

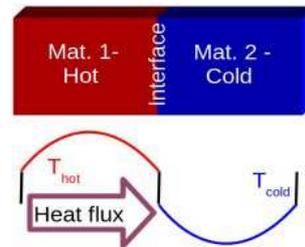
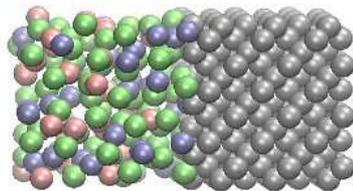


<b>Titre Thèse</b>	Calcul des résistances thermiques d'interface par dynamique moléculaire ab initio. Simulation of thermal interface resistances using first-principles molecular dynamics	
<b>(Co)-Directeur</b>	Evelyne LAMPIN	E-mail : evelyne.lampin@univ-lille.fr
<b>(Co)-Directeur</b>		E-mail :
<b>Laboratoire</b>	IEMN	Web : <a href="https://www.iemn.fr">https://www.iemn.fr</a>
<b>Equipe</b>	Physique/Namaste	Web : <a href="http://physique.iemn.univ-lille1.fr/en/namaste/">http://physique.iemn.univ-lille1.fr/en/namaste/</a>
	Contrat Doctoral Etablissement	Lille 1 <input type="checkbox"/> UVHC <input type="checkbox"/> ECL <input type="checkbox"/> ISEN-YNCREA <input type="checkbox"/>
<b>Financement prévu</b>	Président-Région <input type="checkbox"/>	Région – Autre <input type="checkbox"/> Préciser :
<b>Acquis</b> <input checked="" type="checkbox"/>	Président- Autre <input type="checkbox"/> Préciser	DGA – Autre <input type="checkbox"/> Préciser
	Contrat de recherche <input checked="" type="checkbox"/> Type ANR SIRENA	Autre <input type="checkbox"/>

### Résumé du sujet :

Lorsque deux matériaux sont mis en contact, le flux de chaleur se propage de l'un à l'autre avec plus ou moins d'efficacité suivant la résistance thermique de l'interface. Ainsi l'échauffement créé au coeur des nanodispositifs électroniques ou optiques sera plus ou moins facilement évacué, et les vitesse et durée de vie de nos ordinateurs, smartphones, éclairages, écrans, ... sera impactée. Il est donc très important de pouvoir prédire la valeur de cette résistance thermique. Dans le cadre du projet SIRENA (<http://physique.iemn.univ-lille1.fr/namaste/projets/anr-sirena/>) financé par l'Agence Nationale de la Recherche (ANR), nous proposons d'appliquer une méthodologie développée récemment pour calculer de manière efficace les caractéristiques thermiques d'un matériau décrit au niveau atomique. Différents systèmes seront étudiés, formés de semi-conducteurs, métaux, matériaux moléculaires et verres. Ils seront décrits par dynamique moléculaire ab initio.

La thèse s'adresse à un candidat ayant une formation en physique (physique statistique, mécanique quantique, physique du solide) et une expérience ou un intérêt pour les simulations sur ordinateurs. **Le financement de la thèse est acquis**, et la date de démarrage est fixée au 1<sup>er</sup> septembre 2018. Le candidat sera amené à interagir avec les différents partenaires du projet SIRENA.



### Abstract :

When two materials are in contact, the heat flow propagates from one to the other with more or less efficiency depending on the thermal resistance of the interface. Thus the heating created in the heart of electron- or opto-nanodevices will be more or less easily evacuated, and the speed and life of our computers, smartphones, lights, screens, ... will be impacted. It is therefore very important to be able to predict the value of this thermal resistance. As part of the SIRENA project (<http://physique.iemn.univ-lille1.fr/namaste/projets/anr-sirena/>) funded by the National Agency for Research (ANR), we propose to apply a methodology recently developed to efficiently calculate the thermal characteristics of a material described at the atomic level. Different systems will be studied, formed of semiconductors, metals, molecular materials and glasses. They will be described by first-principles molecular dynamics.

The thesis is for a candidate with a background in physics (statistical physics, quantum mechanics, solid state physics) and experience or interest in computer simulations. **Funding for the thesis is secured**, and the start date is 1 September 2018. The candidate will interact with the various partners of the SIRENA project.