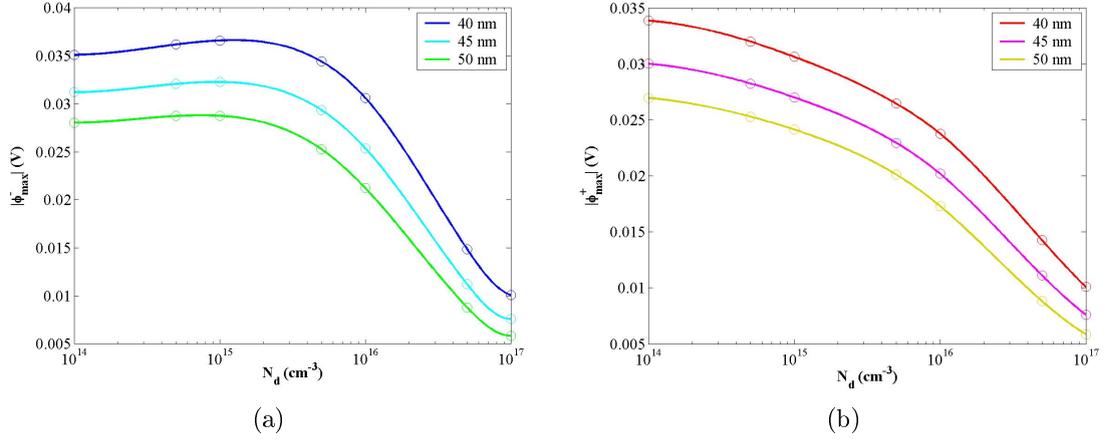


FIGURE 2.24 – Valeurs extrêmes de ϕ en fonction de N_d pour différentes valeurs de a dans la partie du NF en a) compression et b) en extension.

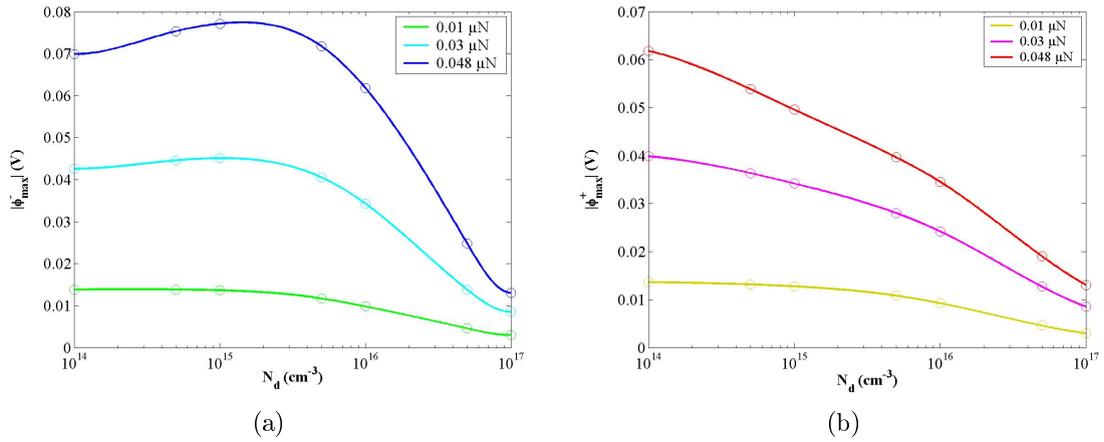


FIGURE 2.25 – Valeurs extrêmes de ϕ en fonction de N_d pour différentes valeurs de F dans la partie du NF en a) compression et b) en extension.

F (μN)	0.01	0.02	0.03	0.04	0.048
$N_{d_{opt}}$ (cm^{-3})	2.5×10^{14}	7.4×10^{14}	1.0×10^{15}	1.2×10^{15}	1.5×10^{15}

TABLE 2.5 – Taux de dopage optimal pour différentes valeurs de F ($a = 50$ nm).

2.5 Conclusion

L'originalité du modèle semi-analytique du NF en flexion statique présenté dans ce chapitre vient de la prise en compte du couplage piézo-semiconducteur. Il s'applique à des NF présentant un facteur de forme supérieur ou égal à 10. La force

2.5. CONCLUSION

appliquée et/ou la valeur minimale du rayon du NF doivent respecter le critère de non-linéarité afin de rester dans l'hypothèse des petites déformations.

Grâce aux résultats du modèle éléments finis, l'erreur engendrée par les différents degrés d'approximations a été estimée. Le fait de considérer un matériau isotrope et de négliger l'effet piézoélectrique indirect induit une erreur de moins de 6 % sur \mathbf{T} . Dans l'approximation de Bredt, T_{12} est nulle et l'erreur sur T_{13} est de 10.2 %. La conséquence principale est de sous-estimer ϕ : lorsqu'on modélise un NF sans impuretés ($N_d = 0$) à l'aide du modèle semi-analytique, les différents degrés d'approximations engendrent une erreur relative de l'ordre de 30% sur ϕ . Cependant l'approximation de Bredt nous permet d'obtenir une solution analytique de \mathbf{T} . L'équation de Poisson régissant ϕ est ensuite établie et on obtient une expression analytique du terme source où les charges piézoélectriques et les charges libres sont séparées. Cela permet une meilleure compréhension des mécanismes de la conversion électromécanique et des effets du couplage piezo-semiconducteur. Dans un deuxième temps, il sera possible de prendre en compte T_{12} en calculant de manière numérique le tenseur des contraintes \mathbf{T} ainsi que la densité de charge ρ_P .

Les résultats du modèle nous indiquent des tendances et sont une aide pour réaliser une synthèse optimisée des NF ainsi que pour leur intégration comme éléments actifs d'un microgénérateur : parmi les différents paramètres du modèle, ceux ayant un impact significatif sur l'établissement du potentiel électrostatique sont la force appliquée F , le rayon du NF a et le taux de dopage N_d . Concernant ce dernier paramètre, on a mis en évidence l'existence d'un taux de dopage optimal où ϕ^- présente une amplitude maximale supérieure à l'amplitude atteinte dans le cas théorique d'un NF non dopé. A contrario, ϕ^+ diminue à mesure que N_d augmente.

Ce modèle convient parfaitement à l'étude de la conversion électromécanique de l'énergie pour un NF isolé. Néanmoins, il est difficile d'adapter cette approche à la modélisation de dispositifs basés sur des réseaux de NF. Effectivement, la résolution numérique par éléments finis est une méthode coûteuse en terme de temps de calcul et d'espace mémoire pour des systèmes contenant un grand nombre d'éléments. De plus, il faut également se placer en régime dynamique pour prédire complètement les performances de dispositifs à base de NF de ZnO. Ceci est l'objet du chapitre suivant.