



<b>Titre Thèse</b>	Optimisation des propriétés thermiques et rhéologiques de dispersions de nanoparticules pour évacuation de la chaleur		
<b>(Co)-Directeur</b>	Evelyne Lampin	E-mail : evelyne.lampin@univ-lille1.fr	
<b>(Co)-Directeur</b>		E-mail :	
<b>Laboratoire</b>	IEMN	Web :	
<b>Equipe</b>	Physique/SDYNA	Web :	
	Contrat Doctoral Etablissement	Lille 1 <input checked="" type="checkbox"/>	UVHC <input type="checkbox"/> ECL <input type="checkbox"/> ISEN <input type="checkbox"/>
<b>Financement prévu</b>	Président-Région <input type="checkbox"/>	Région – Autre <input type="checkbox"/>	Préciser :
<b>Acquis</b> <input type="checkbox"/>	Président- Autre <input type="checkbox"/>	Préciser	DGA – Autre <input type="checkbox"/> Préciser
	Contrat de recherche <input type="checkbox"/>	Type	Autre <input checked="" type="checkbox"/>

Co-encadrant : Pier Luca PALLA (pier-luca.palla@univ-lille1.fr)

### Résumé du sujet :

L'augmentation rapide des densités de puissance en microélectronique rend cruciale la recherche de matériaux efficaces pour évacuer la chaleur. L'utilisation de dispersions de nanoparticules peut augmenter considérablement les performances de systèmes de refroidissement par circulation et par piègeage de chaleur en face arrière.

Dans le premier cas, des nanofluides (suspensions colloïdales de nanoparticules solides) sont considérées comme des matériaux très prometteurs [1]. Ils présentent, d'une manière inattendue, une conductivité thermique élevée déjà à faible fraction volumique de nanoparticules. Cette augmentation a été expliquée de manière théorique par une aggrégation linéaire des particules [2]. Toutefois, l'aggrégation augmente également la viscosité du fluide et limite sa capacité à circuler dans le système de refroidissement.

En ce qui concerne la dissipation par piègeage de chaleur en face arrière, une amélioration des performances est obtenue en travaillant sur les matériaux thermiques d'interface. Dans ce but, on utilise des pâtes isolantes électriquement mais conductives thermiquement. Il a été montré [3] que la conductivité de ces pâtes thermiques peut être augmentée par des inclusions nanostructurées, comme des nanotubes de carbone ou des lamelles de graphène. Dans ce cas également, l'inconvénient est que la viscosité augmente avec la charge en inclusions. Cela s'accompagne d'une baisse de malléabilité et donc de capacité à remplir les trous d'air entre le radiateur et le dispositif.

Il s'ensuit que le lien entre l'augmentation de la dissipation thermique et la dégradation des propriétés rhéologiques est l'une des principales limites à l'application des dispersions de nanoparticules à l'évacuation de la chaleur.

La dynamique moléculaire est une méthode théorique largement utilisée pour étudier les propriétés de transport d'agrégats atomiques. La conductivité thermique, la viscosité ou viscoélasticité sont des propriétés typiquement étudiées avec cette technique pour un large spectre de composés moléculaires et de structures. La méthode permet d'apporter la vision à l'échelle nano des mécanismes en jeu.

Dans ce projet, la dynamique moléculaire sera tout d'abord appliquée à l'étude de la conductivité thermique et de la viscosité de nanofluides composés de particules à base de carbone et de silicium dispersées dans l'eau en fonction de leur fraction volumique et de leur taille. Le comportement macroscopique obtenu sera corrélé aux détails de l'aggrégation et au final aux propriétés de l'interaction solide-fluide. Dans un deuxième temps, les connaissances obtenues par la première étude serviront de guide pour comprendre le rôle de l'aggrégation de nanoparticules dans la pâte thermique. Dans ce cas, une matrice polymère sera introduite et le degré de polymérisation sera considéré comme paramètre supplémentaire pour l'optimisation des propriétés thermiques et rhéologiques.

Le projet bénéficiera de l'expérience en dynamique moléculaire du groupe SDYNA à la fois sur le transport thermique à la nanoéchelle [4] et en rhéologie [5]. Par ailleurs, le projet s'intègre tout à fait dans le contexte de l'IEMN de part l'intérêt pour les applications microélectroniques et la montée en puissance des expériences de thermique dans le laboratoire.

## Abstract

### Optimization of the thermal and rheological properties in nanoparticle dispersions for heat removal

Rapidly increasing of the power density in micro-electronics made efficient heat removal a crucial issue. As a matter of fact, the performances of both flow based cooling systems and back-end heat sink can be largely increased exploiting the transport properties of nanoparticle dispersions.

In the first case nanofluids (colloidal suspensions of solid nanoparticles) are considered as very promising materials [1]. They show an unexpected and dramatic thermal conductivity enhancement also at low nanoparticle volume fraction. This increase has been theoretically explained by accounting for linear particle aggregation [2]. But, on the other hand, particle aggregation also increases fluid viscosity limiting the capability of nanofluids to flow into the cooling systems.

Regarding the back-end heat sink an improvement of the performances is obtained by improving the efficiency of the thermal interface material. To this aim adhesive compounds with electrically insulating, but thermally conductive fillers are exploited.

It has been proved [3] that the conductivity of these thermal pastes can be enhanced by nanostructured fillers such as e.g. carbon nanotubes or graphene flakes. Also in this case the drawback is the increasing of the material viscosity with the filler loading. This is accompanied by a decrease in workability and therefore in capability of filling air gaps between the heat sink and the heat source on the device.

It follows that the interplay between thermal dissipation enhancement and the corresponding degradation of the rheological properties is one of the main limits in the application of nanotechnology to heat removal.

Molecular Dynamics is a theoretical method largely adopted to study transport properties of atomic aggregates in different states. Thermal conductivity, viscosity or viscoelasticity are in fact the typical properties achievable by this technique for a large spectra of molecular compounds and structures. At the same time the results of the calculations can be interpreted by the meaningful insight of the nanoscale mechanisms revealed by the simulations.

In this project, Molecular Dynamics will be firstly applied to the study of the thermal conductivity and of the viscosity of nanofluids composed by carbon and silicon based nanoparticles dispersed in water as a function of their volume fraction and size. The obtained macroscopic behavior will be correlated to the details of the aggregation and finally to the properties of the solid-fluid interaction.

At a later stage the physical insight obtained by the first study will be adopted as guideline to understand the role of nanoparticle aggregation in thermal paste. In this case a polymer matrix will be introduced and the degree of polymerization will be considered as an additional parameter for the optimization of the thermal and rheological properties.

The project will take profit from the experience of SDYNA group in both nanoscale thermal transport [4] and rheology [5] via Molecular Dynamics. Moreover the IEMN context, where an increasing number of experimental groups are actually working on thermal transport, will allow a crucial connection with experiments and micro-electronics applications both to drive the work and to apply the obtained theoretical results.

[1] J.A. Eastman, S.R. Phillpot, S.U.S. Choi, P. Keblinski, Annual Review of Materials Research Vol. 34: 219-246, (2004).

[2] P. Keblinsky, R. Prasher, J. Eapen, Journal of Nanoparticle Research, October 2008, Volume 10, Issue 7 pp 1089-1097.

[3] A. A. Balandin, Nature Materials 10, 569-581 (2011)

[4] E. Lampin, P.-L. Palla, P.-A. Francioso, F. Cleri, Journal of Appl. Phys. (2013)

[5] P.-L. Palla, C. Pierleoni, and G. Ciccotti, Physical Review E 78, 021204 (2008)