

Nanoscale thermal energy dissipation: beyond the concept of temperature

Keywords

Nanoscale heat transport, Phonons, Thermal energy, Nanofabrication, Raman thermometry, Electron energy-loss spectroscopy (EELS), Scanning thermal microscopy (SThM), 4-point probe thermometry.

Context

Industrial context: Thermal management is key to many fields since temperature affects a huge number of tools and instruments of our daily life. Among examples, it plays a role on the performances of electronic devices in terms of speed, on the reliability of materials, the stability of mechanical structures or the efficiency of processes in chemical engineering. In many cases, it is important to maintain the temperature below a certain threshold. A first strategy is to decrease the power dissipated, but this cannot be done in many situations, in particular in electronics when logical operations cost a certain amount of energy. The second strategy is to dissipate heat as efficiently as possible, in order to avoid the associated hot spots located around the heat sources. It can be performed by adding active devices (heat exchangers, heat pipes), and/or passive devices (heat spreaders), but they are bulky. In summary, there is a clear requirement for miniaturized heat-dissipating components.

Scientific background: When the typical size L of a material is decreased below the energy carrier (phonons in most cases)'s free flight characteristic length (mean free path, MFP) Λ , heat transport is modified and thermal ballistic transport occurs. In room-temperature silicon, the phonon average MFP Λ is close to 250 nm. A critical number characteristic of the transition between the ballistic and diffusive transport regimes is the Knudsen number $Kn = \Lambda / L$. When $Kn \sim 1$ (in certain directions at least), heat conduction is modified, as evidenced for instance in thin films [1], suspended nanowires [2], membranes [3], phononic crystals [4], superlattices [5]. 2D materials such as graphene were shown to be efficient dissipators [6].

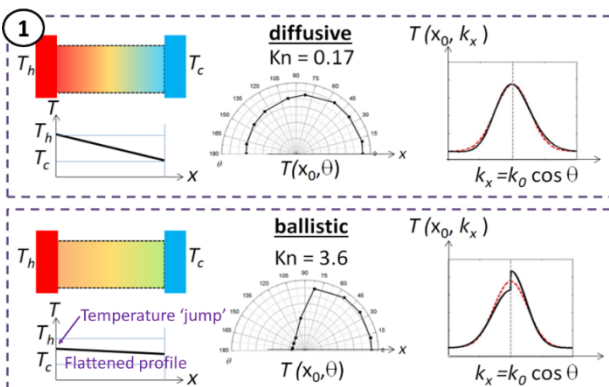
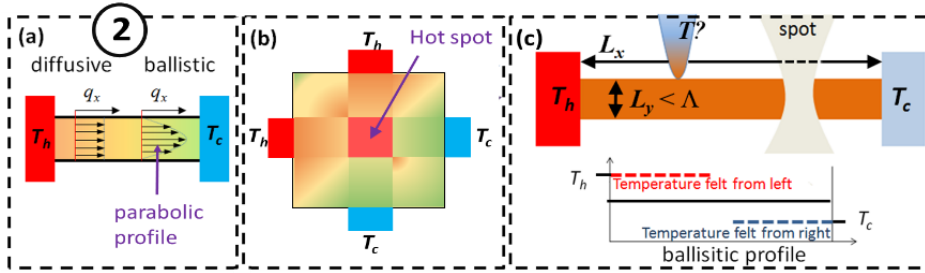


Figure 1. Diffusive vs ballistic regime in 1D. Temperature fields for both transport regimes, with a polar plot of the angle-dependent local energy (kinetic temperature) in the middle of the domain and the impact on the temperature distribution as a function of the projected momentum.

Figure 2. (a,b) 2D ballistic features: hydrodynamic (parabolic) profile, (b) configuration where heat does not necessarily flow from hot temperature to cold thermostats (temperature map)



(c) Probing the local temperature in the ballistic regime by means of inelastic scattering with out-of-contact (RnT and EELS) and contact techniques (SthM).

