

清华大学优秀博士学位论文丛书



Tsinghua
theses

半导体纳米结构界面 导热特性的分子动力学模拟

鞠生宏 著 Ju Shenghong

Interface Thermal Property
of Semiconductor Nanostructures
by Molecular Dynamics Simulation

清华大学出版社
TSINGHUA UNIVERSITY PRESS

清华大学优秀博士学位论文丛书

半导体纳米结构界面 导热特性的分子动力学模拟

鞠生宏 著 Ju Shenghong

Interface Thermal Property
of Semiconductor Nanostructure
by Molecular Dynamics Simulation



清华大学出版社
北京

内 容 简 介

随着半导体器件和材料科学的发展,越来越多的纳米结构和纳米材料开始出现。界面特性深刻影响着纳米结构的导热及热设计,本书以半导体纳米界面导热特性为主题,针对纳米电子器件和纳米材料的研究前沿问题,对国内外发展动向和研究现状进行了调研和整理,研究融合了当前研究纳米结构界面导热特性的主要手段,力求在数值模拟及实验测量的基础上深入揭示影响纳米结构界面导热特性的主要因素及物理作用机制。

本书可供相关专业高年级本科生、研究生以及相关领域科研与教学工作者阅读参考。

版权所有,侵权必究。侵权举报电话:010-62782989 13701121933

图书在版编目(CIP)数据

半导体纳米结构界面导热特性的分子动力学模拟/鞠生宏著. —北京:清华大学出版社,2018

(清华大学优秀博士学位论文丛书)

ISBN 978-7-302-47797-6

I. ①半… II. ①鞠… III. ①半导体材料—纳米材料—传热性质—研究
IV. ①TN304 ②TB383 ③TK124

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2017)第 168495 号

责任编辑:陈朝晖

封面设计:傅瑞学

责任校对:王淑云

责任印制:宋 林

出版发行:清华大学出版社

网 址: <http://www.tup.com.cn>, <http://www.wqbook.com>

地 址:北京清华大学学研大厦 A 座 邮 编:100084

社 总 机:010-62770175 邮 购:010-62786544

投稿与读者服务:010-62776969, c-service@tup.tsinghua.edu.cn

质量反馈:010-62772015, zhiliang@tup.tsinghua.edu.cn

印 装 者:三河市铭诚印务有限公司

经 销:全国新华书店

开 本:155mm×235mm 印 张:10 字 数:170千字

版 次:2018年6月第1版 印 次:2018年6月第1次印刷

定 价:89.00元

产品编号:071347-01

一流博士生教育 体现一流大学人才培养的高度(代丛书序)^①

人才培养是大学的根本任务。只有培养出一流人才的高校,才能够成为世界一流大学。本科教育是培养一流人才最重要的基础,是一流大学的底色,体现了学校的传统和特色。博士生教育是学历教育的最高层次,体现出一所大学人才培养的高度,代表着一个国家的人才培养水平。清华大学正在全面推进综合改革,深化教育教学改革,探索建立完善的博士生选拔培养机制,不断提升博士生培养质量。

学术精神的培养是博士生教育的根本

学术精神是大学精神的重要组成部分,是学者与学术群体在学术活动中坚守的价值准则。大学对学术精神的追求,反映了一所大学对学术的重视、对真理的热爱和对功利性目标的摒弃。博士生教育要培养有志于追求学术的人,其根本在于学术精神的培养。

无论古今中外,博士这一称号都是和学问、学术紧密联系在一起,和知识探索密切相关。我国的博士一词起源于2000多年前的战国时期,是一种学官名。博士任职者负责保管文献档案、编撰著述,须知识渊博并负有传授学问的职责。东汉学者应劭在《汉官仪》中写道:“博者,通博古今;士者,辩于然否。”后来,人们逐渐把精通某种职业的专门人才称为博士。博士作为一种学位,最早产生于12世纪,最初它是加入教师行会的一种资格证书。19世纪初,德国柏林大学成立,其哲学院取代了以往神学院在大学中的地位,在大学发展的历史上首次产生了由哲学院授予的哲学博士学位,并赋予了哲学博士深层次的教育内涵,即推崇学术自由、创造新知识。哲学博士的设立标志着现代博士生教育的开端,博士则被定义为独立从事学术研究、具备创造新知识能力的人,是学术精神的传承者和光大者。

