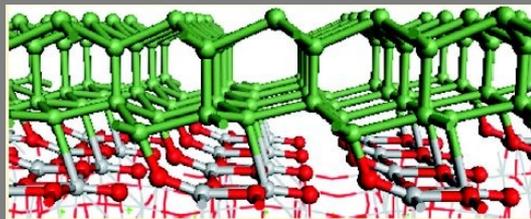


La modélisation de matériaux à l'IEMN

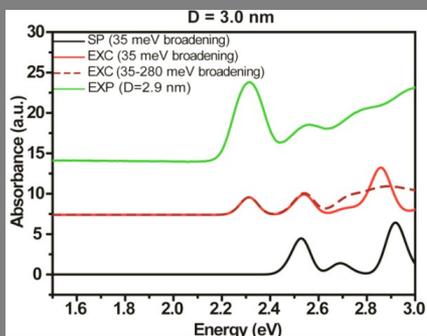
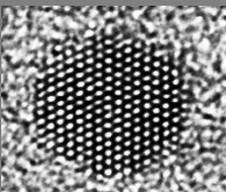
ab initio

I. Lefebvre et al.
Croissance Ge sur
SrTiO₃ - ab initio



Liaisons fortes

C. Delerue et al.
Propriétés optiques de nanocristaux – liaisons fortes

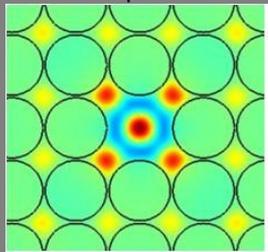


F. Cleri et al.
SDYNA : Structure et dynamique des nano-matériaux

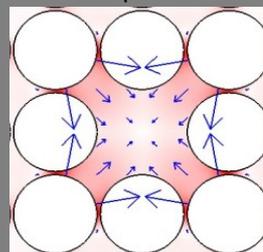
MD

B. Djafari-Rouhani et al.
Interaction ondes-matières

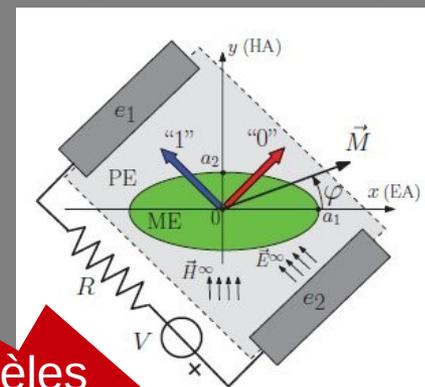
Confinement d'un photon



Confinement d'un phonon



S. Giordano et al.
Analyse combinée nanomécanique-nanomagnétique de mémoires magnétoélectriques



Modèles continus

SDYNA

If atoms don't move ...



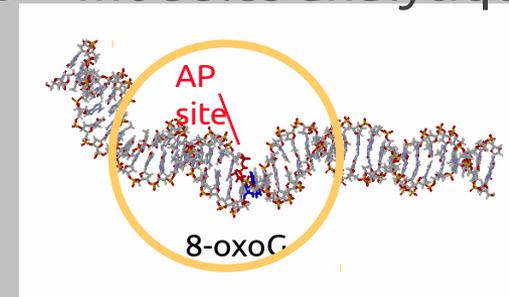
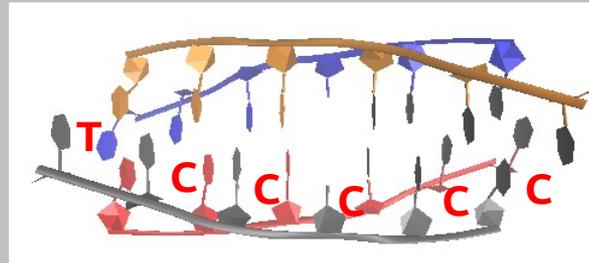
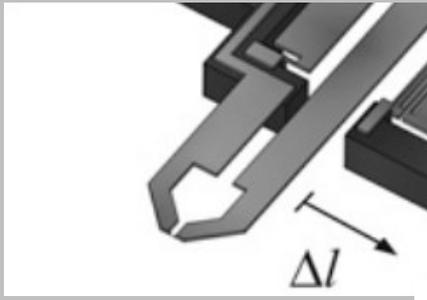
... it's no fun !!

