

## DIPLÔME NATIONAL DE DOCTORAT

(Arrêté du 25 mai 2016)

Date de la soutenance : **05 novembre 2024**

Nom de famille et prénom de l'auteur : **Monsieur Michael DE SAN FELICIANO**

Titre de la thèse : contributions phononique et électronique du transfert de chaleur aux jonctions métal-semiconducteur

### Résumé



Avec la miniaturisation croissante des composants électroniques, et en particulier des semi-conducteurs, la compréhension du transport thermique aux interfaces est devenue un véritable enjeu pour optimiser la gestion de la chaleur. Dans ce contexte, nous avons exploré à l'aide de calculs atomistiques de premiers principes les mécanismes de transport à l'interface entre un métal (platine, aluminium et or) et un semi-conducteur (silicium). Il est reconnu depuis longtemps qu'aux interfaces métal/semi-conducteur, les électrons du métal peuvent participer au transfert de chaleur interfacial. Cependant, l'existence d'un couplage direct électron/phonon a été débattu dans la littérature, et de nombreux auteurs pensent encore que le transfert de chaleur interfacial n'est conduit que par le couplage entre phonons. En parallèle, des expériences récentes ont montré que la conductance thermique interfaciale peut être améliorée en dopant le semi-conducteur. Dans ce contexte, l'objectif de cette thèse est double : 1) Étudier si un couplage électron-phonon peut exister aux interfaces métal/semiconducteur 2) Étudier si un couplage électron-électron direct peut être ouvert aux interfaces métal/semiconducteur dopées et étudier l'impact de la polarisation de l'interface. Dans notre travail, nous développons d'abord un nouveau formalisme pour prendre en compte les corrections hors équilibre dans le calcul de la conductance phononique interfaciale basée sur les fonctions de Green hors équilibre (NEGF). Ces corrections s'avèrent non négligeables pour le transport de chaleur aux interfaces. Nous comparons nos résultats numériques obtenus par NEGF aux données expérimentales disponibles. Pour certains systèmes, comme Au/Si, le couplage phonon-phonon

fournit une bonne description du transfert de chaleur interfacial. Dans ces systèmes, un couplage électron-phonon direct a un impact mineur. Au contraire, pour d'autres systèmes, comme Al/Si, les calculs NEGF sous-estiment la conductance thermique expérimentale, en particulier à basse température. Ces écarts relatifs sont une signature, selon notre interprétation, de l'existence d'un couplage direct électron-phonon à l'interface. Pour étayer cette interprétation, nous avons calculé l'amplitude du potentiel de déformation impliqué dans la conductance électron-phonon. Cette analyse suggère que les différences de densité d'états phononiques à des fréquences intermédiaires entre les interfaces sont essentielles à l'amplitude du couplage direct entre électrons et phonons. Nous avons également montré que le dopage du semi-conducteur est une stratégie prometteuse pour améliorer le transport de chaleur aux interfaces grâce à un couplage électronique. Tout d'abord, nous montrons que le dopage, qu'il soit de type n ou p, tend à augmenter la conductance interfaciale phononique. Ensuite, nous démontrons que le dopage a un effet plus spectaculaire sur la conductance interfaciale électronique, c'est-à-dire le flux de chaleur transporté par les électrons à travers l'interface. L'augmentation relative de la conductance est particulièrement élevée dans le cas du dopage p, bien que pour le dopage n, l'augmentation ne soit pas faible. Nos calculs révèlent également que des niveaux de conductance thermique encore plus élevés peuvent être obtenus en polarisant l'interface. Nous discutons également des changements de la réponse thermoélectrique de l'interface en fonction de la tension appliquée.

**Mots-clés :** transport thermique, interface, modélisation,