



国家自然科学基金委员会理论物理专款

21世纪理论物理及其交叉学科前沿丛书

# 纳米材料热传导

段文晖 张刚 编著



科学出版社

国家科学技术学术著作出版基金资助出版  
21世纪理论物理及其交叉学科前沿丛书

# 纳米材料热传导

段文晖 张 刚 编著

科学出版社

北京

## 内 容 简 介

随着以量子力学为核心的当代物理学的发展，人们对客观世界的认识不断深入，这极大地推动了科学技术的发展。近年来，基于实验技术的提高，人们已经可以构筑并直接测量一些新型的纳米体系。在实际应用中，纳米器件将产生相当多热量，如何将这些热量传导出去已成为纳米电子学中的重要课题。对于半导体材料，声子是热能传输的主要载体。声子是晶格振动产生的准粒子，其在低维体系中的输运行为与宏观体系有着很大的区别，表现出很多新奇的物理现象。本书针对这一热点问题，以热传导为主线，系统介绍一维、二维纳米材料的热传导性质，并详细阐述常用的理论、计算及实验研究方法。本书涵盖的内容包括：一维材料热传导、二维材料热传导、分子动力学、非平衡格林函数、玻尔兹曼输运方程、散射矩阵等常用的理论研究方法，以及相关的实验研究方法。此外，还介绍了新型声子器件的理论与应用。

本书的读者对象主要是具备量子力学和固体物理基本知识的高年级本科生以及相关专业的研究生、科研人员和教学人员，其目的是帮助读者对纳米材料热传导性质有一个全面的了解，并初步掌握较为具体的研究方法。

### 图书在版编目(CIP)数据

纳米材料热传导/段文晖，张刚编著. —北京：科学出版社，2016.12

(21世纪理论物理及其交叉学科前沿丛书)

ISBN 978-7-03-051137-9

I. ①纳… II. ①段… ②张… III. ①纳米材料-热传导 IV. ①TB383

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2016) 第 312624 号

责任编辑：钱俊 / 责任校对：钟洋

责任印制：张倩 / 封面设计：无极书装

科学出版社 出版

北京东黄城根北街 16 号

邮政编码：100717

<http://www.sciencep.com>

北京通州皇家印刷厂 印刷

科学出版社发行 各地新华书店经销

\*

2017 年 1 月第 一 版 开本：720 × 1000 1/16

2017 年 1 月第一次印刷 印张：24 1/2 彩插 5

字数：468 000

定价：158.00 元

(如有印装质量问题，我社负责调换)

# 《21世纪理论物理及其交叉学科前沿丛书》

## 编 委 会

主 编：夏建白

编 委：（按姓氏拼音排序）

蔡荣根	陈润生	董国轩	黄 涛
汲培文	李树深	梁作堂	刘 杰
刘 伟	楼森岳	卢建新	罗民兴
孟庆国	倪培根	欧阳钟灿	蒲 钩
任中洲	孙昌璞	陶瑞宝	王玉鹏
吴岳良	谢心澄	邢志忠	张守著
张卫平	赵光达	郑 杭	庄鹏飞

# 《21世纪理论物理及其交叉学科前沿丛书》

## 出版前言

物理学的研究范畴很广，涉及从夸克到宇宙多层次的物质结构及其运动规律。物质结构从层次上讲，夸克、轻子—强子—原子核—原子—分子—团簇—凝聚态—生命物质—恒星—星系—宇宙，每个层次上都有自己的基本规律需要研究，而这些规律又是互相联系的。其分支学科涉及原子物理、分子物理、核物理、声、光、电、磁及其与物理学相关的跨学科的诸多方面内容。物理学又是许多学科（如化学、生物学、地球科学和工程学）的基础。因此，物理学是研究物质、能量、时间和空间以及其相互作用和运动规律的科学，也是最具基础性、前沿性、交叉性和综合性的学科。20世纪科学发展历史证明，理论物理学的一些重大突破（如量子力学和相对论）不仅常会带来新方向，产生新领域，推动新的学科交叉及技术革命，甚至能导致人类时空观、自然观的革命性变革。物理学的研究结果深入到社会发展和人们日常生活中，社会财富的增长、经济的全球化、生命的质量和生活的标准在很大程度上依赖于技术，技术进步又在很大程度上依赖于物理学的创新研究。因此，各国政府非常重视物理学的发展，在新世纪纷纷制订物理学的发展计划，并采取一系列创新举措。