F. Cleri, C. Krzeminski, E. Lampin, P.-L. Palla

S. Carillo, M. Charoy, G. Copie, P.-A. Francioso, R. Singh

Nanobiomécanique ou comment remonter à des infos sur la molécule à partir de son comportement mécanique

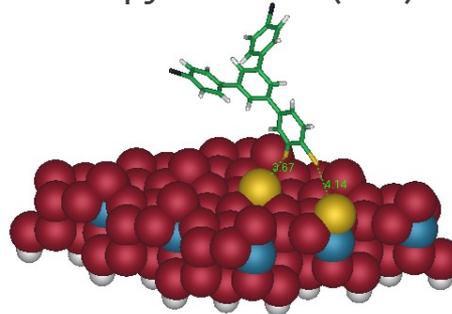
Ex : nanotweezers pour l'étude de l'ADN - MD – modèles analytiques



Auto-organisation

MD an initio +
DFT Gaussian

Tripyr* sur Si:B(111)



Nanothermique →

Etude du transport de chaleur dans des systèmes à base de silicium par modélisation d'approche à l'équilibre en dynamique moléculaire

Evelyne LAMPIN
IEMN – Lille - France

evelyne.lampin@isen.iemn.univ-lille1.fr
<http://theory.co.nr>

Plan

Motivation

Principe de la modélisation d'approche à l'équilibre en MD

Cas homogène

Extraction de la conductivité thermique

Application à cSi, cGe, α quartz

Interface entre 2 matériaux

Résistance d'interface élevée

Application à une constriction de cSi

Résistance d'interface faible

Application aux interfaces cSi/aSi et aSiO₂

Conclusion

Etude du transport de chaleur

Motivation :

Dissipation thermique (dans un centre de calcul, 60% de la consommation électrique est dédiée au refroidissement)

Effets de taille, de nanostructuration - **thermoélectricité**

Approche : **dynamique moléculaire** classique (codes MODYC, DL_POLY)

Les libres parcours moyens des phonons sont très grands, on ne peut pas faire de dynamique moléculaire *ab initio*

Large choix de potentiels interatomiques pour le silicium, limites et succès de chacun « bien » connus

Méthodes pour étudier le transport de chaleur en MD

Méthode de Green-Kubo, fluctuations de la chaleur à l'équilibre, κ

Méthode directe, gradient de température, κ et R_{int}

Notre méthode : **simulation de l'approche à l'équilibre**

Principe de l'approche à l'équilibre

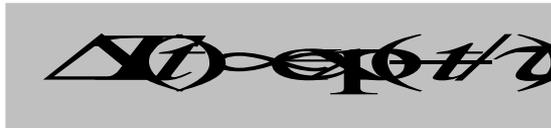
1) Le système est divisé en 2 blocs, chauffés à 2 températures différentes (NVT à consignes distinctes $\pm 100\text{K}$)



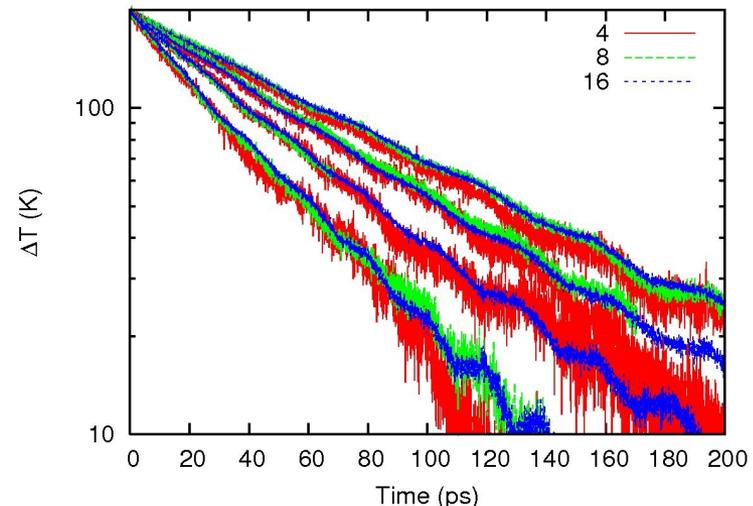
2) Puis la contrainte sur la température est levée et le système est laissé libre de s'équilibrer (NVE)