^① 本文首发于《光明日报》,2017年12月5日。

博士生学习期间是培养学术精神最重要的阶段。博士生需要接受严谨的学术训练,开展深入的学术研究,并通过发表学术论文、参与学术活动及博士论文答辩等环节,证明自身的学术能力。更重要的是,博士生要培养学术志趣,把对学术的热爱融入生命之中,把捍卫真理作为毕生的追求。博士生更要学会如何面对干扰和诱惑,远离功利,保持安静、从容的心态。学术精神特别是其中所蕴含的科学理性精神、学术奉献精神不仅对博士生未来的学术事业至关重要,对博士生一生的发展都大有裨益。

独创性和批判性思维是博士生最重要的素质

博士生需要具备很多素质,包括逻辑推理、言语表达、沟通协作等,但是最重要的素质是独创性和批判性思维。

学术重视传承,但更看重突破和创新。博士生作为学术事业的后备力量,要立志于追求独创性。独创意味着独立和创造,没有独立精神,往往很难产生创造性的成果。1929年6月3日,在清华大学国学院导师王国维逝世二周年之际,国学院师生为纪念这位杰出的学者,募款修造“海宁王静安先生纪念碑”,同为国学院导师的陈寅恪先生撰写了碑铭,其中写道:“先生之著述,或有时而不章;先生之学说,或有时而可商;惟此独立之精神,自由之思想,历千万祀,与天壤而同久,共三光而永光。”这是对于一位学者的极高评价。中国著名的史学家、文学家司马迁所讲的“究天人之际、通古今之变,成一家之言”也是强调要在古今贯通中形成自己独立的见解,并努力达到新的高度。博士生应该以“独立之精神、自由之思想”来要求自己,不断创造新的学术成果。

诺贝尔物理学奖获得者杨振宁先生曾在20世纪80年代初对到访纽约州立大学石溪分校的90多名中国学生、学者提出:“独创性是科学工作者最重要的素质。”杨先生主张做研究的人一定要有独创的精神、独到的见解和独立研究的能力。在科技如此发达的今天,学术上的独创性变得越来越难,也愈加珍贵和重要。博士生要树立敢为天下先的志向,在独创性上下功夫,勇于挑战最前沿的科学问题。

批判性思维是一种遵循逻辑规则、不断质疑和反省的思维方式,具有批判性思维的人勇于挑战自己、敢于挑战权威。批判性思维的缺乏往往被认为是中国学生特有的弱项,也是我们在博士生培养方面存在的一个普遍问题。2001年,美国卡内基基金会开展了一项“卡内基博士生教育创新计划”,针对博士生教育进行调研,并发布了研究报告。该报告指出:在美国和

欧洲,培养学生保持批判而质疑的眼光看待自己、同行和导师的观点同样非常不容易,批判性思维的培养必须要成为博士生培养项目的组成部分。

对于博士生而言,批判性思维的养成要从如何面对权威开始。为了鼓励学生质疑学术权威、挑战现有学术范式,培养学生的挑战精神和创新能力,清华大学在2013年发起“巅峰对话”,由学生自主邀请各学科领域具有国际影响力的学术大师与清华学生同台对话。该活动迄今已经举办了21期,先后邀请17位诺贝尔奖、3位图灵奖、1位菲尔兹奖获得者参与对话。诺贝尔化学奖得主巴里·夏普莱斯(Barry Sharpless)在2013年11月来清华参加“巅峰对话”时,对于清华学生的质疑精神印象深刻。他在接受媒体采访时谈道:“清华的学生无所畏惧,请原谅我的措辞,但他们真的很有胆量。”这是我听到的对清华学生的最高评价,博士生就应该具备这样的勇气和能力。培养批判性思维更难的一层是要有勇气不断否定自己,有一种不断超越自己的精神。爱因斯坦说:“在真理的认识方面,任何以权威自居的人,必将在上帝的嬉笑中垮台。”这句名言应该成为每一位从事学术研究的博士生的箴言。

