



DOCTORAT DE  
L'UNIVERSITE DE LILLE 1  
Ecole Doctorale : SPI



Discipline : Micro et Nano Technologies,  
Acoustique et Télécommunications

Nom du candidat : Hayat ZAOUI

**Président de Jury**

**Directeur de Thèse**

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

**Rapporteurs**

N. VAST Ingénieure-Chercheuse à Polytechnique à Palaiseau

S. VOLZ Directeur de Recherche au LIMMS à Tokyo

**Membres**

A. LEGRIS Professeur à l'UMET à Lille

C. MASSOBRIO Directeur de Recherche au l'IPCMS à Strasbourg

J.-F. ROBILLARD Enseignant-Chercheur à l'ISEN à Lille, IEMN

**TITRE DE LA THESE**



**Conduction thermique à la nanoéchelle : simulations  
par dynamique moléculaire d'approche à l'équilibre**

**Nanoscale thermal conduction : approach to equilibrium  
molecular dynamic simulations**

**RESUME**

Les propriétés thermiques des nanomatériaux offrent une palette variée de comportements. Parfois, le transfert thermique est dégradé comparé à l'échelle macroscopique, produisant un échauffement dans les nanodispositifs électroniques et une augmentation de l'efficacité des modules thermoélectriques. D'autres fois, la conductivité thermique atteint des niveaux supérieurs à ceux des matériaux massifs. Cette thèse étudie le transport de chaleur dans des nanostructures de silicium par simulation à l'échelle atomique. La méthode de la dynamique moléculaire est utilisée dans un cadre original basé sur l'exploitation de transitoires de température, la dynamique moléculaire d'approche à l'équilibre (AEMD i.e. Approach-to-Equilibrium Molecular Dynamics). Après avoir présenté et illustré l'AEMD dans le cas du silicium massif, nous étudions la conductivité thermique de nanofils lisses en fonction de leur diamètre et de la longueur. Nous montrons que le profil de température est conforme à l'équation de la chaleur et que la conductivité thermique des nanofils sature à grande longueur. Nous étudions ensuite l'effet d'une nanostructuration par évidement et de la rugosité de surface. Nos résultats sont comparés à une approche de simulation alternative pour explorer le poids relatif des collisions phononiques internes et surfaciques. Enfin, nous nous intéressons à la conductivité thermique de membranes de silicium nanostructurées fabriquées au sein du laboratoire. Nous montrons que, pour réduire davantage la conductivité thermique et ainsi augmenter l'efficacité de conversion d'un dispositif thermoélectrique, il faudra davantage de nanostructuration que des évidements cylindriques.

The thermal conductivity of nanostructures varies on a large scale compared to bulk materials. Sometimes the thermal transfer is worse due to the reduction of thermal conductivity, at the origin of self-heating in electronic devices, but valuable for thermoelectric devices. In other cases, the thermal conductivity reaches impressive levels compared to bulk materials. The origin of these behaviors is at the atomic level, and the in the propagation of the heat carriers, the phonons. In this thesis, we study heat transport in silicon nanostructures by atomic scale simulations. Molecular dynamics is used here in the framework of a methodology we recently developed, the approach-to-equilibrium molecular dynamics (AEMD). This methodology relies on the creation and exploitation of temperature transients. First we present the principles of AEMD in the case of bulk silicon. Then we determine the thermal conductivity of smooth nanowires versus diameter and length. We show that the temperature profiles do comply with the heat equation, and that the thermal conductivity saturates at long length. Afterwards we study nanostructuring effects by hollowing, and nanowires with rough surfaces. In this last case, we compare our results with an alternative simulation approach and investigate the relative importance of intrinsic and surface phonon scattering. Finally, we calculate the thermal conductivity of nanopatterned silicon membranes for thermoelectric devices. We show that to further decrease the thermal conductivity, it will be necessary to introduce other sources reduction than cylindrical hole etching, and AEMD will be the appropriate tool for an optimisation.

**Soutenance le 1<sup>er</sup> septembre 2017 à 10h00  
Amphi du LCI**