L'approche à l'équilibre se fait exponentiellement



Idée : **extraire κ ou R_{int} de τ**



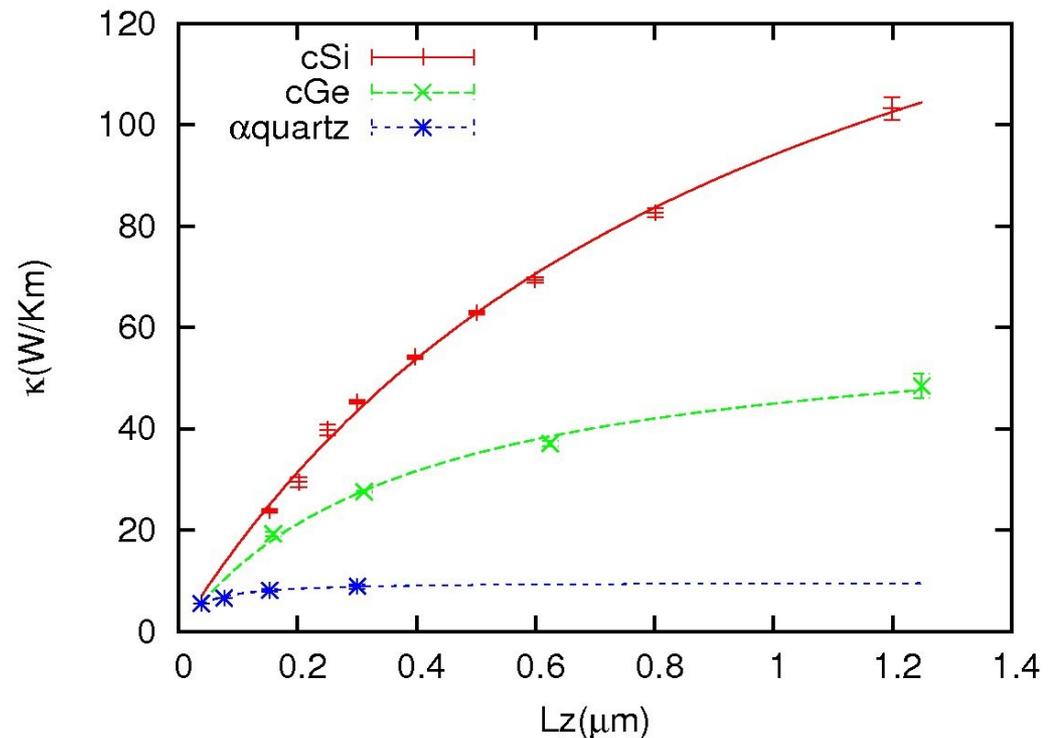
Application à cSi, cGe, α quartz

cSi et cGe décrits par Tersoff, Phys. Rev. B **38** (1988) 9902

α quartz décrit par BKS, PRL **64** (1990) 1955

Temp. « élevée »: 500K ($\Theta_D = 645$ K (cSi), 360K (cGe), 470K (α quartz))

→ **Forte dépendance**
en fonction de la
longueur du barreau
Origine : longueur du
barreau < libre parcours
moyen phonons les +
grands
Il y a des libres parcours
moyens jusqu'à **10 μm**
dans cSi à 500K !!!¹



Conclusion pour cSi

Extrapolation de κ suivant Schelling et al.¹

$$\frac{1}{\kappa} = \frac{1}{\kappa_{\infty}} \left(1 + \frac{l_{\infty}}{L_z} \right)$$

cSi, 500K :