At this scale, Fourier's law is not valid anymore in the flux direction and ballistic transport has to be analyzed with the Boltzmann transport equation (BTE) for phonons. Interesting features have been predicted: (1) *there is no local thermal equilibrium (LTE) and local energy is not distributed equally along all the angles* (see Fig. 1), therefore temperature is not anymore a thermodynamic quantity in its strict definition while still a kinetic quantity representing the local energy [7]; (2) *the local temperature profile is different from that predicted by Fourier's law, with temperature jumps and flat regions in 1D* (Fig. 1); (3) *in 2D a hydrodynamic (parabolic) temperature profile appears in confined geometries* (reduced flux parallel to the boundaries) [8] (Fig. 2a), (4) *the heat flux is not anymore necessarily collinear to the temperature gradient* [9], and (5) *temperature maxima can be located far away from heat sources* [10] (Fig. 2b). This provides a complete new paradigm for thermal physics. **However, none of these effects have been observed experimentally directly thus far.**

Objectives of the PhD thesis

- **Nanofabrication of heating devices consisting of membranes connected to heat sources** (Fig. 2(a) and 2(b))
- **Experimental observations of the local energy dissipation, directly at the nanoscale (below the mean free path), to demonstrate that ballistic transport leads to angular-dependent kinetic temperature** (effect 1), **flat temperature profile in the flux direction** (effect 2) and **a hydrodynamic temperature field along the transverse direction** (effect 3).
- **Correlation of these effects to a reduction of the flux transferred in comparison with Fourier predictions.** Complementary simulations could be conducted in collaboration with in-house theorists.
- **Experimental evidence of hot spots** away from heat sources (effect 4, see Fig. 2(b)) will be envisaged if time and progresses allow it.

Implementation

Four complementary experimental techniques (Fig. 2c) will be used, following design steps with the BTE [12-13]. To observe local non-equilibrium temperature, two non-contact techniques will be implemented:

- **Raman thermometry (RnT)** [14]
- **Electron energy-loss spectroscopy (EELS)** in transmission electron microscopy (TEM) [15-18].

They are known to exhibit temperature-dependent spectral shift and broadening due to inelastic scattering of the incident particles (photons and electrons). Observing the variation of spectral responses at the micron level (RnT) and nanoscale (EELS), using either the optical phonon intensity (Raman/EELS) [18] or the bulk plasmon energy (EELS) [15], will provide maps of the transition from diffusion to ballistics.

The impact of applying locally a contacting thermometer (see Fig. 2b) will be analysed by a third technique: **scanning thermal microscopy (SthM)** [19], based on atomic force microscopy. Note that the CETHIL laboratory has developed a SthM embedded inside a Scanning Electron Microscope (SEM) for improved positioning. Finally, hot thermostats will be heated and monitored by **4-probe resistive thermometry (RsT)** [20] in all experiments.

The preparation of the samples will require the use of nanofabrication facilities provided by the NanoLyon platform.

Supervisors:

- Dr. P-Olivier CHAPUIS (olivier.chapuis@insa-lyon.fr, [website](#)), CNRS researcher at the Centre for Energy and Thermal Sciences of Lyon (CETHIL), <https://cethil.insa-lyon.fr/en>
- Dr. Matthieu BUGNET (matthieu.bugnet@insa-lyon.fr), CNRS researcher at Materials, Engineering, Sciences Laboratory (MATEIS), <https://mateis.insa-lyon.fr/en>
- Prof. Dr. Jean-Marie BLUET (jean-marie.bluet@insa-lyon.fr), Professor at the Institute for Nanotechnologies, Lyon (INL), <https://inl.cnrs.fr/en>

Location: National Institute for Applied Sciences (INSA), Lyon, Campus La Doua LyonTech, France.

The PhD student may spend time abroad for some of the experiments (EELS), which could be performed at collaborator's location (SuperSTEM, Daresbury, United Kingdom, <https://www.superstem.org/>).

Type of contract: Fixed-term PhD student contract (3 years), granted after evaluation by an external committee. Possibility to teach in addition (depending on capabilities). Gross salary: ~2000 €/month

Starting date of the PhD thesis: October 1st, 2021.

Required experience: The candidate should have an MS degree in Condensed Matter (Physics) or equivalent, and have demonstrated experimental skills beyond average. We are looking for a highly-motivated student. Scientific curiosity, strong interest in experimental physics and data analysis, as well as written and oral communication skills in English are required. Prior experience in nanofabrication, and/or characterization techniques such as near-field microscopy or electron microscopy will be appreciated. The successful candidate will integrate an international team of permanent researchers and faculties, PhD students and postdocs. The candidate is expected to show independence in leading his/her Ph.D. work.

Interested applicants: please contact any of the supervisors listed above, and provide an academic CV with the names of at least two references.

