

# CONDUCTIVITE THERMIQUE DE NANOSTRUCTURES DE SILICIUM

Patrice CHANTRENNE, Sylvain LALLICH  
Xavier BLASE, Jean-Louis BARRAT  
Julian GALE



Centre de Thermique de Lyon  
UMR CNRS 5008



Laboratoire de Physique de la Matière  
Condensée et Nanostructure  
UMR CNRS 5586



Nanochemistry  
Research  
Institute



# ORGANISATION DE LA PRESENTATION

## I. Contexte de l'étude

## II. Modèle analytique

### II.1. Description

### II.2. Mise en œuvre

## III. Prédiction de la conductivité thermique

### III.1. Nanofils de silicium

### III.2. Nanofilms de silicium

### III.3. Silicium nanoporeux

# I. CONTEXTE DE L'ETUDE

UTILISATION DE NANOSTRUCTURES

électronique      stockage de l'information  
super isolants    conversion de l'énergie  
écrans plats      composites structuraux

FIABILITE DES NANOSYSTEMES

thermique des nanocomposants

# I. CONTEXTE DE L'ETUDE

Conductivité thermique  
à l'échelle  
submicronique



Mesures délicates  
et peu courantes

Prédictions  
nécessaires



Validation à partir de  
mesures expérimentales

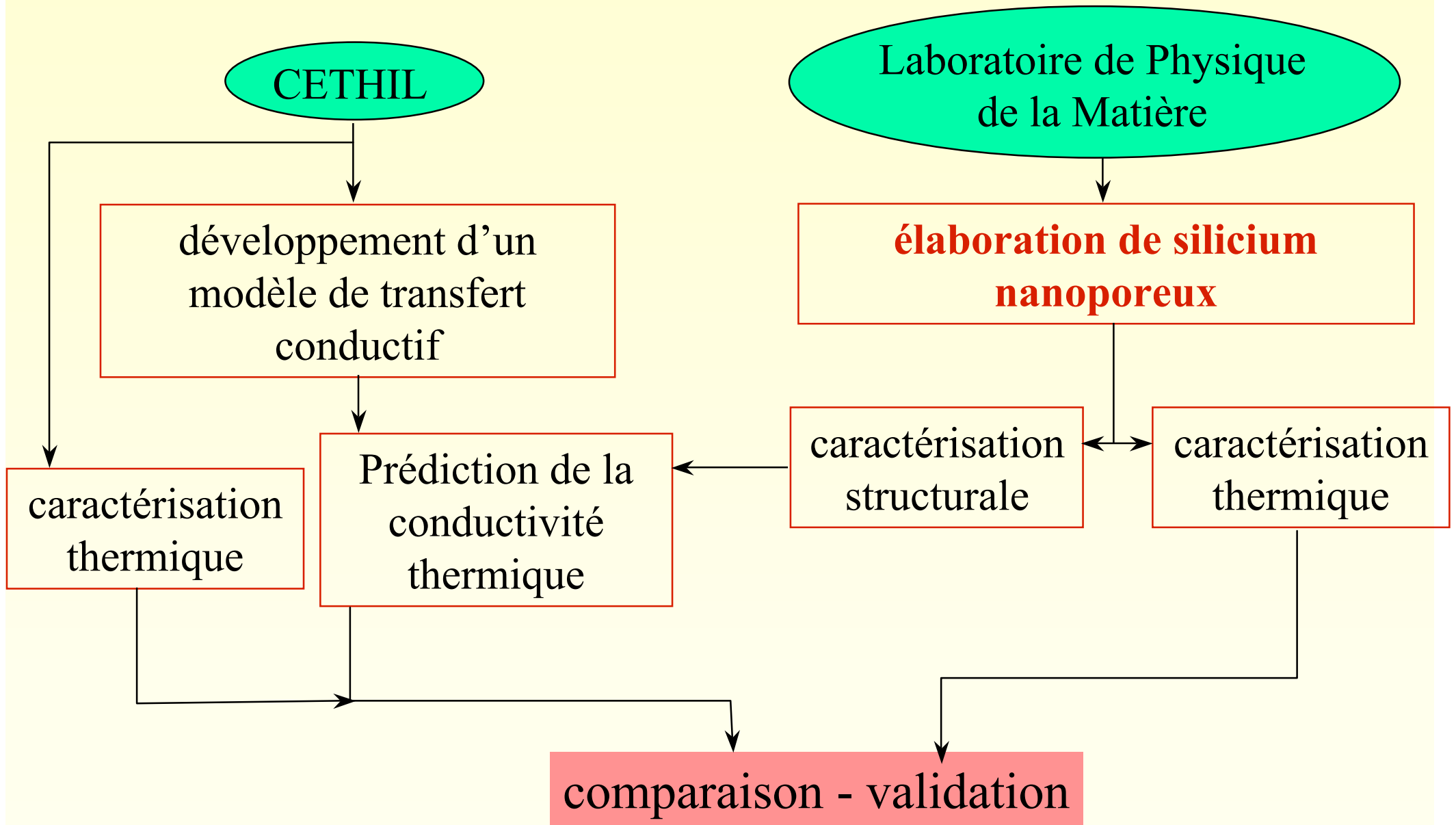


**MODELE SEMI  
ANALYTIQUE**  
matériaux diélectriques



**NANOSTRUCTURES  
DE SILICIUM**  
nanofilm et nanofils

# I. CONTEXTE DE L'ETUDE



## II.1. MODELE ANALYTIQUE - DESCRIPTION

Porteurs de chaleur dans les matériaux diélectriques

**PHONON**

Modes de vibrations du réseau atomique dont l'énergie est  $\hbar$

Hypothèse du solide harmonique

Décomposition des vibrations sur une base d'ondes progressives

vecteur d'onde **K**, polarisation **p**, courbes de dispersion  $(\mathbf{K}, \mathbf{p})$

nombre de phonons par mode de vibration  $\frac{1}{e^{\hbar / k_b T} + 1}$

anharmonicité du réseau : temps de relaxation

interaction phonon-phonon  $\text{ph-ph}$

## II.1. MODELE ANALYTIQUE - DESCRIPTION

### Théorie cinétique des gaz

$$c_x(K, p) = C(K, p) v^2(K, p) \cos^2(\theta_{K,x})$$

Conductivité thermique totale = somme des conductivités thermiques  $c_x(K, p)$

$$k_x = \int_0^\infty C(K, p) v^2(K, p) \cos^2(\theta_{K,x}) dK$$

$$C(K, p) = k_b \frac{e^{-x}}{v (e^x - 1)}$$

$$\frac{1}{k(K, p)} = \frac{1}{k_{ph}(K, p)} + \frac{1}{k_{CL}(K, p)} + \frac{1}{k_D(K, p)}$$