$\kappa_{\infty} = 187 \pm 8 \text{ W/K.m}$; $l_{\infty} = 0.99 \mu\text{m}$

Exp : **80 W/K.m**

Autres calculs, GK ou direct :

Tersoff: [120-155] W/K.m

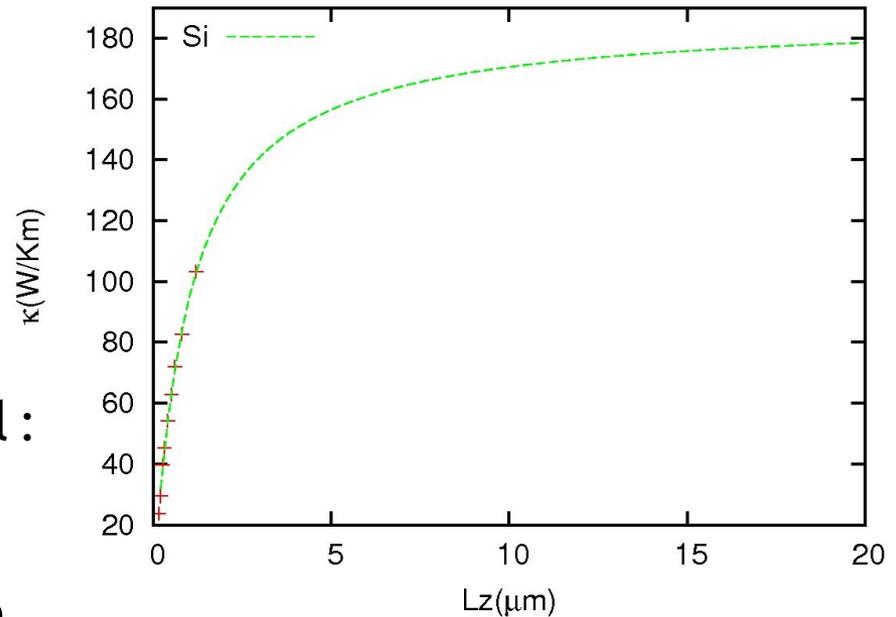
SW : [93-230] W/K.m

Origines du désaccord /expérimental :

- effet des **isotopes** naturel : 10%
- effet de **convergence** non-atteinte
- **limites du potentiel** interatomique

Rappel : termes anharmoniques (collisions 3 phonons) nécessaires pour décrire conductivité thermique

→ Fit des paramètres optimise peut-être pas cette partie



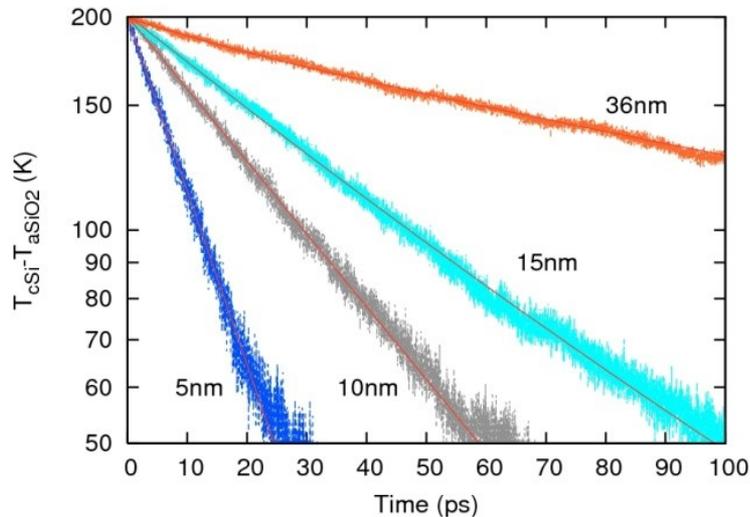
Cas d'une interface :

Les 2 blocs sont faits de matériaux différents.
Exemple cSi/aSi ou aSiO₂



Si : Tersoff, Phys. Rev. B **38** (1988) 9902 – O : Munetoh et al, Comput. Mater. Sci 39 (2007) 334

Une décroissance **exponentielle** est également obtenue :



Comment déduire la **résistance thermique d'interface** du taux de décroissance dans ce cas ?

