

# Conductance thermique d'un fil entre deux réservoirs de température.

Karl JOULAIN<sup>1\*</sup>

<sup>1</sup>Laboratoire d'études thermiques. Université de Poitiers et ENSMA. 40, avenue du Recteur Pineau, 86022 Poitiers Cedex

\* (auteur correspondant : karl.joulain@univ-poitiers.fr)

**Résumé** - Nous calculons dans ce travail la résistance thermique d'un fil entre deux réservoirs de température représentés par des substrats thermalisés à leur température d'équilibre respective. Nous considérons un fil de section carrée et constante. Nous montrons que si la section est plus petite qu'une certaine section critique dépendant de la température, la conductance entre les réservoirs est proche de celle prédite dans les fils de longueur infinie à savoir du « quantum » de conductance. La correction à cette valeur dépend des coefficients de réflexion et de transmission entre les modes (phonons) du fil et ceux du substrat. Lorsque la section du fil est plus grande que la section critique, on retrouve une valeur pour la conductance proche de celle issue des calculs de transfert en régime balistique.

## Nomenclature

$c$	Vitesse des phonons, $m.s^{-1}$	$t_{ij}$	Coefficient de transmission entre $i$ et $j$
$h$	Constante de Planck	$r_{ij}$	Coefficient de réflexion entre $i$ et $j$
$k$	vecteur d', $m^{-1}$	$T$	température, $K$
$k_b$	Constante de Blotzmann	<i>Symboles grecs</i>	
$l$	largeur du fil, $m$	$\omega$	Pulsation, $rad.s^{-1}$
$l_c$	largeur critique du fil, $m$	$\phi$	Flux, $W$
$S$	Section du fil, $m^2$	<i>Indices et exposants</i>	
$N$	Nombre de modes	$w$	fil

## 1. Introduction

Les nanofils ont suscité un intérêt important en raison de leur faible conductivité thermique pouvant être associée à une forte conductivité électrique. Cette propriété en fait de bons matériaux entrant dans l'élaboration de bons générateurs utilisant la conversion d'énergie thermoélectrique [1].

Dans les cristaux semi-conducteurs, le transfert de chaleur s'effectue par les modes de vibrations de la structure (modes optiques et acoustiques). Lorsque la structure de ces modes est proche de celle du matériau massif, on montre que la conductivité du fil est essentiellement dominée par le diamètre du fil [2]. Pour des diamètres de fil très faibles, les modes de vibrations mis en jeu sont très différents de ceux du matériau massif [3]. Ce sont essentiellement des modes acoustiques guidés dans la structure ayant une structure monodimensionnelle. À basse température, il se peut que seuls les modes de plus basse fréquence soient peuplés. La conductance thermique du fil dépend alors du nombre de modes excités et de la température par l'intermédiaire d'une quantité appelée un peu abusivement « quantum de conductance » [4].

Dans un système réel, un nanofil relie toujours deux corps macroscopiques qui peuvent être par exemple des réservoirs de phonons en équilibre à une certaine température. En 2000, l'équipe de Roukes a publié des résultats se présentant comme la mise en évidence du quantum de conductance d'un nanofil suspendu entre deux réservoirs de température [5]. Cependant, des mesures sur des systèmes analogues ont montré des résultats différents [6]. En

2008, un article a avancé l'hypothèse que dans le cas d'un fil suspendu entre deux réservoirs de température, la résistance de contact entre le fil et les réservoirs pouvait être bien supérieure à la résistance thermique du nanofil et que donc la mise en évidence du quantum de conductance dans un nanofil n'était peut être pas détectable sur un tel système [7]. Nous montrons dans cet article qu'il n'en est rien et que la conductance entre deux réservoirs de température séparés par un nanofil est essentiellement due à la conductance du nanofil et non aux résistances de contact avec les réservoirs.