$$x = \frac{h v(K, p)}{k_b T}$$

$$\frac{1}{k_u(K, p)} = \frac{A}{T} \exp\left(\frac{B}{T}\right) \quad \frac{1}{k_D(K, p)} = D$$

$$v = \frac{d v(K, p)}{dK}$$

$$\frac{1}{k_{CL}(K, p)} = \frac{v(K, p)}{F \cdot d(K)}$$

## II.2. MODELE ANALYTIQUE - MISE EN OEUVRE

### Calcul de la conductivité thermique

#### Détermination préalable des

- modes de vibration
- courbes de dispersion
- paramètres du temps de relaxation

#### Hypothèse

propriétés vibratoires du réseau atomique dans les nanostructures

=

propriétés vibratoires du réseau atomique du matériau macroscopique



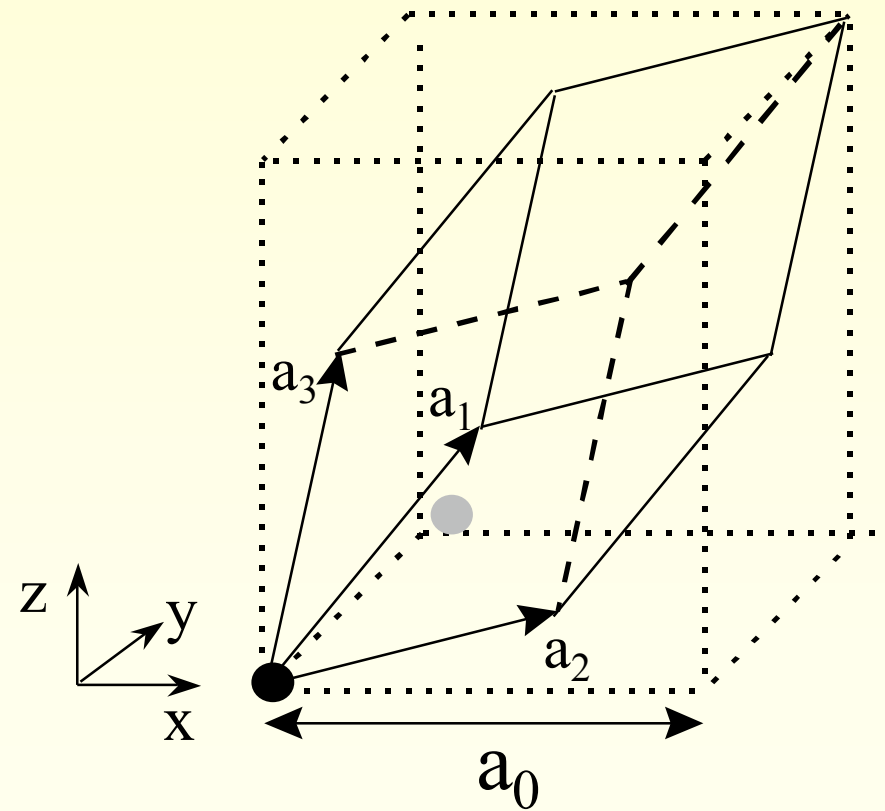
## II.2. MODELE ANALYTIQUE - MISE EN OEUVRE

### Structure silicium

#### Dans l'espace réel

diamant = superposition de deux réseaux CFC décalés de  $a_0/4$  dans les directions x, y et z

cellule élémentaire contenant deux atomes



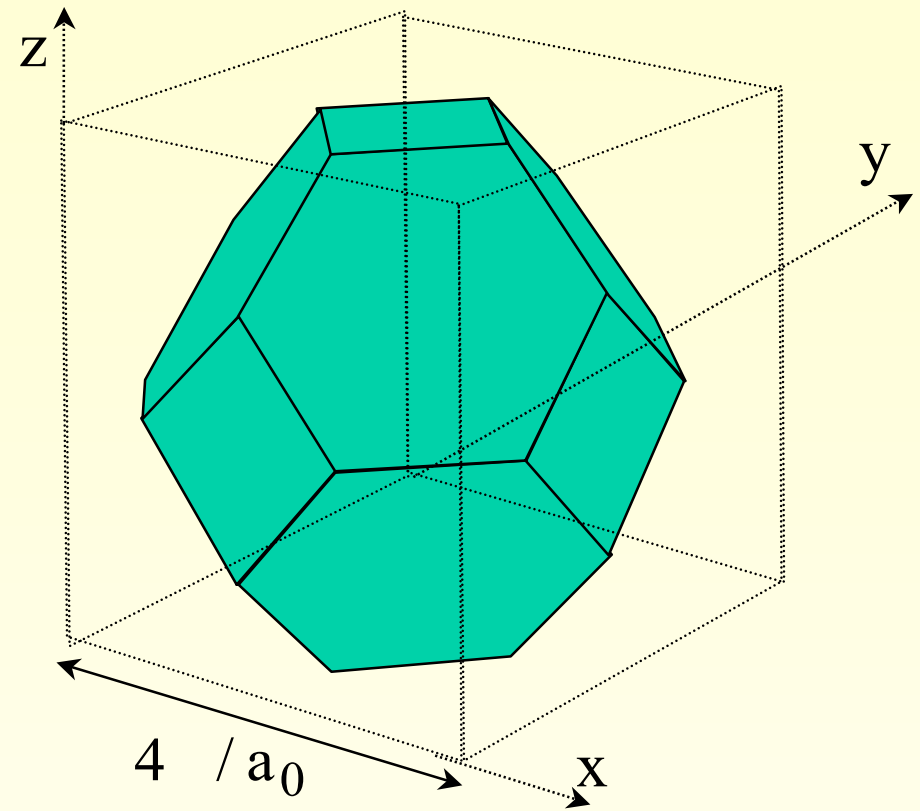
$$a_0 = 0.543 \text{ nm}$$

## II.2. MODELE ANALYTIQUE - MISE EN OEUVRE

### Modes de vibrations

#### Dans l'espace réciproque

- $K$  = combinaison linéaire de  $b_1, b_2, b_3$
- $K$  appartient à la première zone de brillouin
- Nombre de mode  $K$  : nombre de cellule élémentaire
- Nombre de polarisation  $p = 6$



