

## Phénomènes de génération et d'accumulation de charges aux interfaces à l'échelle nanométrique

### Mots-clés:

Isolants électriques polymères, caractérisation multi-échelle, microscopie à force atomique, modélisation

### Contexte et objectifs du projet

Quel que soit le domaine d'application (génie électrique, électronique de puissance, aéronautique, spatial), les polymères sont de plus en plus utilisés dans les systèmes d'isolation électrique ou de stockage de l'énergie. Ces matériaux, soumis à des contraintes thermoélectriques, peuvent accumuler des charges dans leur volume, rendant difficile l'estimation du champ électrique en tout point du matériau. Une augmentation du champ électrique peut entraîner la rupture diélectrique de l'isolant et affecter la fiabilité du système.

Dans ce contexte, les interfaces jouent un rôle prépondérant dans la génération (électrodes) et l'accumulation de charges électroniques. De plus, l'utilisation de nouveaux matériaux pour améliorer les performances et la fiabilité des systèmes, en particulier les nano-composites, ajoutent encore de la complexité. En effet, la présence d'une interface entre le nanomatériau et la matrice isolante peut également engendrer une accumulation de charges.

L'objectif de ce travail est double. Nous souhaitons dans un premier temps **caractériser à l'échelle nanométrique les propriétés d'interfaces** et ainsi améliorer la compréhension des phénomènes impliqués dans la génération et l'accumulation de charges, afin de **proposer un modèle physique** capable de prédire le comportement d'un polymère sous contrainte. Les modèles ainsi développés permettront ensuite de vérifier si les phénomènes aux interfaces sont les mêmes au sein des nano-composites.

Ce projet adresse la problématique des matériaux isolants utilisés dans le domaine de l'énergie, pour la génération (photovoltaïque), le transport (câbles HVDC, HVAC), ou le stockage de l'énergie (condensateurs). Pour ces applications, les matériaux polymères sont devenus incontournables en tant qu'isolants électriques de par leur simplicité de mise en œuvre, la possibilité de les recycler, ainsi que leurs propriétés diélectriques (tenue en tension, permittivité élevée, pertes faibles). Pour les isolants des câbles HVDC par exemple, la priorité va à l'amélioration de ces matériaux, pour les rendre plus légers et moins polluants, pour les rendre plus résistants à des environnements sévères et pour limiter les déperditions d'énergie. Ce projet adresse les deux premiers aspects. La compréhension de l'influence de l'interface sur les mécanismes de génération et d'accumulation de charges permettrait de prédire la répartition du champ électrique. Cette connaissance du comportement de la charge permettra d'optimiser le choix des matériaux, de leurs associations (avec une électrode, avec des nanoparticules) pour améliorer les performances et la durée de vie des systèmes.

Pour cela, nous proposons une approche innovante pour déterminer les propriétés de l'interface et leur impact sur les phénomènes physiques, combinant des **méthodes de caractérisation et de modélisation allant de l'échelle nanométrique au système macroscopique**.

### Programme de travail

Le projet est divisé en deux parties.

- Tout d'abord, les interfaces métal / isolant seront étudiées à l'échelle sub-micrométrique grâce à des techniques de mesures dérivées de la microscopie à force atomique (AFM). Les matériaux choisis seront des isolants polymères ayant un intérêt à l'échelle industrielle (polyéthylène-PE pour les câbles HVDC ou poly(vinylidène fluorure)-PVDF pour le stockage) et différents métaux (Au, Cu, Al...) classiquement utilisés pour réaliser des électrodes. Les propriétés de l'interface seront déterminées expérimentalement, pour chaque couple métal/isolant, par AFM en mesurant la morphologie de l'interface par mesure des propriétés mécaniques (PF-QNM), le potentiel de surface par Microscopie à sonde de Kelvin (KPFM) et la permittivité par Microscopie à Force Electrostatique (EFM). Une technique spécifique de mise en œuvre et de découpe d'échantillons sera utilisée pour permettre les mesures AFM au niveau de l'interface. Ces résultats seront couplés à une étude de la chimie de surface par FTIR (présence de groupes carboxyles ...) et à des mesures macroscopiques (courant et/ou charge d'espace). La chimie et/ou la rugosité de la surface de l'isolant pourront être modifiées par un traitement plasma O<sub>2</sub> par exemple.

- En terme de modélisation, il sera nécessaire de proposer une description correcte de l'interface, d'abord à l'échelle nanométrique, mais aussi d'adapter cette description à une échelle plus macroscopique, afin de l'insérer



dans un modèle de transport de charges. Il sera également possible d'utiliser des données de bases issues de la littérature, provenant notamment de la modélisation ab-initio (niveaux énergétiques liés à différents groupes chimiques dans la bande interdite). Des simulations seront ensuite effectuées pour les différents protocoles expérimentaux, à l'échelle nano et macro, afin de valider la modélisation.

En fonction de l'avancement des travaux, il sera envisageable d'étendre cette étude au matériaux nano-composites (différentes nanoparticules dans une matrice PE) pour comprendre l'impact de la réduction des tailles et de l'effet « nano » sur les propriétés de l'interface.

#### **Encadrement de la thèse**

Séverine Le Roy (Directrice de recherche) : [severine.leroy@laplace.univ-tlse.fr](mailto:severine.leroy@laplace.univ-tlse.fr)

Christina Villeneuve-Faure (Maitre de conférences) : [christina.villeneuve@laplace.univ-tlse.fr](mailto:christina.villeneuve@laplace.univ-tlse.fr)

#### **Financement / conditions de travail**

Bourse de l'école doctorale (acquise)

Début de la thèse : octobre 2023

Lieu de la thèse : laboratoire LAPLACE – site Université Paul Sabatier

#### **Profil**

Etudiants titulaire d'un master 2 ou d'un diplôme d'ingénieur ayant des compétences en matériaux, en technique de caractérisation en électronique et/ou en modélisation. Le candidat devra démontrer un intérêt pour l'expérimentation et la modélisation.