## 2. Conductance d'un fil

Dans le cas le plus général d'un film de section carrée et de taille quelconque, on peut calculer la relation de dispersion des modes de vibration du fil reliant la pulsation au vecteur d'onde du mode dans la direction longitudinale du fil. Un modèle simple permet de relier les modes tridimensionnels du fil aux modes 1D. L'idée est la suivante : le vecteur d'onde dans le fil est quantifié dans la direction transverse à l'axe du fil. Une résolution exacte des équations de l'acoustique dans un cylindre avec des conditions aux limites rigides sur la surface latérale est possible. Néanmoins, cette résolution est complexe. L'essentiel de la physique intervenant dans le calcul de la conductance dans le fil à une dimension peut être saisie en considérant des conditions aux limites strictes pour le vecteur d'onde transverse. Ainsi, dans le modèle de Debye :

$$\omega = c\sqrt{k^2 + (n_x^2 + n_y^2)\pi^2/l^2} \quad (1)$$

où  $c$  est la vitesse des ondes acoustiques dans le matériau massif lorsque l'on se place dans l'approximation de Debye. La relation de dispersion de ces modes prend la forme décrite sur la Fig. 1. Notons que le premier mode passe par l'origine et que la fréquence du mode suivant en  $k=0$  vaut  $\omega^{\min}=c\pi/l$ .

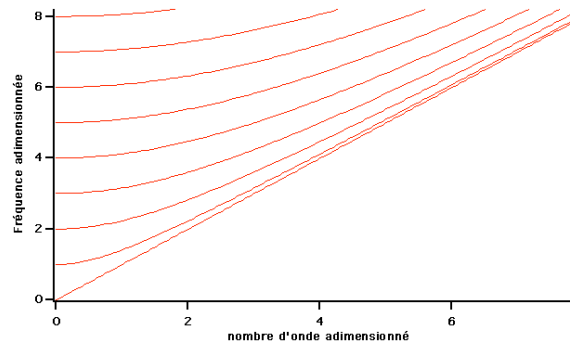


Fig.1 Relation de dispersion des modes dans le nanofil. La fréquence est adimensionnée par  $\omega^{\min}=c\pi/l$  et le nombre d'onde par  $\pi/l$ .

En utilisant le formalisme de Landauer [8], on exprime le flux dans le fil

$$\phi_1 = \sum_n \int_{\omega_n^{\min}}^{\omega_n^{\max}} \frac{\hbar\omega}{\exp(\hbar\omega/k_b T_1) - 1} \frac{d\omega}{2\pi} = \int_0^{\infty} \frac{N(\omega)\hbar\omega d\omega}{2\pi[\exp(\hbar\omega/k_b T_1) - 1]} \quad (2)$$

Où  $N(\omega)$  désigne le nombre de modes à la fréquence  $\omega$ .

Lorsque les températures mises en jeu sont telles que  $k_b T \ll \hbar\omega^{\min}/2\pi$ , seul le premier mode contribue au flux. Notons que cette condition correspond à des sections de fil  $l^2 \ll (hc/4\pi k_b T)^2 = l_c^2$ . À température ambiante, le diamètre critique correspondant  $l_c$  est de l'ordre de 2 nm. À 10 K, il mesure une cinquantaine de nm. Dans ces conditions, lorsque l'on effectue le bilan entre les deux faces à  $T_1$  et  $T_2$ , le flux échangé s'écrit sous la forme

$$\phi_{1\leftrightarrow 2} = \frac{\pi^2 k_b^2}{6h} (T_1^2 - T_2^2) \approx \frac{\pi^2 k_b^2 T}{3h} (T_1 - T_2) \quad (3)$$

qui fait apparaître le quantum de conductance  $\pi^2 k_b^2 T / 3h$ . Lorsqu'au contraire  $k_b T \gg \hbar \omega^{\min} / 2\pi$ , de nombreux modes sont excités, on peut calculer le nombre de modes  $N(\omega)$  du fil à une certaine fréquence : dans le modèle de section carrée simple présenté ici on trouve  $N(\omega) = S\omega^2 / 4\pi c^2$ . On trouve alors un flux échangé dans le fil

$$\phi_{1\leftrightarrow 2} = \frac{S\pi^5 k_b^4}{15h^3 c^2} (T_1^4 - T_2^4) \quad (4)$$

On retrouve ici l'expression d'un flux balistique dans un objet macroscopique qui est de la même forme que le flux radiatif entre deux surfaces noires séparées par un milieu transparent. Ce résultat est logique puisque le transfert balistique de phonons est complètement analogue au transfert de photons en milieu transparent étant donné que les photons et les phonons obéissent tous les deux à la statistique de Bose-Einstein et que notre modèle a supposé une vitesse de phonon constante dans le matériau massif.