$$b_1 = \frac{1}{a_0} (i + j - k)$$

$$b_2 = \frac{1}{a_0} (-i + j + k)$$

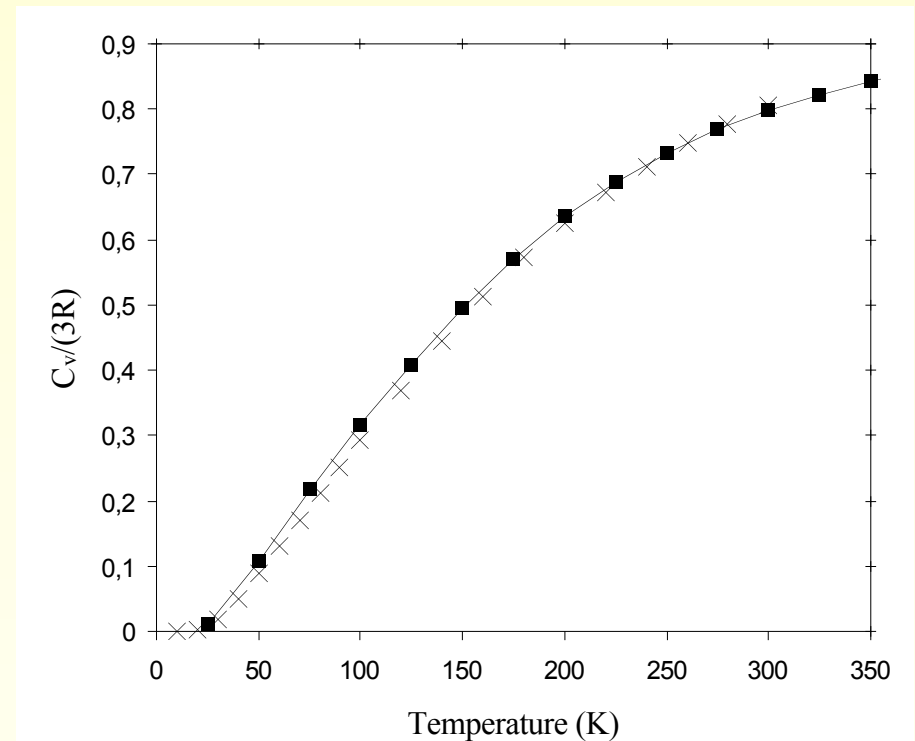
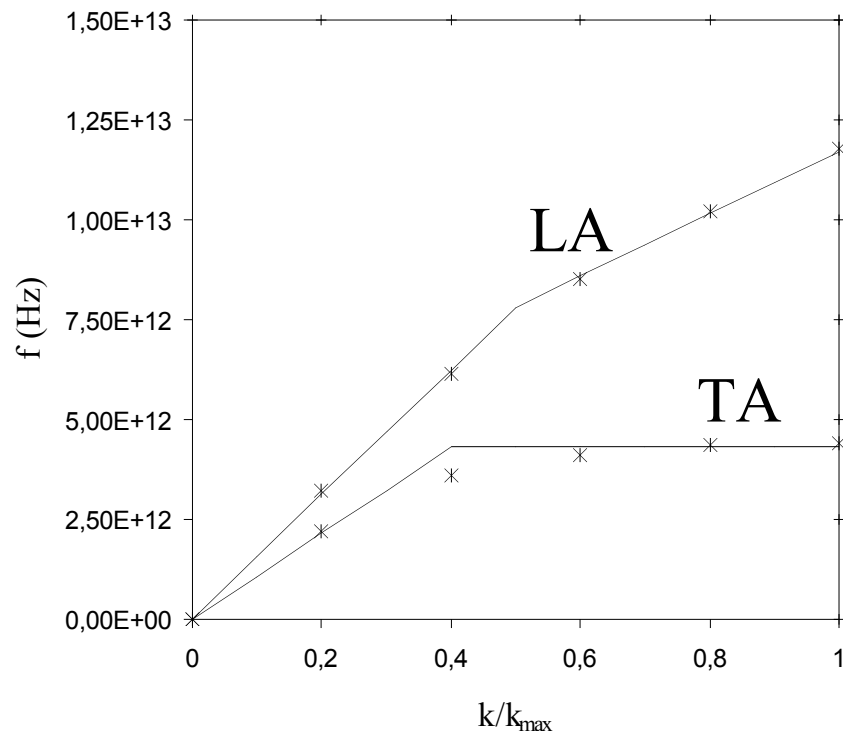
$$b_3 = \frac{1}{a_0} (i - j + k)$$

## II.2. MODELE ANALYTIQUE - MISE EN OEUVRE

### Courbes de dispersion

Fit des courbes de dispersion experimentales

Utilisation des courbes de dispersion dans la direction  $[1,0,0]$



B.N. Brockhouse, P.R.L. 2, 256 (1959)  
S. Wei et M.Y. Chou, PRB, 50, 2221 (1994)

P. Flubacher et al., Philos. Mag, 4,273 (1959)

contribution des modes optiques négligeable pour  $T < 1000$  K

## II.2. MODELE ANALYTIQUE - MISE EN OEUVRE

### Paramètres du temps de relaxation

Identification afin de fitter la conductivité expérimentale d'un cristal de silicium de dimension  $L = 7,16 \text{ mm}$

$$\frac{1}{\kappa_u(K,p)} = \frac{A}{T} \exp\left(\frac{B}{T}\right) \quad \frac{1}{\kappa_{CL}(K,p)} = \frac{v(K,p)}{F \cdot d(K)} \quad \frac{1}{D(K,p)} = D^{-4}$$

