

# HABILITATION A DIRIGER DES RECHERCHES HDR

NANTES UNIVERSITE

*Sciences de l'Ingénierie et des Systèmes*

Spécialité : Thermique, Énergétique, Combustion

Par

**Giorgia FUGALLO**

**Exploiter les Phénomènes Émergents des Systèmes Multicouches vers 2D pour des Technologies Avancées de Conversion et de Gestion de l'Énergie Thermique**

**Travaux présentés et soutenus à Nantes, le 24/01/2025**

**Unité de recherche : LTEN UMR6607**

## **Rapporteurs avant soutenance :**

Samy MERABIA Directeur de Recherche CNRS, Université de Lyon I, FR

Matthieu VERSTRAETE Professeur, Université de Liège, BE

Sébastien VOLZ Directeur de Recherche CNRS, Université de Tokyo, JP

## **Composition du Jury :**

*Attention, en cas d'absence d'un des membres du jury le jour de la soutenance, la composition du jury doit être revue pour s'assurer qu'elle est conforme et devra être répercutée sur la couverture*

Examineurs : Stéphane JOBIC Directeur de Recherche CNRS, Université de Nantes, FR

Claudine KATAN Directrice de Recherche CNRS, Université de Rennes, FR

Konstantinos TERMENTZIDIS Directeur de Recherche CNRS, INSA, Lyon, FR

## **Invité(s)**

Angela VASANELLI Professeur, École Normale Supérieure de Paris, FR

**Titre :** Exploiter les Phénomènes Émergents des Systèmes Multicouches vers 2D pour des Technologies Avancées de Conversion et de Gestion de l'Énergie Thermique

**Mots clés :** Multicouches, matériaux 2D, modélisation ab initio , spectroscopie théorique, gestion thermique,thermoélectricité

**Résumé :** Le présent manuscrit résume les travaux que j'ai effectués après mon doctorat. Il reflète mes principaux intérêts de recherche centrés sur la modélisation théorique et numérique des propriétés des matériaux pour applications énergétiques. En particulier les matériaux multicouches et 2D, que j'ai eu la chance d'étudier « a tutto tondo », des propriétés thermiques conductrices et radiatives, cruciales pour la conversion thermique et les applications de gestion, jusqu'aux excitations électroniques et aux effets excitoniques, dans diverses spectroscopies, vitales pour les applications photovoltaïques. Grâce à leurs propriétés remarquables ces matériaux sont rapidement passés du statut de découvertes scientifiques à celui de composants essentiels dans les domaines de l'électronique, de la métrologie, du stockage de l'énergie, de la biomédecine et de l'instrumentation. Dans ces applications, le comportement thermique de ces matériaux joue un rôle essentiel, soit en tant que verrou pour les progrès des matériaux, soit en tant qu'élément porteur essentiel à

l'obtention de performances et d'une efficacité accrues. La compréhension et la manipulation des propriétés thermiques de ces matériaux constituent des facteurs essentiels pour améliorer l'efficacité de diverses applications, notamment la collecte d'énergie dans la gestion thermique des futurs dispositifs nanoélectroniques, l'amélioration de l'efficacité énergétique dans les applications thermoélectriques, la facilitation de la miniaturisation des dispositifs et même l'avancement des systèmes photovoltaïques intégrés dans les bâtiments. Le comportement à l'échelle macro est intrinsèquement dû à les interactions complexes à la nano-échelle et au couplage des différentes excitations (phonon, multi-phonon, plasmon, exciton, etc.), de sorte qu'il devient essentiel de disposer d'un modèle sans paramètre capable de fournir des évaluations et des prédictions précises et fiables de leur réponse. Dans le manuscrit, je présenterai mes contributions dans ces cadres et j'expliquerai les défis futurs que je souhaite relever.

**Title :** Unlocking Emergent Phenomena from Multilayers to 2D Materials for Advanced Thermal- Energy Conversion and Thermal-Management Technologies

**Keywords :** Multilayers, 2D materials, ab initio modelling, theoretical spectroscopy, thermal-management, thermo-electricity

**Abstract :** The present manuscript summarises the work I have done since the completion of my PhD and reflects my main research interests, predominantly centered around the theoretical and numerical modeling of material properties tailored for energy applications. In particular multilayered and 2D materials, which I had the chance to study “a tutto tondo” from conductive and radiative thermal properties, crucial for thermal conversion and management applications to electronic excitations and excitonic effects, in diverse spectroscopies, vital for photovoltaic applications. These materials, triggered by the first isolation of graphene in 2004 have rapidly transitioned from scientific discoveries to pivotal components in electronics, metrology, energy storage, biomedicine, and instrumentation. In these applications, the thermal behaviour of these materials plays a critical role, serving either as a bottleneck hindering materials advancements or as an integral enabling element crucial for achieving

higher performance and efficiency. Understanding and manipulating the thermal properties of these materials are crucial for several reasons. They serve as essential factors in enhancing the efficiency of diverse applications, including energy harvesting in thermal management for future nanoelectronics devices, enabling wearable energy solutions, improving energy efficiency in thermo-electric applications, facilitating device miniaturization, and even advancing building integrated photovoltaics. The behaviour at the macro scale is inherently due to the complex many-body interactions and the coupling of the various excitations (phonon, multi-phonon, plasmon, exciton, etc) so that becomes of pivotal importance to have a parameter free model able to give a precise and reliable evaluations and predictions of their response. In the manuscript, I will present my contributions within these frameworks and explain on the future challenges I aim to tackle.