理论物理学是对自然界各个层次的物质结构和运动基本规律进行理论探索和研究的学科。由此建立的基本理论不仅成为描述和解释自然界已知的各种物理现象和运动规律的理论基础，而且还是预言和发现自然界未知的物理现象和基本规律的理论依据。理论物理学乃至整个物理学的发展是一个在概念、思想方式上不断变革的历史。历史上，当牛顿力学在19世纪取得了辉煌的成果之际，那种认为物理学甚至整个自然界的运动都可以而且应当归结为力学运动的机械自然观应运而生。1900年，普朗克在对黑体辐射能谱分布规律的研究中提出了“作用量子”的概念，这是从经典物理学迈进量子物理学的第一步。1905年，爱因斯坦又在对光电效应等问题的研究中，把普朗克的量子化关系推广到光，认为光在与物质相互作用时，每次交换一个能量为频率乘以普朗克常数的“光量子”。1913年，玻尔提出了原子的量子论，又称原子的玻尔模型。这项工作开创了微观物质系统量子理论的先河，并且为后来量子力学这门新的学科的兴起起到了不可缺少的桥梁作用。以后由于海森伯、玻恩、薛定谔、泡利、狄拉克等物理学家的奠基性工作，量子力学趋于成熟，得到了完善。戴森在评论量子力学发展历史时说：“在任何一门科学分支里，新概念难以掌握的原因常常是相同的；当时的科学家总要用先前已经存在的观念

去描绘新的概念。发现者本人更是由于这一困难而受尽折磨；他同旧的观念搏斗以得出新的概念，而在以后的一段长时间内，他思维的语言内仍然保留着旧的观念。”只是在放弃了旧观念之后，新的概念才变成“某种基本的和不可约简的东西。一种以它自己的权利存在着的物理客体，它不再需要用什么别的东西来解释了”。

按照费曼的意见，发现新的科学规律的过程是从猜想开始的，其中使用的是尝试和纠错的方法。他说：“猜想从何而来是完全不要紧的，重要的是要同实验相符合。”费曼还强调，理论是不可能由经验直接推出来的，因为“物理学定律常常同经验没有直接的关系，现实经验的细节常常同基本定律相距甚远”。

恩格斯说过：“随着自然科学领域中每一个划时代的发现，唯物主义必定要改变自己的形式。”在 20 世纪物理学革命中，相对论和量子力学的新理论运用了一些比以前更加不合乎常规经验的抽象思考方式，这充分证明了科学实验是检验科学理论正确与否的唯一标准，又充分发挥了人类精神的主观能动性，宣告同以往的经验主义彻底决裂。

新世纪开始，物理学面临了一次又一次新的挑战。巨大的“哈勃”太空望远镜观测到了迄今所发现的银河系中最古老的白矮星。这为确定宇宙年龄提供了一种全新的途径。WMAP 对微波背景辐射观测的结果告诉我们，宇宙中普通物质只占 4%，23% 的物质为非重子暗物质，73% 是暗能量，占宇宙成分的 95% 以上的暗物质和暗能量究竟是什么目前还不清楚。中微子是一种暗物质粒子，但它的质量非常小，在暗物质中只能占微小的比例，绝大部分应是所谓的冷或温的暗物质。对基本粒子标准模型的研究取得了很大的成功，然而它却无法解释暗物质和暗能量的本质，不能解答宇宙中正、反物质不对称的疑难。

天文学上的发现总是让物理学家激动不已。天文学家宣称可能已经发现两颗宇宙中最奇怪的星体——由夸克的亚原子粒子“浓汤”组成的星体，称为奇异星，又称夸克星。此类星体将给物理学家提供一个弄清中子的组成成分——夸克和奇异夸克的机会。

新年伊始又传来了振奋人心的消息，2016 年 2 月 11 日美国科学家宣布人类首次直接探测到引力波。引力波是爱因斯坦广义相对论所预言的一种以光速传播的时空波动。这次探测到的引力波是由 13 亿光年之外的两颗黑洞在合并的最后阶段产生的。两颗黑洞的初始质量分别为 29 倍太阳和 36 倍太阳，合并成了一颗 62 倍太阳质量高速旋转的黑洞，亏损的质量以强大引力波的形式释放到宇宙空间，被“激光干涉引力波天文台 (LIGO)”的两台孪生引力波探测器探测到。引力波的探测，不仅验证了广义相对论的预言，其意义远远超出了检验广义相对论本身。LIGO 打开了一扇探索宇宙的新窗口，人们将在未来探测到更多的未知的引力波源和原初引力波。引力波的发现是科学史上的里程碑，它将开创一个崭新的引力波天文学研究领域，揭示宇宙奥秘。