mode transverse

$$A = 7 \cdot 10^{-13}$$

$$B = 0$$

$$= 1$$

$$= 4$$

mode longitudinal

$$A = 3 \cdot 10^{-21}$$

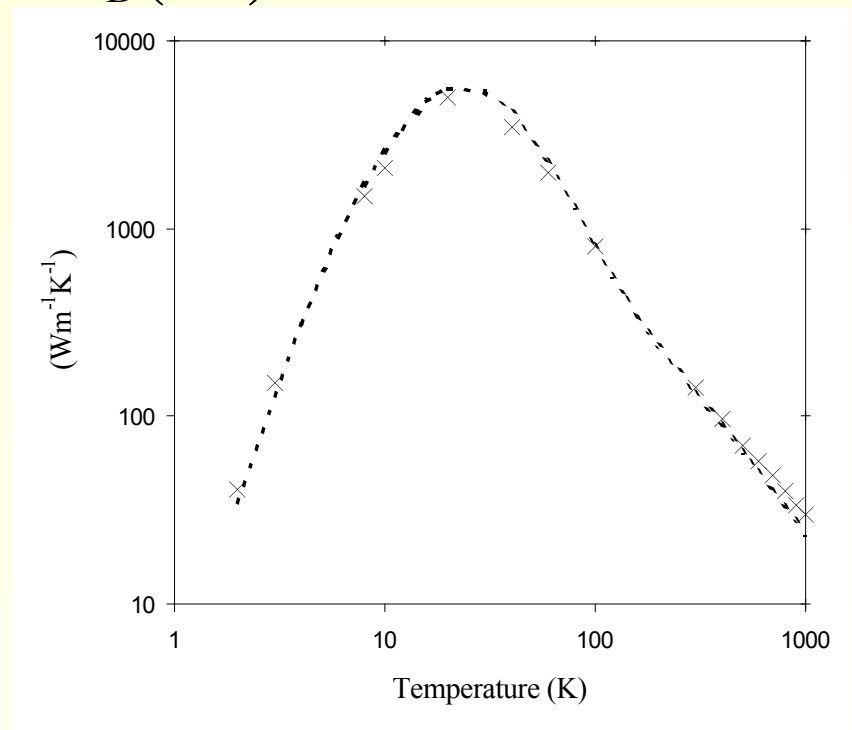
$$B = 0$$

$$= 2$$

$$= 1.5$$

$$F = 0.55$$

$$D = 1.32 \cdot 10^{-45} \text{ s}^{-3}$$



M.G. Holland, PR, 132, 2461 (1963)

# III.1. NANOFILS DE SILICIUM

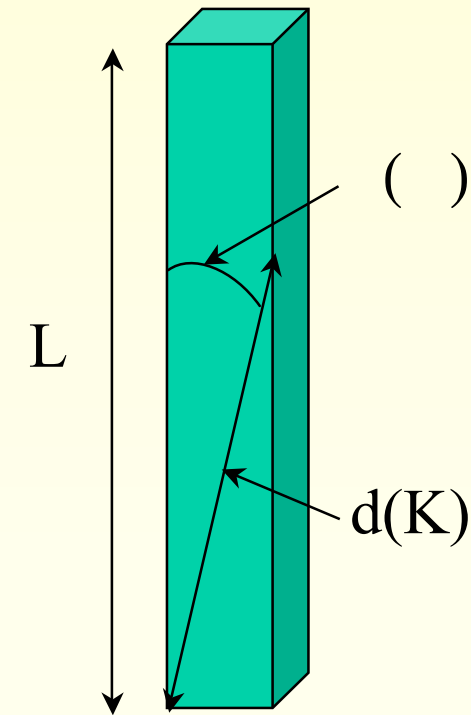
Prédiction en utilisant les paramètres du Si macroscopique

**Paramètres spécifiques au fil**

longueur :  $L = 2 \mu\text{m} \implies 5209$  cellules dans la direction  $a_1$

<u>dimension</u> <u>caractéristique</u> <u>de la section</u>	<u>nombre de cellules</u> <u>dans les directions</u> <u><math>a_2</math> et <math>a_3</math></u>
22 nm	68
37 nm	115
56 nm	173
115 nm	356

