

Simulations Atomistiques de Semi-conducteurs Nanoarchitecturés : Propriétés Thermique et Vibratoire

Paul Desmarchelier

À l'échelle nanométrique, les propriétés thermiques et vibratoires sont intimement liées et dépendent de la forme et de la composition des matériaux. Grâce à la nanostructuration, les nanocomposites permettent un meilleur contrôle du transport thermique. Ceci permet notamment d'améliorer les performances des générateurs thermoélectriques en offrant de meilleurs isolants, mais aussi une meilleure gestion de la chaleur dans les composants électroniques. Dans ce travail, les propriétés thermiques de quelques nanocomposites sont étudiées en utilisant des calculs à l'échelle atomiques, par le biais de la modélisation de Dynamique Moléculaire.

Dans un premier temps, l'accent est mis sur des nanocomposites constitués d'une matrice amorphe et de nano-inclusions cristallines. L'approche développée pour les amorphes, séparant la partie balistique du transfert thermique qui prend la forme d'onde plane se propageant dans le matériau et la partie diffusive repartissant lentement l'énergie dans le matériau, est mis à profit. La séparation de ces contributions a montré que si la structuration affecte systématiquement la partie balistique, maîtriser l'impact sur le transport diffusif est plus complexe. Celui-ci peut notamment être réduit par la présence de pores ou d'inclusions plus molles que la matrice, mais dans des proportions variables.

Une deuxième partie est consacrée à l'étude des nanofils de silicium, et à l'impact de l'amorphisation de ceux-ci. Pour cela, le transport d'énergie en fonction de la fréquence dans des nanofils avec une âme cristalline et une coque amorphe est étudié. La coque amorphe provoque l'apparition d'un transport diffusif et une baisse de transmission aux basses fréquences. Ensuite, la dynamique moléculaire est couplée aux équations hydrodynamiques du transport de chaleur. Ce couplage est mis à profit pour étudier la distribution radiale du flux de chaleur en régime établie dans les nanofils cylindriques avec une couche amorphe régulière. Cette analyse suggère que la réduction de la conductivité thermique due à l'ajout de la coque n'est pas uniquement liée aux changements des propriétés de l'interface, mais plutôt à un effet global de la coque amorphe sur le libre parcours moyen.

Finalement, la structuration en cône de la couche amorphe est utilisée pour induire une rectification thermique, c'est-à-dire une asymétrie spatiale dans le transport thermique. Cette rectification semble être due à la perturbation de la propagation des porteurs de chaleur à basses fréquences.