Application deadline: 30 April 2021

REFERENCES

[Hyperlinks in blue] / Black: consortium's publications

- [1] *Phonon-Boundary Scattering in Thin Si Layers*, M. Asheghi et al., Appl. Phys. Lett. 71, 1798, 1997 [2] *Enhanced thermoelectric performance of rough Si nanowires*, A.I. Hochbaum et al., Nat. 451, 163, 2008 [3] *Reduction of the thermal conductivity in free-standing Si nano-membranes investigated by non-invasive Raman thermometry*, E. Chavez-Angel et al., APL Mat. 2, 012113, 2014 [4] *Heat conduction tuning by wave nature of phonons*, J. Maire et al., Sci. Adv. 3, e1700027, 2017 [5] *Crossover from incoherent to coherent phonon scattering in epitaxial oxide superlattices*, J. Ravichandran et al., Nat. Mat. 13, 168, 2014 [6] *Thermal properties of graphene & nanostructured C materials*, A.A. Balandin, Nat. Mat. 10, 569, 2011 [7] *Introduction to heat transfer at nanoscale*, P.O. Chapuis, in *Thermometry at the nanoscale*, RSC Publ., Chap. 9, 273, 2015 [8] *Radial dependence of thermal transport in Si nanowires*, M. Verdier et al., J. Physics: Mat. 1, 100052, 2018 [9] *Full-field thermal imaging of quasiballistic crosstalk reduction in nanoscale devices*, A. Ziabari et al., Nat. Com. 9, 255, 2018 [10] *Heat guiding & focusing using ballistic phonon transport in phononic nanostructures*, R. Anufriev et al., Nat. Com. 8, 15505, 2017 [11] *Thermal dissipation at the nanoscale & impact on mechanical stress*, W. Cheng, MS thesis, Centrale Nantes, 2019 [12] *Clamped nanowire thermal conductivity based on phonon transport equation*, S.G. Volz et al., Microsc. Thermophys. Eng. 5, 191, 2001 [13] *Thermal transport phenomena beyond the diffusive regime*, P.-O. Chapuis et al., Proc. of 23rd MIXDES, 2016 [14] *Thermal conductivity of irradiated porous Si down to the oxide limit investigated by Raman thermometry & scanning thermal microscopy*, A.M. Massoud et al., J. Appl. Phys. 128, 175109, 2020 [15] *Nanoscale temperature mapping in operating microelectronic devices*, M. Mecklenburg et al., Sci. 347, 629, 2015 [16] *Thermometry with sub-nm Resolution in the Electron Microscope using the Principle of Detailed Balance*, M. Lagos et al., Nano Lett. 18, 4556, 2018 [17] *Structural & electronic distortions in individual CNTs under laser irradiation in the electron microscope*, D. Rossouw et al., Phys. Rev. B 87, 125403, 2013 [18] *Temperature Measurement by a Nanoscale Electron Probe Using Energy Gain & Loss Spectroscopy*, J.C. Idrobo et al., Phys. Rev. Lett. 120, 095901, 2018 [19] *Scanning thermal microscopy: a review*, S. Gomes et al., Phys. Stat. Sol. a 212, 477, 2015 [20] *Non-idealities in the 3 ω method for thermal characterization in the low- & high-frequency regimes*, W. Jaber et al., AIP Advances 8, 045111, 2018

Dissipation de l'énergie à l'échelle nanométrique : lorsque la température habituelle perd son sens

Mots-clés

Transport de chaleur à l'échelle nanométrique, Phonons, Energie thermique, Nanofabrication, Thermométrie Raman (RnT), Spectroscopie de perte d'énergie des électrons (EELS), Microscopie thermique à balayage (SThM), Thermométrie résistive en 4 points (RsT).

Contexte

Contexte industriel : La gestion des échanges de chaleur est très importante dans de nombreux domaines puisque la température affecte un grand nombre de dispositifs dans notre vie de tous les jours. Par exemple, elle joue un rôle dans les performances des dispositifs électroniques, régissant notamment leur vitesse de lecture ; elle impacte également la fiabilité des matériaux, la stabilité des structures mécaniques ou encore l'efficacité des réactions chimiques. Dans de nombreux cas, il est important de maintenir la température en dessous d'un certain seuil. Une première stratégie est de diminuer la puissance dissipée, mais cela n'est pas possible dans de nombreuses situations, notamment en microélectronique où les opérations logiques coûtent une certaine quantité d'énergie. La deuxième stratégie est de dissiper la chaleur aussi efficacement que possible, afin d'éviter les points chauds localisés autour des sources de chaleur. Ceci peut être réalisé en ajoutant des dispositifs actifs (échangeurs de chaleur, caloducs) et/ou des dispositifs passifs (diffuseurs de chaleur), mais ils présentent souvent des dimensions trop importantes. En résumé, il existe un besoin de composants miniaturisés permettant de dissiper la chaleur.