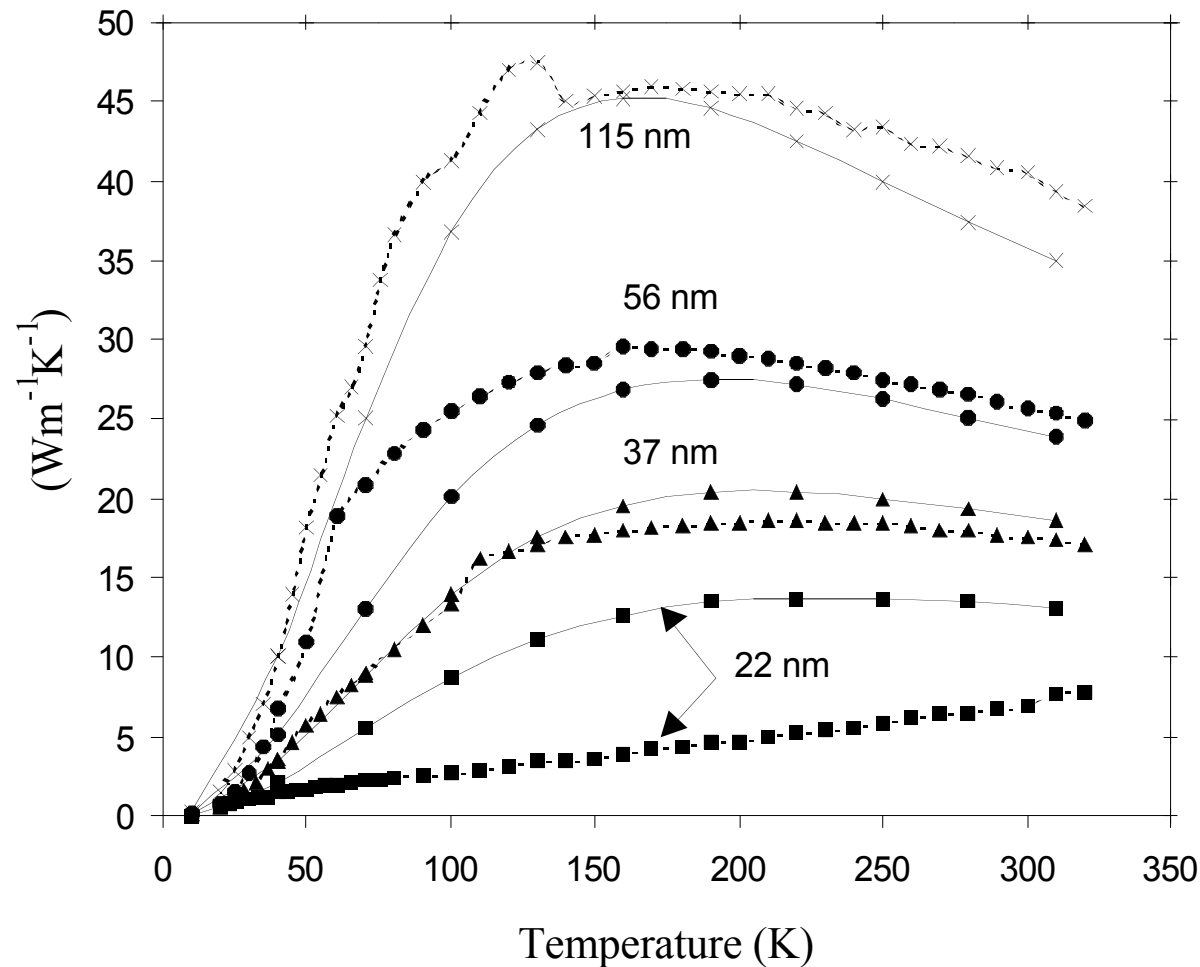
calcul de  $d(K)$



$$\frac{1}{c_L(K, p)} = \frac{v(K, p)}{F \cdot d(K)}$$

# III.1. NANOFILS DE SILICIUM

## Conductivité thermique dans la direction principale du fil



Bon accord entre mesures et prédictions sauf pour fil de section 22 nm

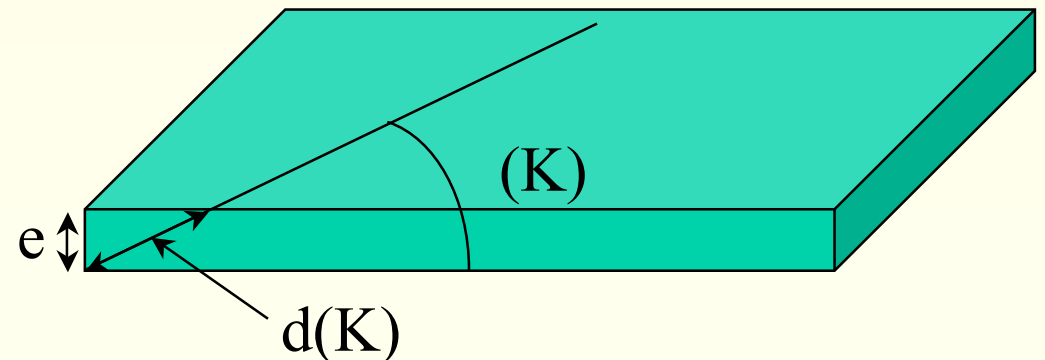
D. Li, et al., A.P.L, 83, 2934 (2003)

## III.2. NANOFILM DE SILICIUM

Prédiction en utilisant les paramètres du Si macroscopique

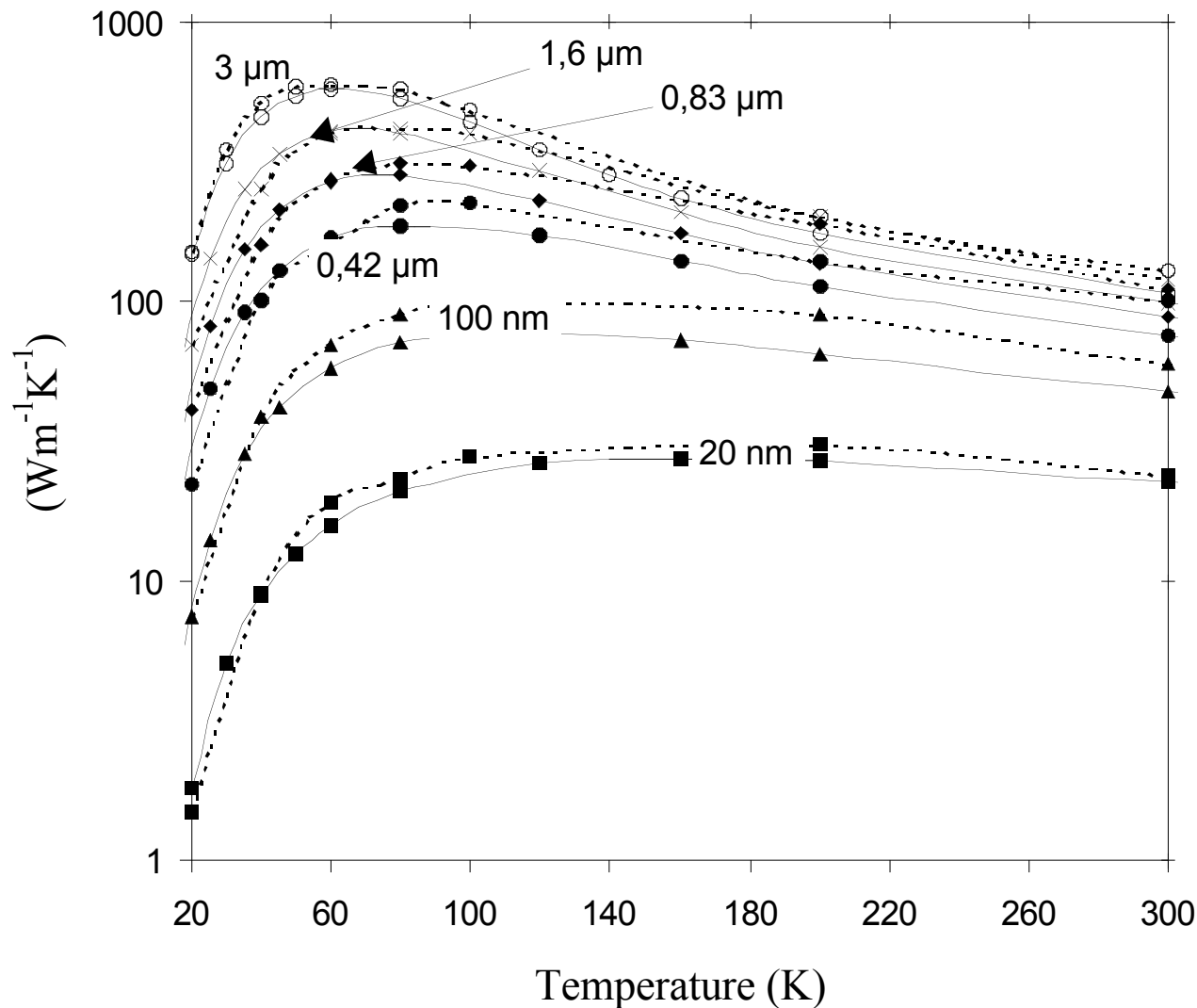
Paramètres spécifiques au film

<u>épaisseur du film</u>	<u>nombre de cellules dans la direction <math>a_1</math></u>	<u>Nombre de cellules dans les deux autres directions :</u>
20 nm	90	2400 pour 20 nm
100 nm	451	700 pour 100 et 420 nm
420 nm	1895	300 pour les autres
830 nm	3744	
1,6 $\mu\text{m}$	7217	
3 $\mu\text{m}$	13533	