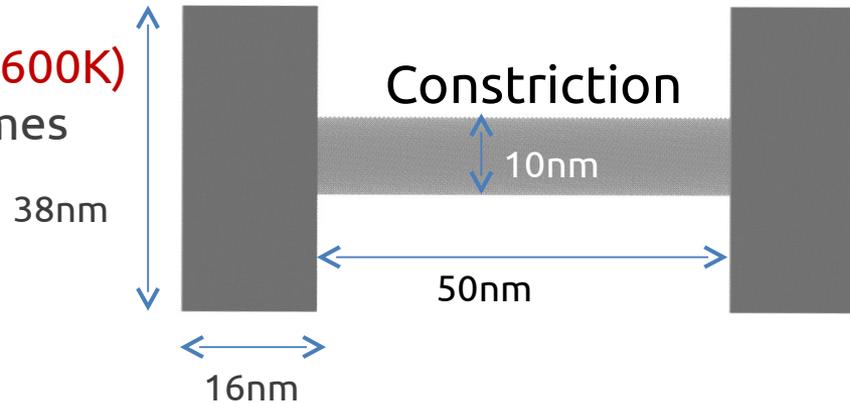
Pas de résolution analytique de l'équation de la chaleur !

Approximation doit être utilisée

Application à une constriction

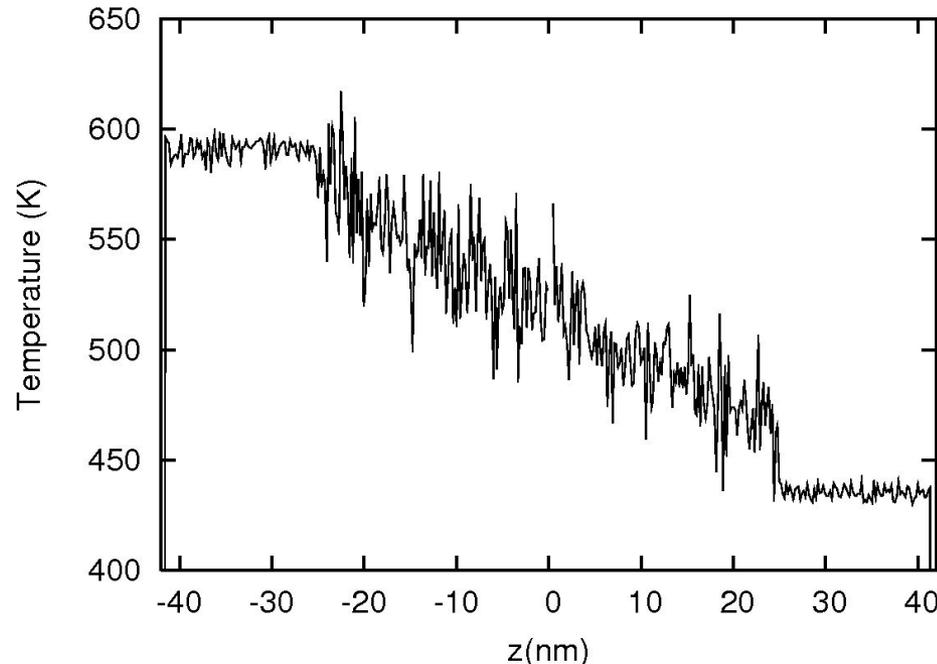
Résistance thermique associée à une constriction entre 2 réservoirs (cSi)