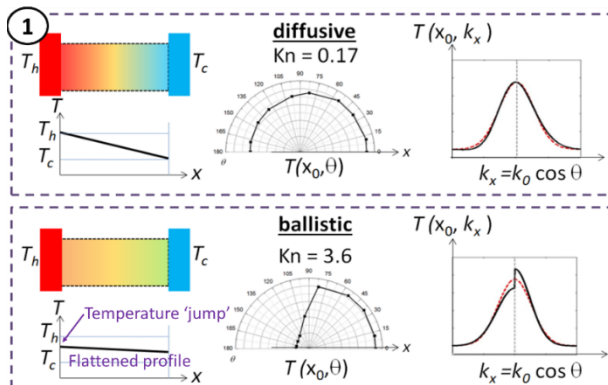


Figure 1. Régime diffusif vs balistique en 1D. Champs de température pour les deux régimes de transport, avec un diagramme polaire de l'énergie locale dépendant de l'angle (température cinétique) au milieu du domaine, et l'impact sur la distribution de température en fonction de la projection de la quantité de mouvement.

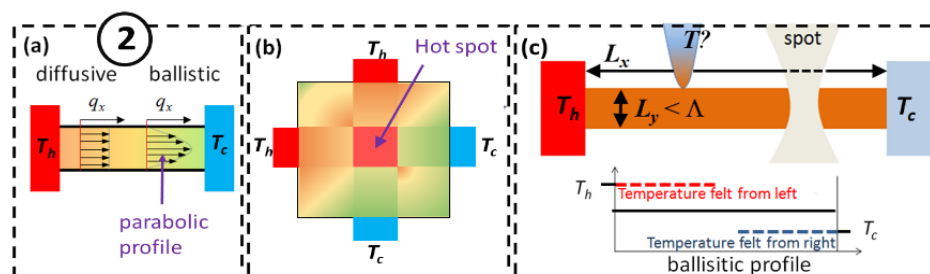


Figure 2. (a,b) Caractéristiques balistiques 2D : Profil hydrodynamique (parabolique), (b) configuration où la chaleur n'est pas nécessairement transportée des hautes températures vers les thermostats froids (distribution de température).

(c) **Mesure de la température locale** dans le régime balistique par des moyens de diffusion inélastique avec des techniques sans contact (RnT et EELS) et en contact (SThM).

Contexte scientifique : Lorsque la taille caractéristique L d'un matériau devient plus faible que la longueur caractéristique de diffusion des porteurs d'énergie (phonons), c'est-à-dire le libre parcours moyen (LPM) Λ , le transport thermique est modifié et entre dans le régime balistique. Pour le silicium à température ambiante, le LPM moyenné $\bar{\Lambda}$ est proche de 250 nm. La nombre caractéristique critique pour la transition

entre les régimes balistique et diffusif est appelé nombre de Knudsen $Kn = \bar{\Lambda} / L$. Lorsque $Kn \sim 1$ (au moins dans certaines directions), la conduction de la chaleur est modifiée, comme cela a été montré par exemple dans les films minces [1], les nanofils suspendus [2], les nano-membranes [3], les cristaux phononiques [4], et les super-réseaux [5]. Il a été également démontré que les matériaux 2D comme le graphène dissipent la chaleur très efficacement [6].

A cette échelle, la loi de Fourier n'est plus valide dans la direction du flux thermique, et le transport balistique doit être décrit par l'équation de transport de Boltzmann (d'acronyme anglais BTE) pour les phonons. Des caractéristiques intéressantes ont été prédites : (1) *il n'y a pas d'équilibre thermique local (ETL) et l'énergie locale n'est pas distribuée de manière homogène dans toutes les directions* (voir Fig. 1) ; (2) *la température n'est plus une quantité thermodynamique au sens strict*, même si elle est toujours une quantité cinétique représentant l'énergie locale [7] ; (3) *le profil de température locale est différent de celui prédit par la loi de Fourier*, avec des régions plates et des sauts de températures en 1D (Fig. 1) ; (4) *en 2D, un profil de température hydrodynamique (parabolique) apparaît dans des géométries confinées* (le flux est réduit dans la direction parallèle aux bords) [8] (Fig. 2a) ; (5) *le flux de chaleur n'est plus nécessairement colinéaire au gradient de température* [9] ; et (6) *les maximas de température peuvent être localisés loin des sources de chaleur* [10] (Fig. 2b). Ces hypothèses constituent un nouveau paradigme pour la physique du transport de chaleur. **Cependant, aucun de ces effets n'a directement été observé expérimentalement jusqu'à présent.**