提高博士生培养质量有赖于构建全方位的博士生教育体系

一流的博士生教育要有一流的教育理念,需要构建全方位的教育体系,把教育理念落实到博士生培养的各个环节中。

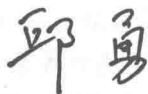
在博士生选拔方面,不能简单按考分录取,而是要侧重评价学术志趣和创新潜力。知识结构固然重要,但学术志趣和创新潜力更关键,考分不能完全反映学生的学术潜质。清华大学在经过多年试点探索的基础上,于2016年开始全面实行博士生招生“申请-审核”制,从原来的按照考试分数招收博士生转变为按科研创新能力、专业学术潜质招收,并给予院系、学科、导师更大的自主权。《清华大学“申请-审核”制实施办法》明晰了导师和院系在考核、遴选和推荐上的权利和职责,同时确定了规范的流程及监管要求。

在博士生指导教师资格确认方面,不能论资排辈,要更看重教师的学术活力及研究工作的前沿性。博士生教育质量的提升关键在于教师,让更多、更优秀的教师参与到博士生教育中来。清华大学从2009年开始探索将博士生导师评定权下放到各学位评定分委员会,允许评聘一部分优秀副教授担任博士生导师。近年来学校在推进教师人事制度改革过程中,明确教研系列助理教授可以独立指导博士生,让富有创造活力的青年教师指导优秀的青年学生,师生相互促进、共同成长。

在促进博士生交流方面,要努力突破学科领域的界限,注重搭建跨学科的平台。跨学科交流是激发博士生学术创造力的重要途径,博士生要努力提升在交叉学科领域开展科研工作的能力。清华大学于2014年创办了“微沙龙”平台,同学们可以通过微信平台随时发布学术话题、寻觅学术伙伴。3年来,博士生参与和发起“微沙龙”12000多场,参与博士生达38000多人次。“微沙龙”促进了不同学科学生之间的思想碰撞,激发了同学们的学术志趣。清华于2002年创办了博士生论坛,论坛由同学自己组织,师生共同参与。博士生论坛持续举办了500期,开展了18000多场学术报告,切实起到了师生互动、教学相长、学科交融、促进交流的作用。学校积极资助博士生到世界一流大学开展交流与合作研究,超过60%的博士生有海外访学经历。清华于2011年设立了发展中国家博士生项目,鼓励学生到发展中国家亲身体验和调研,在全球化背景下研究发展中国家的各类问题。

在博士学位评定方面,权力要进一步下放,学术判断应该由各领域的学者来负责。院系二级学术单位应该在评定博士论文水平上拥有更多的权力,也应担负更多的责任。清华大学从2015年开始把学位论文的评审职责授权给各学位评定分委员会,学位论文质量和学位评审过程主要由各学位分委员会进行把关,校学位委员会负责学位管理整体工作,负责制度建设和争议事项处理。

全面提高人才培养能力是建设世界一流大学的核心。博士生培养质量的提升是大学办学质量提升的重要标志。我们要高度重视、充分发挥博士生教育的战略性、引领性作用,面向世界、勇于进取,树立自信、保持特色,不断推动一流大学的人才培养迈向新的高度。



清华大学校长

2017年12月5日

丛书序二

以学术型人才培养为主的博士生教育,肩负着培养具有国际竞争力的高层次学术创新人才的重任,是国家发展战略的重要组成部分,是清华大学人才培养的重中之重。

作为首批设立研究生院的高校,清华大学自20世纪80年代初开始,立足国家和社会需要,结合校内实际情况,不断推动博士生教育改革。为了提供适宜博士生成长的学术环境,我校一方面不断地营造浓厚的学术氛围,一方面大力推动培养模式创新探索。我校已多年运行一系列博士生培养专项基金和特色项目,激励博士生潜心学术、锐意创新,提升博士生的国际视野,倡导跨学科研究与交流,不断提升博士生培养质量。

博士生是最具创造力的学术研究新生力量,思维活跃,求真求实。他们在导师的指导下进入本领域研究前沿,吸取本领域最新的研究成果,拓宽人类的认知边界,不断取得创新性成果。这套优秀博士学位论文丛书,不仅是我校博士生研究工作前沿成果的体现,也是我校博士生学术精神传承和光大的体现。