Réservoir chaud (600K)
1 176 000 atomes

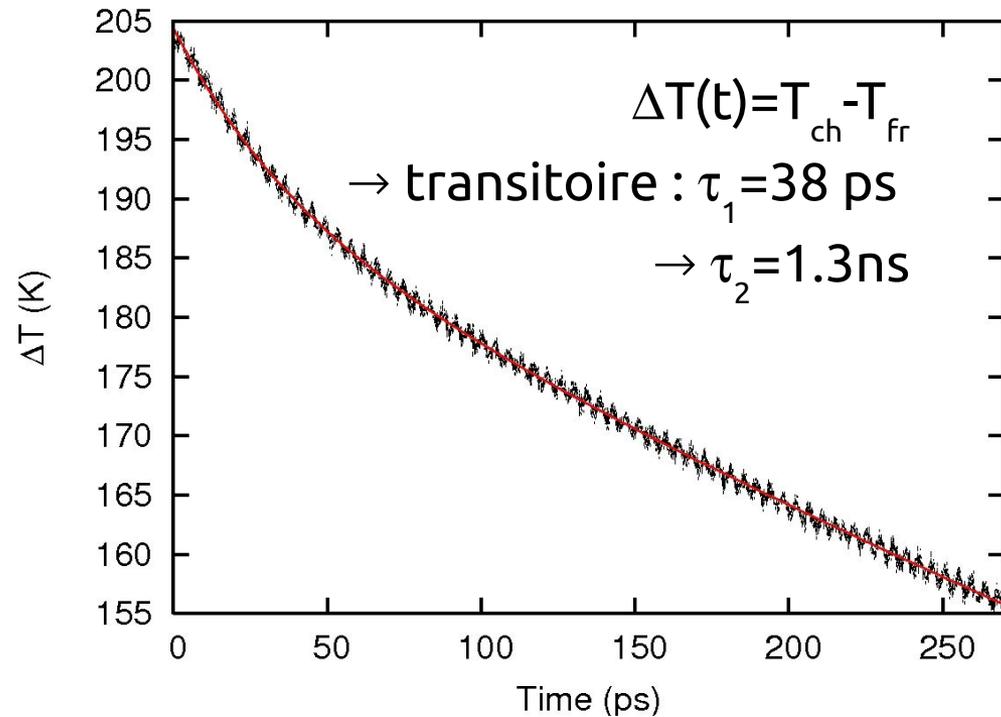
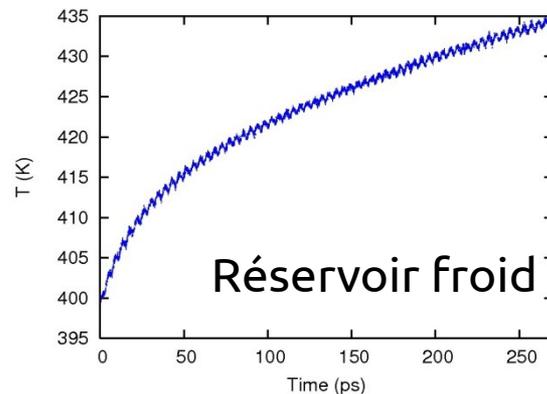
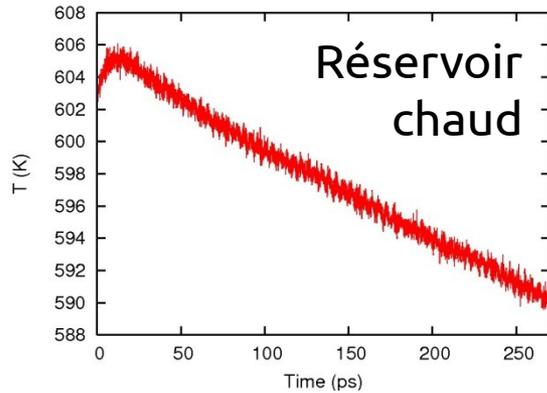


Réservoir froid (400K)
1 176 000 atomes

+ 2D CLP



Application à une constriction



Résistance de la constriction :

$$R = 1/(G.S) = \mathbf{5.5 \times 10^7 \text{ K/W}}$$

Application à l'interface cSi/aSiO₂ ou aSi

L'hypothèse des profils de température plats de chaque côté de l'interface n'est plus valable car l'amorphe a une faible conductivité thermique

→ La résistance totale est la somme de 3 contributions

$$\frac{1}{G.S} = R = \frac{L_C}{\kappa_C} + 2R_K + \frac{L_A}{\kappa_A}$$

où C désigne le cristal (cSi) et A l'amorphe (aSi ou aSiO₂)

avec toujours :