### 3. Contact entre deux réservoirs de tailles différentes

Considérons maintenant le cas de deux réservoirs de température de section carrée et de même constitution en contact l'un avec l'autre

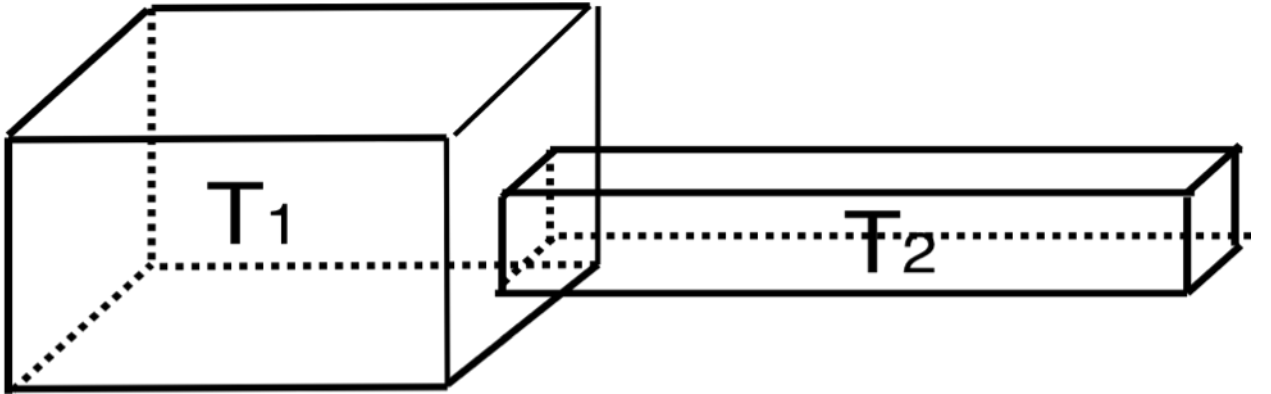


Fig. 2 : Schéma représentant le contact entre deux réservoirs de tailles différentes.

Calculons le flux échangé entre ces deux réservoirs au travers de leur surface de contact commune. Introduisons les coefficients de transmission d'un réservoir vers l'autre à une certaine fréquence. A l'aide de ces coefficients, le flux échangé entre les deux réservoirs s'écrit

$$\phi_{1\leftrightarrow 2} = \int_0^\infty \frac{\hbar \omega}{2\pi} \left[ \frac{N_1(\omega) t_{12}(\omega)}{\exp(\hbar \omega / k_b T_1) - 1} - \frac{N_2(\omega) t_{21}(\omega)}{\exp(\hbar \omega / k_b T_2) - 1} \right] \quad (5)$$

Lorsque les températures sont égales, le flux doit être nul, quelle que soit la valeur de la température prise. Ceci impose une condition de bilan détaillé  $N_1(\omega) t_{12}(\omega) = N_2(\omega) t_{21}(\omega)$ .

#### 3.1. Réservoirs de taille macroscopique.

Considérons d'abord le cas où les deux réservoirs sont de tailles macroscopiques c'est-à-dire dont le diamètre est beaucoup plus grand que le diamètre critique  $l_c$ . Les phonons dans chacun des réservoirs sont ceux du matériau massif. La nombre de modes à une certaine fréquence

pour le réservoir  $i$  est encore donné par  $N_i(\omega) = S_i \omega^2 / 4\pi c^2$ . De plus les modes venant du réservoir de plus petite taille sont tous transmis dans le réservoir de taille plus grande : ainsi  $t_{21} = 1$ . On en déduit que  $t_{12} = S_2 / S_1$ . C'est l'approximation du rayonnement de phonon [9]. On trouve une expression pour le flux échangé entre deux objets macroscopiques égal à

$$\phi_{1 \leftrightarrow 2} = \frac{S_2 \pi^2 k_b^4}{120 \hbar^3 c^2} (T_1^4 - T_2^4) \quad (6)$$

On note que cette expression apparaît comme la différence des flux balistiques de phonons issus de chacun des réservoirs à travers leur surface de contact  $S_2$ .