此外，在近二三十年间物理学的其他领域也发展迅速，特别是与其他学科（如数学、化学、生物、信息、材料等）交叉的领域发展方兴未艾，具有巨大的发展前景。在凝聚态物理方面，有高温超导、量子和分数量子霍尔效应、自旋量子霍尔效应、电子隧道扫描显微镜、石墨烯和半导体微结构、巨磁阻效应和自旋电子学等。在原子、分子物理学方面有激光冷却和陷阱、原子玻色-爱因斯坦凝聚、超短光脉冲源以及量子光学、量子信息和量子计算机等。这些研究不仅具有重要的理论意义，而且具有重要的应用前景。量子信息技术是光学、原子物理、固体物理与计算机科学密切结合的交叉学科研究的极好例子。

当前国内正处于基础研究发展的最好时机，在国家自然科学基金委员会数理学部“理论物理专款”项目的支持下，我们编辑出版这套《21世纪理论物理及其交叉学科前沿丛书》，目的是介绍现代理论物理及其交叉学科前沿领域的基本内容、最新进展和发展前景，以及中国科学家在这些领域中所取得的重大进展。希望本丛书能帮助大学生、研究生、博士后、青年教师和研究人员全面了解理论物理学研究进展，培养对物理学研究的兴趣，迅速进入有关的研究领域，同时吸引更多的年轻人投入和献身到理论物理学的研究中来，为发展我国的物理学研究并使之在国际上占有一席之地作出自己的贡献。

## 序

闻知段文晖教授和张刚教授主持编著的《纳米材料热传导》将由科学出版社出版，我感到非常高兴！两位教授都曾是我的学生，先后在清华大学完成了本科和研究生学业，又曾到世界顶尖的一流大学从事访问研究，目前分别在清华大学和新加坡高性能计算研究院工作。这本书凝聚了他们多年来潜心研究的成果，可喜可贺。

热传导物理是固体物理研究的重要方向之一。固体中声子态与电子态决定了固体的几乎一切物理性质，是从微观层次了解固体性质、进而利用并加以改造的基础。声子是固体中晶格集体激发的准粒子。由于晶格间的相互作用通常不是简单的简谐作用，非线性效应对声子相关性质起到重要甚至决定性的作用。对声子输运的研究，也跟非线性理论、量子输运等基础物理理论密切相关。

近年来，随着加工技术的发展，人们制备出低维量子结构，如量子点、二维电子气和超晶格结构。此外，得益于生长技术的发展，更多低维纳米材料（如一维材料纳米管、纳米线，二维材料石墨烯等）被成功制备出来。很多物理效应，特别是统计物理中的效应，是与维度密切相关的。从代表宏观体材料的三维体系演变到二维及一维体系，其中的声子性质会发生显著的变化，同时反映到热传导性质的变化。这就带来一系列的理论问题，比如：这些低维材料中的声子性质与三维体材料相比，有何不同之处？对热传导性质有什么影响？等等。这些问题吸引了大批科学家从理论和实验的角度进行系统研究，发现了许多有趣的物理现象。例如，通常用来描述体材料热传导性质的傅里叶定律在一维纳米材料中不再成立，具体的表现就是碳纳米管的热导率随长度增加而增加，表现出反常热传导行为。

纳米材料的声子性质以及声子在低维纳米材料中的输运行为，是当前国际上的研究热点。这一问题的研究既具有基础研究的意义，也和纳米材料在信息科学技术领域的实际应用密切相关。本书编著者针对这一重要课题，从热传导的基本原理入手，描述纳米材料的热传导性质，讲授热传导研究的常用方法，兼顾理论、计算模拟和实验研究。此外，还介绍了新型声子器件的理论与应用。

值得指出的是，本书的编著人员从事纳米材料热传导研究多年，取得了很多重要成果。在本书中，他们结合自己的研究经验，系统介绍了纳米材料热传导中具体的理论、计算和实验研究方法，既包括一维、二维纳米材料热传导性质，也包括分子动力学、非平衡格林函数、散射矩阵理论、量子主方程理论和玻尔兹曼输运方程等常用的计算方法，还涵盖了常用实验测量手段。这样便于初学者对该领域的基本问题有一个很直接的理解，并可以快速掌握所需的研究方法。

纳米材料热传导是一个非常重要的、充满活力的研究领域，正在吸引越来越多的青年学生和学者加入其中。从事这个方向研究的学者，可以通过本书，全面了解这一领域已有的研究成果和常用的研究方法，拓宽视野，互取所长。我相信，本书的出版对推进这一学科方向的研究更广泛和深入地开展，以及促进相关领域的人才培养和新学科的发展，一定能起到积极作用。我也衷心期待段文晖教授、张刚教授以及广大的研究工作者，在相关领域取得更加丰硕的成果。