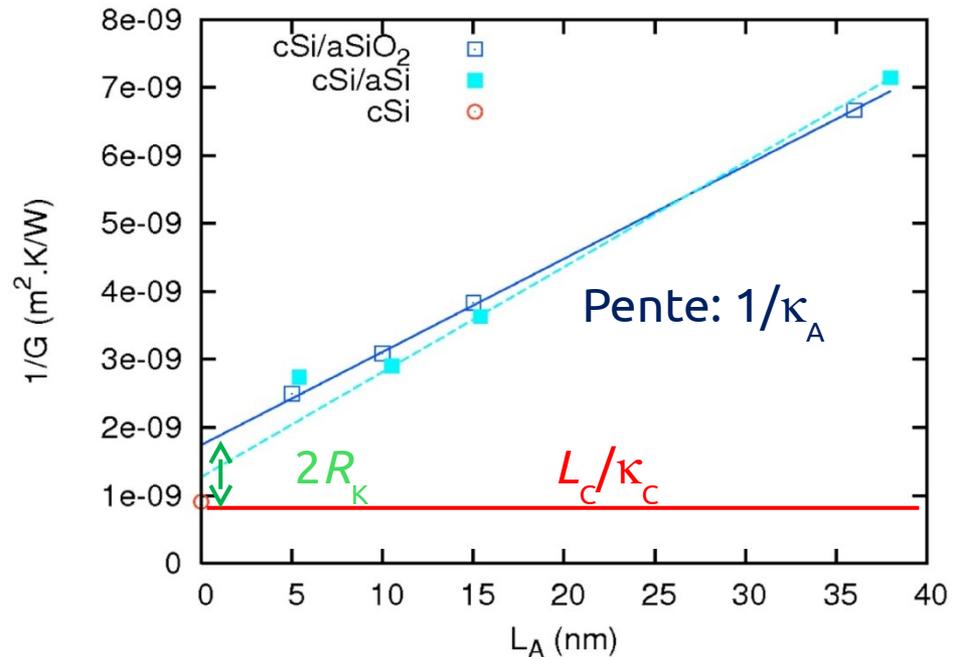
$$\frac{1}{G.S} = \tau \cdot \left(\frac{1}{\rho_1 C_{V1}} + \frac{1}{\rho_2 C_{V2}} \right)$$

NB : κ_A étant très petit ($< \kappa_C/10$), le terme L_A/κ_A risque de masquer R_K (a priori petit), nous utilisons donc une géométrie dissymétrique :



Application à l'interface cSi/aSiO₂ ou aSi

A L_C fixé (150 nm), on fait varier L_A
 → Dépendance linéaire vérifiée
 → La contribution L_C/κ_C est calculée séparément
 → R_K est déduit de l'ordonnée à l'origine



| $\kappa_C = 165$ W/K.m | aSi | aSiO ₂ |
|-----------------------------|----------------------|----------------------|
| κ_A (W/K.m) | 6.5 | 7.3 |
| R_K (K.m ² /W) | 0.2×10^{-9} | 0.4×10^{-9} |

La résistance d'interface cSi/aSiO₂ est faible mais :
 → **2x** celle à l'interface cSi/aSi
 → Correspond à **3 nm de SiO₂**

Conclusion :

Nous avons mis au point une approche de simulation basée sur la dynamique moléculaire et qui

→ permet d'extraire :

- la **conductivité thermique** d'un matériau homogène
- la **résistance d'interface** entre 2 matériaux, faible ou non

→ est **plus rapide** que le calcul d'une fonction d'autocorrélation (GK) (centaines de ns) ou l'atteinte du régime permanent (méth. directe) (dizaines de ns)

typiquement 100 à 500 ps à simuler, donc on peut étudier des systèmes plus grands (1.2 μm)

→ reste **tributaire du potentiel interatomique**

Approche à retrouver dans:

Thermal bulk conductivities and boundary conductances from approach-to-equilibrium molecular dynamics, E. Lampin, P.-L.Palla, P.-A. Francioso and F. Cleri, à paraître