### 3.2. Echange entre un réservoir macroscopique et un réservoir monomode.

Considérons le cas où le premier réservoir est de taille macroscopique et le diamètre du deuxième réservoir est beaucoup plus petit que le diamètre critique. La structure et la répartition des modes est très différente dans les deux objets. Le nombre de modes à une fréquence donnée vaut un 1 dans le réservoir 2. Une partie des phonons réfléchi à l'interface tandis que l'autre partie est transmise. Nous faisons l'approximation de la limite diffuse. Près de l'interface, il est impossible de faire la différence entre un phonon réfléchi et un phonon transmis [10]. On en déduit que les coefficients de réflexion et de transmission entre le réservoir  $i$  et le réservoir  $j$  sont reliés par  $t_{ij} = r_{ji}$ . De plus, la conservation de l'énergie impose que  $r_{ij} + t_{ij} = 1$ . Faisons maintenant l'hypothèse que le diamètre du réservoir 2 soit très inférieur au diamètre critique entraînant ainsi que  $N_2(\omega) = 1$ . On en déduit que les coefficients de transmission d'un réservoir à l'autre valent respectivement  $t_{12}(\omega) = 1 / (1 + N_1(\omega))$  et  $t_{21}(\omega) = N_1(\omega) / (1 + N_1(\omega))$ . De plus, le flux échangé entre les deux réservoirs est égal à l'expression (2) : c'est un flux dominé par le produit du quantum de conductance par la différence de température. La conductance de contact entre un réservoir de phonon macroscopique et un réservoir de phonon constitué par un nanofil est donc égale au quantum de conductance.

## 4. Nanofil entre deux réservoirs

Considérons le cas d'un nanofil séparant deux réservoirs macroscopiques, chacun d'entre eux étant à l'équilibre thermodynamique.

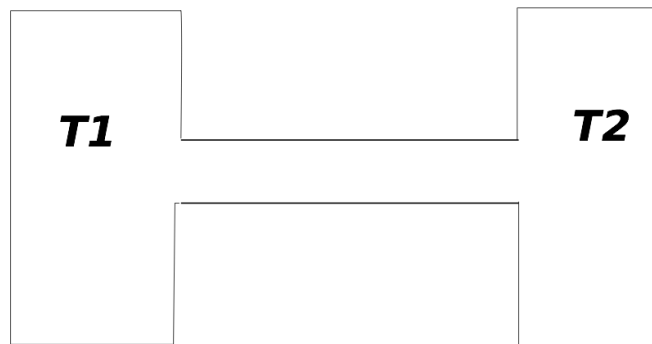


Fig.3 : Nanofil reliant deux réservoirs de température.

En utilisant les coefficients de transmission et de réflexion à chacune des interfaces, on peut exprimer les flux de chaleur issus de l'un des réservoirs pénétrant dans l'autre. Ils apparaissent comme la somme des flux issus des multiréflexions à chacune des deux interfaces.

$$\begin{aligned}\phi_{1\rightarrow 2} &= \int_0^{\infty} N_1(\omega) \frac{t_{1w}t_{2w}}{1 - r_{w1}r_{w2}} \frac{\hbar\omega}{\exp(\hbar\omega/k_bT_1) - 1} \frac{d\omega}{2\pi} \\ \phi_{2\rightarrow 1} &= \int_0^{\infty} N_2(\omega) \frac{t_{2w}t_{1w}}{1 - r_{w2}r_{w1}} \frac{\hbar\omega}{\exp(\hbar\omega/k_bT_2) - 1} \frac{d\omega}{2\pi}\end{aligned}\quad (7)$$