## III.2. NANOFILM DE SILICIUM

### Conductivité thermique dans le plan du film



Bon accord entre mesures  
et prédictions

M. Asheghi et al., ASMEJHT, 120, 30 (1998)  
W.Liu et al., submitted to JHT  
M.Z. Bazant, PRB, 56, 8542 (1997)

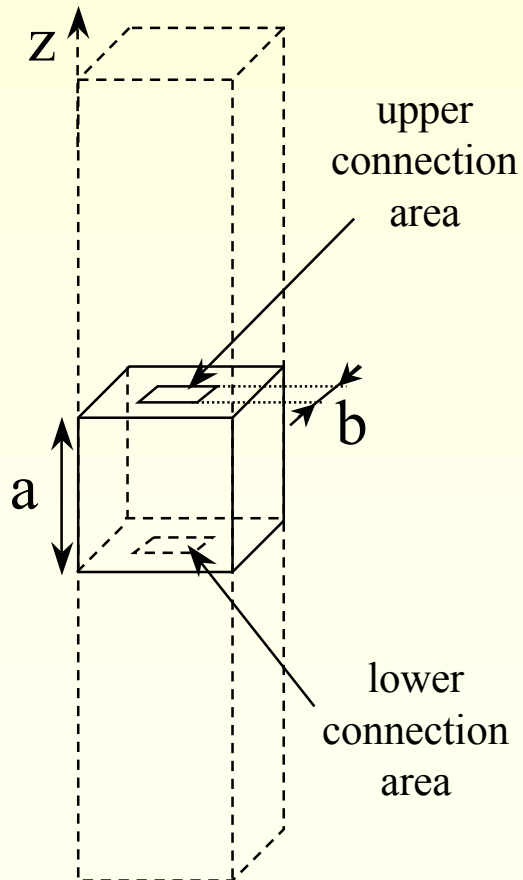


# III.3. SILICIUM NANOPOREUX

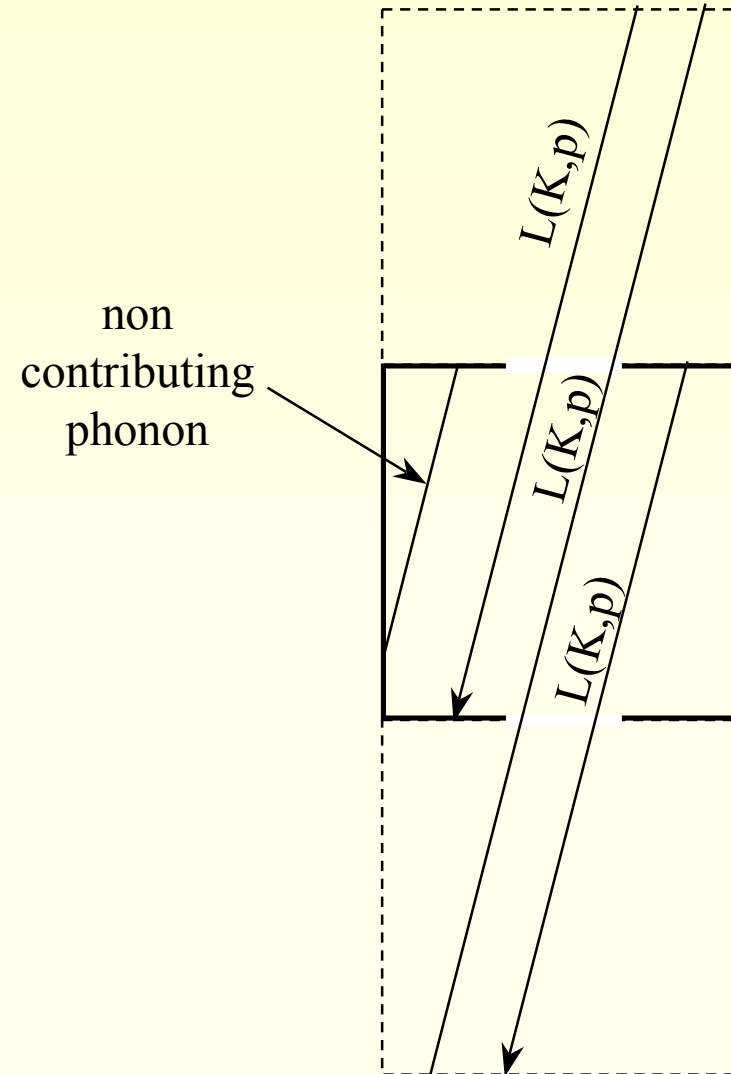
## Modélisation géométrique

Silicium nanoporeux = assemblage de cristallites colonnaires

Cristallite = superposition de nanoparticules connectées



## Modélisation physique



### III.3. SILICIUM NANOPOREUX

#### Critère de transmission d'une cristallite à l'autre

Hyp. 1 (courbes en trait plein) :