Objectifs de la thèse

- **Nanofabrication de dispositifs chauffants constitués de membranes connectées à des sources de chaleur** (Fig. 2(a) and 2(b))
- **Observation expérimentale de la dissipation de l'énergie locale, directement à l'échelle nanométrique (en dessous du libre parcours moyen)**, pour démontrer que le transport balistique conduit à une température cinétique dépendant de l'angle (effet 1), un profil de température plat dans la direction du flux (effet 2), et un champ de température hydrodynamique le long de la direction transverse (effet 3).
- **Corrélation de ces effets avec la réduction du flux transféré par rapport aux prédictions de Fourier. Des simulations complémentaires pourront être réalisées** en collaboration avec des théoriciens des équipes impliquées.
- **L'observation expérimentale de points chauds éloignés des sources de chaleur** (effet 4, Fig. 2(b)) pourra être envisagée si le temps et les progrès le permettent.

Tâches scientifiques prévues

Quatre techniques expérimentales complémentaires seront utilisées (Fig. 2c), une fois les étapes de design avec l'équation de transport de Boltzmann [12-13] et la fabrication des échantillons achevées. Pour observer la température locale hors-équilibre, deux techniques sans contact seront mises en œuvre :

- **Thermométrie Raman (RnT) [14]**
- **Spectroscopie de perte d'énergie des électrons (EELS) en microscopie électronique en transmission (TEM) [15-18].**

Ces deux techniques de diffusion inélastique des particules incidentes (photons et électrons) sont sensibles à la température, qui induit un décalage et/ou un élargissement des pics dans les spectres. Les variations spectrales à l'échelle micronique (RnT) et nanométrique (EELS), en utilisant l'intensité des phonons optiques (Raman/EELS) [18] ou l'énergie du plasmon de volume (EELS) [15], permettront l'observation de la transition du régime diffusif vers le régime balistique. La mesure de température en contact (cf. Fig. 2b) sera mise en œuvre par une troisième technique : la **microscopie thermique à balayage (SthM) [19]**, basée sur la microscopie à force atomique. Le CETHIL a développé un microscope SthM à l'intérieur d'un microscope électronique à balayage (MEB) pour des analyses précises. Enfin, les sources de chaleur dans les échantillons seront générées et contrôlées par **thermométrie résistive en 4 points (RsT) [20]** dans toutes les expériences. La préparation des échantillons nécessitera l'utilisation des moyens de nanofabrication disponibles via la plateforme NanoLyon.

Encadrants

- P-Olivier CHAPUIS (olivier.chapuis@insa-lyon.fr, [website](#)), Chercheur CNRS au Centre d'Énergétique et de Thermique de Lyon (CETHIL), <https://cethil.insa-lyon.fr>
- Matthieu BUGNET (matthieu.bugnet@insa-lyon.fr), Chercheur CNRS au laboratoire Matériaux, Ingénierie, Sciences (MATEIS), <https://mateis.insa-lyon.fr>
- Jean-Marie BLUET (jean-marie.bluet@insa-lyon.fr), Professeur à l'Institut des Nanotechnologies de Lyon (INL), <https://inl.cnrs.fr>

Lieu : INSA de Lyon, Campus La Doua LyonTech, France.

L'étudiant(e) en thèse pourra effectuer une partie des expériences (EELS) à l'étranger, dans le cadre d'une collaboration existante (SuperSTEM, Daresbury, Royaume-Uni, <https://www.superstem.org/>).

