



Soutenance de thèse

Vendredi 11 Mars 2016  
Amphi Becquerel - 10h00

**Maksim MARKOV**

**Prédiction de la conductivité thermique et stratégie de réduction du transport de la chaleur dans le bismuth: étude *ab initio***

Cette thèse de doctorat porte sur l'étude théorique de la conductivité thermique du réseau dans le bismuth semi-métallique et sur les stratégies pour réduire la conductivité thermique en vue d'applications pour réduire l'échauffement dans les circuits électroniques, et pour la thermoélectricité. J'ai utilisé des méthodes avancées de résolution de l'équation de transport de Boltzmann pour les phonons, et de calcul *ab initio* des éléments de matrice de l'interaction phonon-phonon. J'ai calculé la dépendance en température de la conductivité thermique du réseau dans le matériau en volume en excellent accord avec les rares expériences disponibles. J'ai obtenu une description très précise, à l'échelle microscopique, du transport de la chaleur et j'ai quantifié la contribution des porteurs de charge à la conductivité thermique totale. J'ai démontré que la nano-structuration et la photo-excitation sont des moyens très efficaces dans le bismuth de contrôler la diffusion des phonons qui portent la chaleur, respectivement par interaction avec les bords de l'échantillon, et par interaction phonon-phonon. En contrôlant l'équilibre entre ces deux derniers effets, j'ai prédit de façon exhaustive l'effet de réduction pour différentes températures et tailles de nano-structures, pour des mono- et polycristaux, semi-conducteurs ou semi-métalliques. Enfin, j'ai étudié l'élargissement anharmonique des phonons acoustiques et optiques, et j'ai déterminé pour chacun les interactions majeures qui contribuent à l'élargissement. L'atténuation du son a été prédite dans le bismuth pour de futures expériences. L'approximation des grandes longueurs d'ondes [long-wave approximation (LWA)] a été validée pour le bismuth et ses limites ont été déterminées.

**Prediction of thermal conductivity and strategies for heat transport reduction in bismuth: an *ab initio* study**

This Ph.D. thesis has been devoted to the theoretical study of the lattice thermal conductivity (LTC) in bismuth and of the possible strategies for its reduction, for applications in thermal management and thermoelectricity. I have employed advanced methods of the solution of the Boltzmann transport equation for the phonon system, and of *ab initio* calculations of the phonon-phonon interaction matrix elements. I have obtained the temperature dependence of the bulk LTC in excellent agreement with the rare available experiments. A very accurate microscopic description of heat transport has been achieved and the charge-carrier contribution to the total thermal conductivity has been determined. I have demonstrated that nanostructuring and photoexcitation are very efficient routes to control respectively phonon-boundary scattering and phonon-phonon interaction in bismuth. By controlling the interplay between these two scattering processes, I have predicted in an exhaustive way the effect of size reduction for various temperatures and nanostructure shapes, both single- and polycrystalline ones, and both semiconducting and semi metallic. I have studied the anharmonic broadenings of both acoustic and optical modes and determined the major interaction processes contributing to them. Sound attenuation has been predicted in bismuth for future experiments. The long-wave approximation (LWA) has been validated for bismuth and its limitations studied.