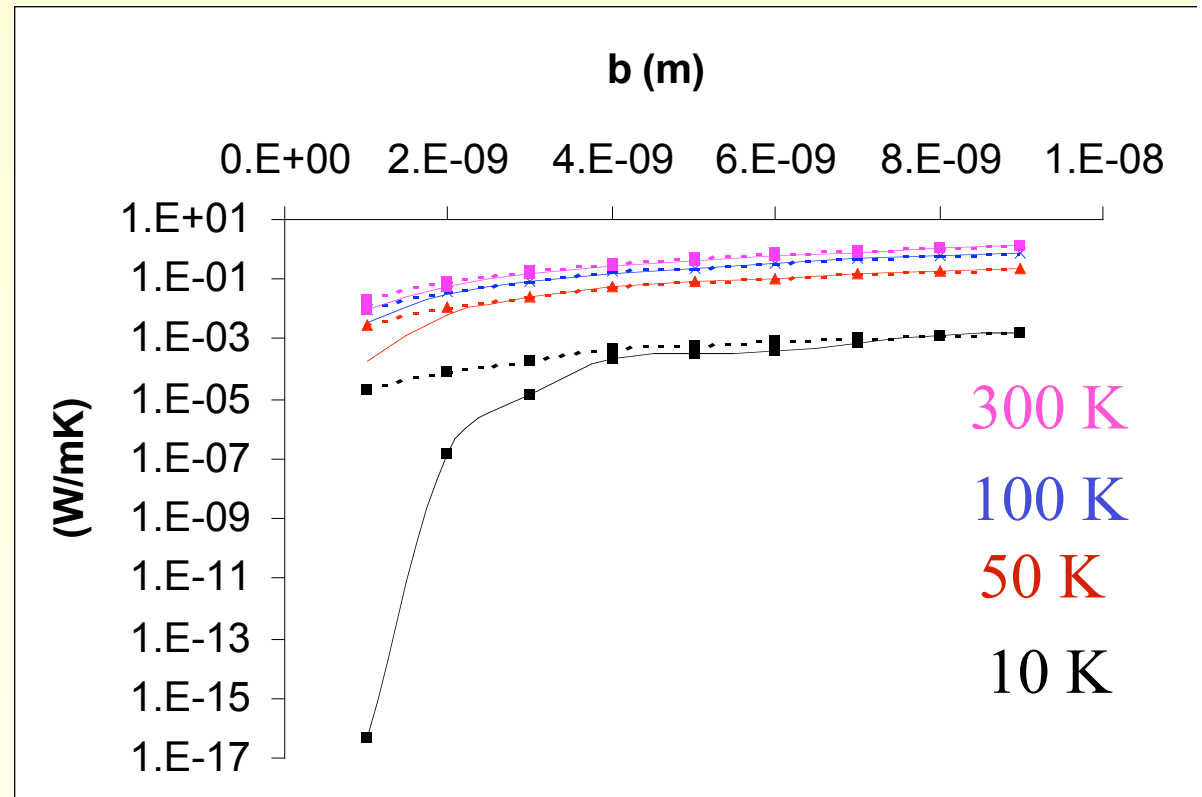
$w_1 < b$  : transmission totale

$w_1 > b$  : pas de transmission

Hyp. 2 (courbes en pointillés)

transmission totale quelque soit la  $w_1$

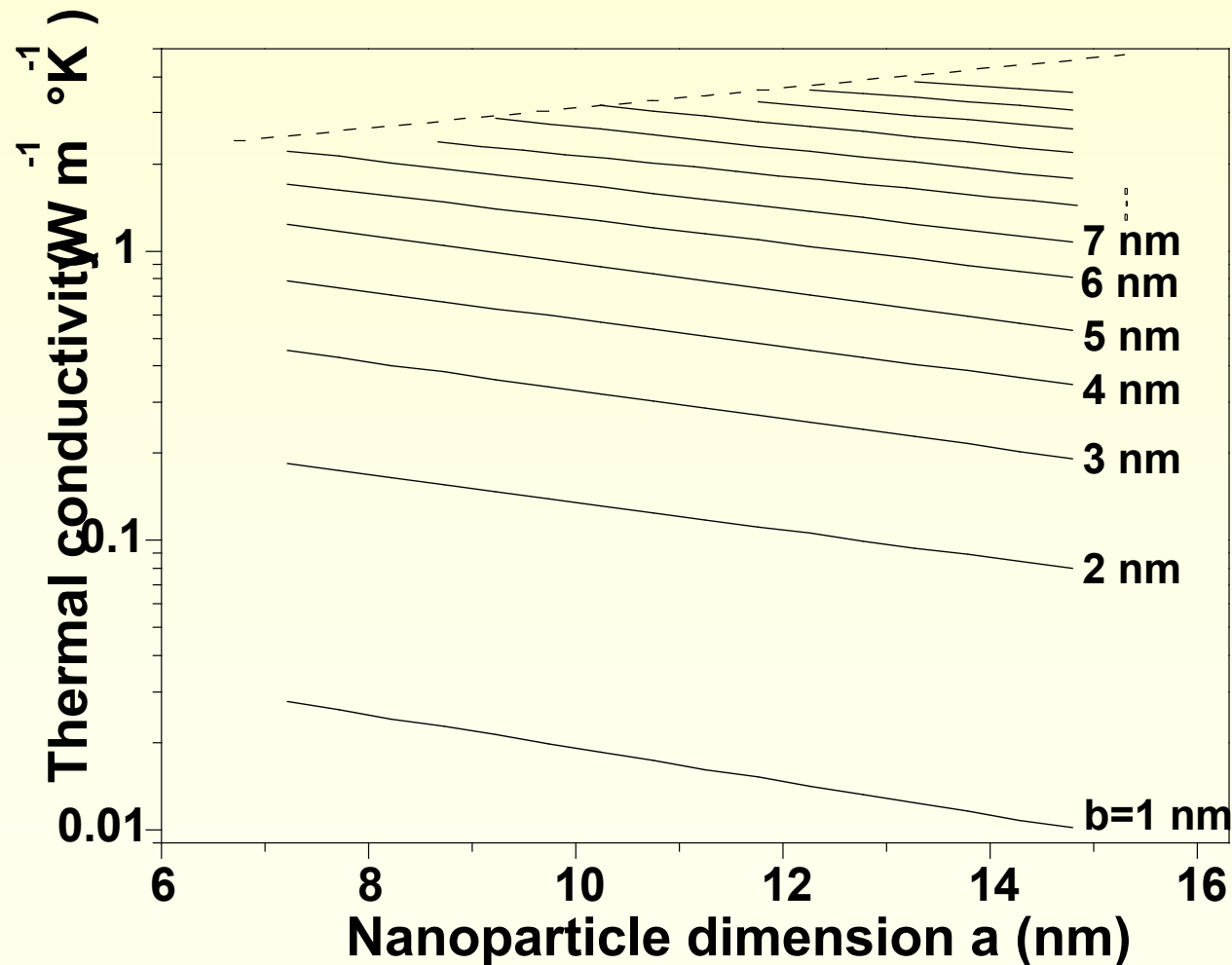
$$w_1 = v_2 /$$



$$a = 10,9 \text{ nm}$$

### III.3. SILICIUM NANOPOREUX

conductivity thermique d'une cristallite d'une hauteur de quelques  $\mu\text{m}$  à 300 K, cas Hyp. 1