这套丛书的每一篇论文均来自学校新近每年评选的校级优秀博士学位论文。为了鼓励创新,激励优秀的博士生脱颖而出,同时激励导师悉心指导,我校评选校级优秀博士学位论文已有20多年。评选出的优秀博士学位论文代表了我校各学科最优秀的博士学位论文的水平。为了传播优秀的博士学位论文成果,更好地推动学术交流与学科建设,促进博士生未来发展和成长,清华大学研究生院与清华大学出版社合作出版这些优秀的博士学位论文。

感谢清华大学出版社,悉心地为每位作者提供专业、细致的写作和出版指导,使这些博士论文以专著方式呈现在读者面前,促进了这些最新的优秀研究成果的快速广泛传播。相信本套丛书的出版可以为国内外各相关领域或交叉领域的在读研究生和科研人员提供有益的参考,为相关学科领域的发展和优秀科研成果的转化起到积极的推动作用。

感谢丛书作者的导师们。这些优秀的博士学位论文,从选题、研究到成文,离不开导师的精心指导。我校优秀的师生导学传统,成就了一项项优秀的研究成果,成就了一大批青年学者,也成就了清华的学术研究。感谢导师们为每篇论文精心撰写序言,帮助读者更好地理解论文。

感谢丛书的作者们。他们优秀的学术成果,连同鲜活的思想、创新的精神、严谨的学风,都为致力于学术研究的后来者树立了榜样。他们本着精益求精的精神,对论文进行了细致的修改完善,使之在具备科学性、前沿性的同时,更具系统性和可读性。

这套丛书涵盖清华众多学科,从论文的选题能够感受到作者们积极参与国家重大战略、社会发展问题、新兴产业创新等的研究热情,能够感受到作者们的国际视野和人文情怀。相信这些年轻作者们勇于承担学术创新重任的社会责任感能够感染和带动越来越多的博士生们,将论文书写在祖国的大地上。

祝愿丛书的作者们、读者们和所有从事学术研究的同行们在未来的道路上坚持梦想,百折不挠!在服务国家、奉献社会和造福人类的事业中不断创新,做新时代的引领者。

相信每一位读者在阅读这一本本学术著作的时候,在吸取学术创新成果、享受学术之美的同时,能够将其中所蕴含的科学理性精神和学术奉献精神传播和发扬出去。

清华大学研究生院院长

2018年1月5日

导师序言

一方面,随着半导体器件的小型化、集成化的发展,电子器件中出现了越来越多的纳米结构,如 MOSFET 等。另一方面材料科学与技术的发展也促成越来越多的纳米材料的出现,如超晶格薄膜、多晶材料、纳米复合薄膜、纳米线、碳纳米管以及石墨烯等。在这些纳米结构与纳米材料中,界面特性深刻影响着纳米器件的导热及热设计。以碳纳米管和石墨烯为例,单根碳纳米管及单层石墨烯的热导率可以高达几千 $\text{W}/(\text{m} \cdot \text{W})$,但含有碳纳米管以及石墨烯的复合材料的热导率就立刻下降至常规材料热导率水平,高热导率特性消失了,其主要原因就是纳米管及石墨烯复合材料中存在的大量界面限制了碳纳米管、石墨烯等高热导率材料的应用。由此可见,界面导热特性研究是纳米器件及材料设计过程中不可或缺的组成部分,研究纳米结构的界面导热特性十分必要。与此同时,界面热输运机理研究属于目前传热和热物理领域的前沿问题,尤其是其微观物理机制还处于探索阶段,也需要进行深入的研究。

鞠生宏的博士学位论文以半导体纳米界面导热特性为研究主题,针对纳米电子器件和纳米材料的研究前沿问题,具有重要的学术意义。论文对国内外发展动向和研究现状进行了调研和整理,论文的研究融合了当前研究纳米结构界面导热特性的主要手段,包括理论模型计算、分子动力学模拟、声子波包模拟、飞秒激光热反射测量等多种方法,设计了多种典型的纳米界面结构,力求在数值模拟以及实验测量的基础上深入揭示影响纳米结构界面导热特性的主要因素及物理作用机制。