où l'indice  $w$  désigne le fil.  $t_{1w}$  est ainsi le coefficient de transmission entre le réservoir 1 et le fil. Dans le cas d'un fil macroscopique de section  $S$ , on approche le nombre de modes par fréquence par  $N_i(\omega) = S_i\omega^2/4\pi c^2$  et on applique l'approximation du rayonnement de phonon sur les coefficients de transmission et de réflexion des phonons aux interfaces. Ainsi,  $t_{wi} = 1$  et  $t_{iw} = S_i/S$ . Le flux entre les deux réservoirs prend une expression analogue au flux échangé entre deux réservoirs macroscopiques reliés par une surface. On trouve ainsi

$$\phi_{1\leftrightarrow 2} = \frac{S\pi^2 k_b^4}{120\hbar^3 c^2} (T_1^4 - T_2^4) \quad (8)$$

Traisons maintenant le cas de deux réservoirs reliés par un fil dont la section est très inférieure au diamètre critique. On se place alors dans l'approximation de la limite diffuse. Le nombre de modes dans chacun des réservoirs est toujours  $N_i(\omega) = S_i\omega^2/4\pi c^2$  et les coefficients de transmission des réservoirs vers le fil s'écrivent  $t_{iw}(\omega) = 1/(1 + N_i(\omega))$  et  $t_{wi}(\omega) = N_i(\omega)/(1 + N_i(\omega))$ . En remplaçant les coefficients de réflexion et de transmission dans les expressions (7) et en utilisant le fait que  $N_i(\omega) \gg 1$ , on trouve pour le flux échangé entre les deux réservoirs

$$\phi_{1\leftrightarrow 2} \approx \frac{\pi^2 k_b^2 T}{3h} (T_1 - T_2) \quad (9)$$

On remarque que le flux échangé entre deux réservoirs de température reliés par un nanofil dont la section est telle que seul le mode de plus basse fréquence permet le passage du flux de chaleur à travers le fil. Il est égal au produit du quantum de conductance par la différence de température entre les réservoirs. On remarque donc que la conductance totale entre les deux réservoirs se limite à la conductance du fil. On ne note pas de contribution importante provenant du contact entre le fil et le réservoir.

## 5. Conclusion

Nous avons calculé dans ce travail le transfert de chaleur entre deux réservoirs de température à l'équilibre thermique reliés par un fil. Nous avons montré par un modèle simple basé sur la quantification des modes acoustiques dans la direction transverse du fil que l'on retrouvait les résultats attendus pour le flux échangé de manière balistique entre deux réservoirs lorsque le fil est de dimension macroscopique. Nous avons montré qu'à basse température, on retrouvait que la conductance entre les deux réservoirs se limitait au quantum de conductance et que les effets de résistance de contact entre le fil et les réservoirs étaient négligeables. Nous pensons donc que les mesures expérimentales de conductance entre deux fils réservoirs séparés par un nanofil peuvent être faites et montrer l'existence du quantum de conductance dans un conducteur de chaleur monodimensionnel.

## Références

- [1] A.I. Hochbaum, R. Chen, R.D. Delgado, W. Liang, E.C. Garnett, M. Najaran, A. Majumdar et P. Yang, *Nature (London)*, 451, (2008), 163.
- [2] J.M. Ziman, *Electrons and phonons*, p461, Oxford University Press (1960).
- [3] B.A. Auld, *Acoustic fields and waves in solids*, Interscience (1973).
- [4] L.C.G. Rego et G. Kirczenow, *Phys. Rev. B*, 59, (1999) 13080.
- [5] K. Schwab, E.A. Henriksen, J.M. Worlock et M.L. Roukes, *Nature (London)*, 404, (2000), 974.
- [6] O. Bourgeois, T. Fournier et J. Chaussy, *J. Appl. Phys.*, 101, (2007) 016104.
- [7] Y. Chalopin, J.-N. Gillet et S. Volz, *Phys. Rev. B*, 77 (2008) 233309.
- [8] E. Akkermans et G. Montambaux, *Physique mésoscopique des electrons et des photons*, CNRS Editions (2004).
- [9] E.T. Swartz et R.O Pohl, *Review of Modern Physics*, 61 (1989) 605.
- [10] G. Chen, *Phys. Rev. B*, 57, (1998) 14958.