Type de contrat : CDD (3 ans) attribué après évaluation par un comité de sélection (Ecole Doctorale). Possibilité d'enseigner en plus (en fonction des capacités du(de la) candidat(e)). Salaire (brut) : ~2000 €/mois

Date de début de thèse : 1^{er} Octobre 2021

Expérience requise : Le(la) candidat(e) devra être titulaire d'un diplôme de Master en physique de la matière condensée ou d'un équivalent (Ecole d'ingénieurs, etc.), et avoir démontré une aptitude pour le travail expérimental. Nous recherchons un(e) étudiant(e) très motivé(e), qui fera preuve de curiosité scientifique, d'un fort intérêt pour la physique expérimentale et l'analyse de données, ainsi que des qualités d'expression écrite et orale en anglais. Une expérience préalable en nanofabrication, et/ou techniques de caractérisation comme la microscopie en champ proche ou la microscopie électronique serait appréciée. Le(la) candidat(e) sélectionné(e) intégrera une équipe internationale de chercheurs et enseignant-chercheurs, étudiants en thèse et post-doctorants. Le(la) candidat(e) devra montrer une certaine indépendance dans son travail de thèse.

Candidat(e)s intéressé(e)s : merci de contacter un des encadrants aux adresses emails indiquées ci-dessus, en fournissant un CV académique, ainsi que les noms et emails d'au moins deux personnes référentes.

Date limite pour postuler : 30 Avril 2021

Références

[Hyperliens en bleu] / Noir: Publications du consortium

- [1] Phonon-Boundary Scattering in Thin Si Layers, M. Ascheghi *et al.*, Appl. Phys. Lett. 71, 1798, 1997 [2] Enhanced thermoelectric performance of rough Si nanowires, A.I. Hochbaum *et al.*, Nat. 451, 163, 2008 [3] Reduction of the thermal conductivity in free-standing Si nano-membranes investigated by non-invasive Raman thermometry, E. Chavez-Angel *et al.*, APL Mat. 2, 012113, 2014 [4] Heat conduction tuning by wave nature of phonons, J. Maire *et al.*, Sci. Adv. 3, e1700027, 2017 [5] Crossover from incoherent to coherent phonon scattering in epitaxial oxide superlattices, J. Ravichandran *et al.*, Nat. Mat. 13, 168, 2014 [6] Thermal properties of graphene & nanostructured C materials, A.A. Balandin, Nat. Mat. 10, 569, 2011 [7] Introduction to heat transfer at nanoscale, P.O. Chapuis, in *Thermometry at the nanoscale*, RSC Publ., Chap. 9, 273, 2015 [8] Radial dependence of thermal transport in Si nanowires, M. Verdier *et al.*, J. Physics: Mat. 1, 100052, 2018 [9] Full-field thermal imaging of quasiballistic crosstalk reduction in nanoscale devices, A. Ziabari *et al.*, Nat. Com. 9, 255, 2018 [10] Heat guiding & focusing using ballistic phonon transport in phononic nanostructures, R. Anufriev *et al.*, Nat. Com. 8, 15505, 2017 [11] Thermal dissipation at the nanoscale & impact on mechanical stress, W. Cheng, MS thesis, Centrale Nantes, 2019 [12] Clamped nanowire thermal conductivity based on phonon transport equation, S.G. Volz *et al.*, Microsc. Thermophys. Eng. 5, 191, 2001 [13] Thermal transport phenomena beyond the diffusive regime, P.-O. Chapuis *et al.*, Proc. of 23rd MIXDES, 2016 [14] Thermal conductivity of irradiated porous Si down to the oxide limit investigated by Raman thermometry & scanning thermal microscopy, A.M. Massoud *et al.*, J. Appl. Phys. 128, 175109, 2020 [15] Nanoscale temperature mapping in operating microelectronic devices, M. Mecklenburg *et al.*, Sci. 347, 629, 2015 [16] Thermometry with sub-nm Resolution in the Electron Microscope using the Principle of Detailed Balance, M. Lagos *et al.*, Nano Lett. 18, 4556, 2018 [17] Structural & electronic distortions in individual CNTs under laser irradiation in the electron microscope, D. Rossouw *et al.*, Phys. Rev. B 87, 125403, 2013 [18] Temperature Measurement by a Nanoscale Electron Probe Using Energy Gain & Loss Spectroscopy, J.C. Idrobo *et al.*, Phys. Rev. Lett. 120, 095901, 2018 [19] Scanning thermal microscopy: a review, S. Gomes *et al.*, Phys. Stat. Sol. a 212, 477, 2015 [20] Non-idealities in the 3 ω method for thermal characterization in the low- & high-frequency regimes, W. Jaber *et al.*, AIP Advances 8, 045111, 2018