该论文对于纳米结构界面导热特性的研究可以归纳为三个层次。首先,从宏观的角度研究了界面对于高界密度材料热物性的影响,这主要涉及纳米多晶体材料、纳米多晶薄膜材料、纳米复合材料的导热特性研究。其次,作者将重点会聚到单一的界面结构,如纳米多晶中的晶界、双层复合薄膜的界面,通过大量的模拟以及实验测量,着重分析单一界面的导热特性及影响因素。最后,作者更进一步深入到声子在界面的频谱透射特性,通过声

子波包模拟手段从声子界面的透射角度研究了影响纳米结构界面导热特性的根源。

我相信本书的出版一定会促进读者对纳米结构界面导热特性的认识。

梁新刚

清华大学航天航空学院

2017年6月

摘 要

随着纳米材料在电子器件中的广泛使用,界面导热特性已成为纳米器件热设计不可忽略的因素。目前人们对纳米结构界面导热特性的影响因素及物理作用机制了解得还不透彻。本文以半导体纳米结构界面导热特性为研究对象,通过分子动力学模拟、声子波包模拟、理论计算、飞秒激光热反射测量等方法研究典型纳米结构界面的导热及声子透射特性,在数值模拟及实验测量的基础上,揭示纳米结构界面导热特性的影响因素和物理作用机制。

本文利用分子动力学模拟方法研究了双层复合薄膜界面热阻随界面温度、薄膜厚度、热流方向以及界面两侧材料的变化,同时从声子态密度以及声子界面能量透射特性角度对界面热阻的影响机制进行了分析,揭示了界面热阻不仅与声子频谱重合度有关,还与频率分布有关。基于声子界面能量透射特性和 Landuer 公式解释了双层薄膜中的热整流机制,揭示了温度引起的声子频率偏移是引起热整流效应的关键因素,并且在不同模拟系统下,热整流效应可以完全相反。同时基于双波长飞秒激光热反射平台,测量了复合薄膜界面热阻,结果表明界面热阻随着薄膜厚度无明显变化。

借助声子波包模拟方法研究了一维原子链、纳米复合材料中的声子透射特性,建立了适用于含周期排布颗粒复合材料的多次透射反射模型,预测结果与波包直接模拟相吻合。同时系统地研究了声子波包在材料中的分裂特性,分析表明声子波包按照材料色散关系完成分裂过程,这为计算材料色散关系提供了新的思路。

采用三维 Voronoi 方法构建多晶结构,实现了纳米多晶材料热导率的直接分子动力学模拟,在此基础上研究了纳米多晶体材料以及纳米多晶薄膜热导率特性。结果表明纳米多晶材料的热导率远低于单晶材料热导率,这主要由晶界热阻及声子平均自由程受晶粒尺寸限制所引起。平均晶粒尺寸是影响纳米多晶材料热导率的一个重要因素,可以通过控制平均晶粒尺寸的方法来调控纳米多晶材料热导率。

依据结构不对称性可引起热整流效应的特点,分别设计了非对称硅纳米条带、含锥形空腔、含三角形孔结构的硅纳米薄膜,利用非平衡的分子动力学模拟方法计算了不同温度以及不同几何尺寸条件下三种非对称结构的导热特性及热整流效应。同时借助于声子波包模拟方法,获得了不同频率下的声子在非对称结构处的散射特性,指出声子透射率差异是决定非对称纳米结构热整流效应的主要因素。

关键词: 界面;热物性;半导体纳米结构;分子动力学模拟;声子输运

Abstract

With the wide application of nanomaterials in electronic devices, the interfacial thermal property has become an indispensable parameter in the thermal design of nano-devices. However, the mechanisms and parameters that dominate the interfacial thermal property are not fully understood so far. In this thesis, the thermal property and the phonon transmission property of interfaces in semiconductor nanostructures are investigated by molecular dynamics simulation, phonon wave packet simulation, theoretical analyses and femtosecond pump-probe thermoreflectance method, aiming to reveal the parameters and mechanisms that affect the thermal property of interfaces in nanostructures.