### III.3. SILICIUM NANOPOREUX

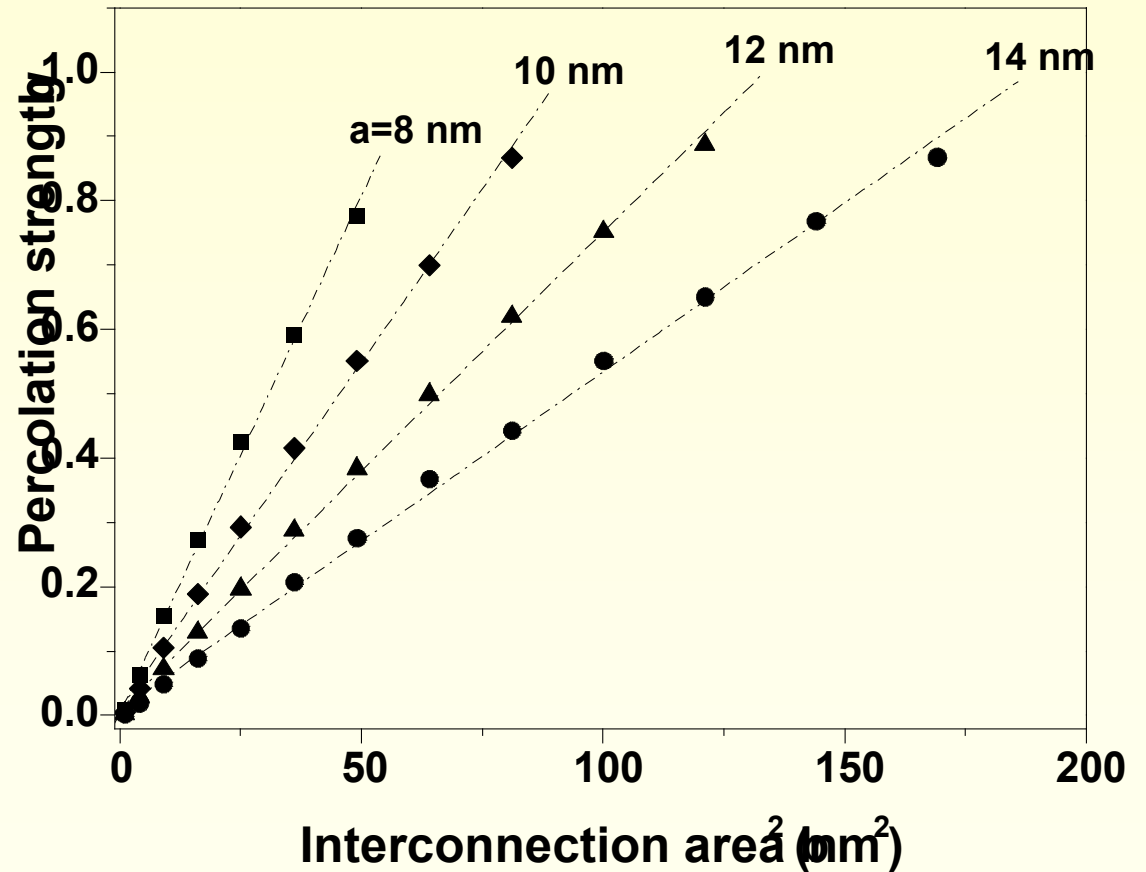
#### Conductivité thermique du silicium nanoporeux

Théorie de la percolation

$$C = f l g$$

Modèle résistif série-parallèle

$$PS = C(1 - p)$$

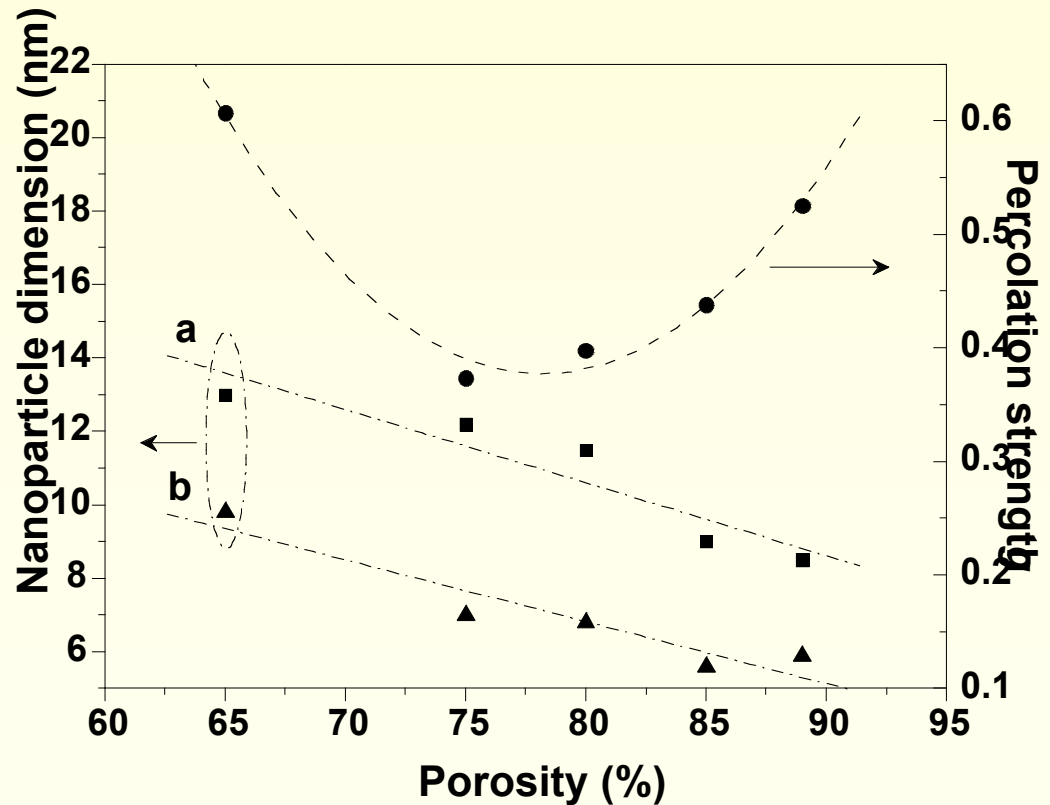


# III.3. SILICIUM NANOPOREUX

Porosity  $P$  (%) Crystallites dimension  $a$  (nm) Thermal conductivity  $k^{meso-PS}$  ( $\text{W m}^{-1} \text{K}^{-1}$ ) 65 130.85751

$$PS = C(1 - p)$$

$$C = \frac{f_{sil}}{g}$$



# IV. CONCLUSIONS

## Etat actuel

Prédiction de la conductivité thermique de cristallite de silicium colonnaire

Détermination de paramètres de structure et de percolation

## Objectifs

Modification du modèle

→ Conductivité thermique du matériau nanoporeux

→ Validation de la relation  $\rho_S = c(1 - p)$