

Nom du candidat : Pierre-Arnaud FRANCIOSO

JURY

Président de Jury

Directeur de Thèse

F. CLERI Professeur à l'Université de Lille1, IEMN

Co-Directrice de Thèse

E. LAMPIN Chargée de Recherche CNRS à l'Université de Lille1, IEMN

Rapporteurs

J.-P. CROCOMBETTE Chercheur au CEA à Gif-sur-Yvette

S. ISPAS Maître de Conférences à l'Université de Montpellier2

Membres

C. DELERUE Directeur de Recherche CNRS à l'Université de Lille1, IEMN

D. DONADIO Professeur à Max Planck Institute for Polymer Research à
Mayence, Allemagne

A. HEMERYCK Chargée de Recherche au LAAS à Toulouse

L. MAGAUD Directrice de Recherche CNRS à l'Institut Néel à Grenoble

TITRE DE LA THESE

**Détermination de la résistance thermique d'une interface
cristal/amorphe à l'aide de la dynamique moléculaire classique**

RESUME

L'histoire du silicium cristallin cSi et de sa forme oxydée (silice $aSiO_2$) est intimement liée au développement des transistors depuis les années 1960. La miniaturisation de ces composants au fil du temps, permettant d'améliorer la puissance des ordinateurs avec une régularité proche de celle prédite par la loi de Moore, nécessite aujourd'hui une compréhension de la physique de ces systèmes à l'échelle nanométrique. Face aux coûts nécessaires pour réaliser des expériences à de si petites échelles, la simulation numérique – et plus particulièrement la dynamique moléculaire (MD) est un outil de premier choix.

Nous appliquons ainsi, dans cette thèse, la MD classique au cas des transistors silicium-sur-isolant (SOI), afin de déterminer la résistance thermique de l'interface $cSi-aSiO_2$, qui peut se révéler être un facteur limitatif de la dissipation thermique dans les transistors ultrafins. Après avoir exposé le principe de la MD classique (chapitre 1) et présenté des pistes pour optimiser la recherche des voisins (chapitre 2), nous proposons dans le chapitre 3 les étapes que nous avons suivies pour former nos systèmes silicium-silice, ainsi qu'une manière de caractériser l'interface pour de tels systèmes. Enfin, dans le chapitre 4, nous développons une méthode – l'*approach-to-equilibrium molecular dynamics* (AEMD) –, qui nous permet d'obtenir une valeur de la résistance pour l'interface $cSi-aSiO_2$ estimée à $3,6 \cdot 10^{-10} \text{ m}^2 \cdot \text{K} \cdot \text{W}^{-1}$.

**Soutenance prévue le 06 juin 2014 à 10h30
Amphi du LCI**