The interfacial thermal resistance in bi-layer nanofilms is investigated by the nonequilibrium molecular dynamics simulation. The relationships among the interfacial thermal resistance, interfacial temperature, film thickness, heat flux direction and film materials are studied. Discussion and analysis based on the phonon density of states and the phonon transmission coefficient indicate that the interfacial thermal resistance depends not only on the overlap of phonon density of states, but also on the frequency distribution. The thermal rectification of bi-layer nanofilms is found due to the phonon frequency shift at different temperatures by using the phonon transmission coefficient and the Landauer formula. The thermal rectification under different ensembles can be quite different. The interfacial thermal resistances in nanofilms are also measured by using the double-color femtosecond pump-probe thermal reflectance system, and the result indicates that the film thickness has no obvious influence on the interfacial thermal resistance.

The phonon transmission in one-dimensional atomic chain and nanocomposites are calculated by the phonon wave packet simulation. A

multi-scattering model is proposed which can predict the transmission coefficient in nanocomposites with periodic-particles and the results agree well with the direct phonon wave packet simulation. The decomposition phenomenon of phonon wave packet is also studied and it is found that the decomposition obey the phonon dispersion relationship, which suggests a new method to obtain the phonon dispersion relationship of materials.

The nanocrystalline thermal conductivity calculation is conducted by direct molecular dynamics simulation by using the three-dimensional Voronoi tessellation method, and the thermal conductivities of nanocrystalline bulk materials as well as the nanocrystalline nanofilm are investigated. The results indicate that the nanocrystalline thermal conductivity is far below that of the single crystal bulk material. The reduction can be attributed to the grain boundary thermal resistance from interfaces in nanocrystalline materials as well as their limitations on the phonon mean free path. The average grain size is found to be the most important parameter that determines the nanocrystalline thermal conductivity, which indicates that the thermal property of nanocrystalline materials can be controlled by the average grain size.

Three structures are designed including asymmetric silicon nanoribbons, silicon nanofilms with cone cavity and triangle holes, in consideration that asymmetric structures could result in thermal rectification. The thermal property and thermal rectification in these structures under different temperatures and geometry sizes are investigated by the nonequilibrium molecular dynamics simulation. The transmission coefficient in the asymmetric structures for phonons with different frequencies is obtained by the phonon wave packet simulation. The difference in phonon transmission coefficient is regarded as the main cause for the thermal rectification in asymmetric nanostructures.

Key words: interfaces; thermal property; semiconductor nanostructures; molecular dynamics simulation; phonon transport

主要符号对照表

A	横截面积[m^2]
AMM	声学不匹配模型
C_{11}, C_{14}	弹性常数 [Pa]
c	定容比热容[$\text{Jkg}^{-1}\text{K}^{-1}$]
DMM	扩散不匹配模型
d	薄膜厚度[m]
E	晶界能量[J]
G	界面热导[$\text{WK}^{-1}\text{m}^{-2}$]
H	信号频域响应
J	热流[W]
k	波矢[m^{-1}]
l	声子平均自由程[m]
m	原子质量[kg]
Q	激光热流[W]
q	热流密度[Wm^{-2}]
R	热阻[m^2KW^{-1}]
R_{pump}	泵浦光光斑半径[m]
R_{probe}	探测光光斑半径[m]
r	径向坐标[m]
S	敏感度
T	温度[K]
t	时间[s]
UC	晶格单位
u	原子位移[m]
V	体积[m^3]
V_{in}	实部信号 [V]

V_{out}	虚部信号 [V]
v	声速 [ms^{-1}]
W	波包幅值 [m]
Z	声学阻抗 [$\text{kgm}^{-2}\text{s}^{-1}$]

希腊字母

Γ	声子界面能量透射系数
ΔT	温度降 [K]
ϵ	势阱 [J]
η_r	热整流系数
θ	温度 [K]
$\bar{\theta}$	Hankel 变换温度 [K]
Δ	平均晶粒尺寸 [m]
λ	热导率 [$\text{Wm}^{-1}\text{K}^{-1}$]
ξ	表面反射系数
ρ	密度 [kgm^{-3}]
σ	长度 [m]
τ	延迟时间 [s]
ϕ	势能 [J]
χ	波包宽度 [m]
ω	角频率 [rad/s]

下标

+	正向热流
-	反向热流
b	薄膜底面
bound	边界
cold	冷端
ele	电子
gb	晶界
hole	小孔