顾秉林

2016 年秋于清华园科学馆

## 前　　言

20世纪初，以量子力学和相对论为代表的物理学的革命，解决了物理学“两朵乌云”的疑难，这不仅推动了化学、材料科学、生命科学等学科的飞速发展，还催生了以信息科学技术为标志的众多高新技术领域。将量子力学的基本原理应用到固体物理领域，发展出了电子的能带结构理论。而电子的能带理论又指导人类对具有重要应用价值的新材料进行探索，给出了设计新材料的方向。随着半导体工艺技术的成熟，人类进入了信息化时代，引起了人类社会科技、文化、经济、思想各个领域的翻天覆地的变革。可以说，20世纪下半叶是人类社会迄今发展最快速的时期。而这一切的基础就是新物理与新材料的相互融合和促进。

近年来，基于实验技术的提高，人们已经可以构筑并直接测量一些新型的低维体系，从中发现的新的物理机制、物理效应为相关学科的发展提供了坚实的基础，并为能源信息等国民经济与国家安全的重要领域的突破提供了契机。低维系统是指物理系统在某个或某几个维度方向上的尺度与其费米面附近电子的德布罗意波长或激子的玻尔半径可比。典型的受限小量子系统有量子点、C<sub>60</sub>、纳米线、纳米管、准二维的超薄固体以及二维材料，如单层石墨烯。由于系统尺度小于或可比于费米面附近的量子相位相干长度，因此量子力学波函数的相位因子和相位相干性将起主导作用。这是在宏观系统中不会出现的效应。科学家已经发现并正在进一步揭示低维纳米材料中的各种新奇物理现象和规律。例如，精细的量子能级、单个微观量子的波函数及相干过程、量子纠缠现象。低维纳米体系的概念涵盖了半导体、磁性材料以及介电和铁电等各种功能材料，其空间形态包含了从二维、一维直至零维的所有形式。因此，对低维体系的物理现象的深入研究，不仅对于深入理解包括相位、对称性在内的基本物理原理具有重要意义，而且与当前微纳电子器件进入原子尺度后发展的趋向、与量子信息技术发展所要求的更高的信息传输和处理速度密切相关，具有广阔深远的应用前景。

总的来讲，目前人们对低维纳米材料的电子、光子性质和相互作用研究最多。除电子和光子外，声子也是重要的信息和能量的载体，对应于固体中晶格振动的量子化。在纳米材料中，也表现出很多与宏观材料不同的声子性质。例如，对于体材料，在温度趋近零温时，热导率按温度的三次方变化；而在半导体纳米线中，随纳米线直径减小，热导率对温度的依赖关系变为二次方，甚至是线性依赖。此外，纳米材料热传导的一个重要特点是存在反常热传导。传统上，傅里叶定律被用来描述材料中的热传导，其核心思想是材料的热导率为一个常数，与体系的尺寸无关。这

是关于热传导的基本物理定律。在宏观尺度，傅里叶定律已被大量实验和理论工作所证实。对碳纳米管和硅纳米线热导率的理论计算和实验研究表明，一维纳米材料热导率随长度增加而增加，即使体系的长度远大于声子平均自由程，其热导率仍然没有收敛。通过研究热脉冲的传输行为，人们已经证明这种热导率随长度变化的现象的物理起源是其中的反常能量输运。这些工作指出了一维纳米体系中热传导的特殊性。

从 20 世纪末开始，纳米材料的热输运性质吸引了大量的理论和实验研究，其中一个推动力是纳米功能器件的散热问题。当电子在固体中传输时，电子态会受到声子态的散射，从而产生能量耗散。如何将这些热量传播出去成为纳米电子学中的重要课题。此外，对材料热性质的研究也和目前广受关注的能源和环境问题密切相关。全球约 90% 的电能由火力发电机产生，而常用的火力发电机的效率只有 30%~40%，大量的热量耗散到环境中去，造成了经济损失和环境热污染，同时加剧了二氧化碳等温室气体的排放。应用热电材料可以有效地将废热直接转换为电能，大幅提高能源的利用效率。热电材料的研究不仅对火力发电厂余热再利用有所贡献，还可应用到钢厂余热利用、汽车尾气余热回收等方面。此外，还可以发展太阳能光电-热电综合发电系统。而材料的热导率就是决定其中热-电能量转化效率的关键性质之一。

中国科学家在这个领域做了大量卓越的工作。20 世纪 40 年代，黄昆先生和玻恩一起发展了晶格动力学理论以及后来被称为“黄昆方程”的一系列理论。这为人们从微观的原子模型研究固体的声子及热学性质奠定了理论基础，成功揭示了声学声子、光学声子以及声学波与电磁波的耦合特性。20 世纪 80 年代，以“黄朱模型”为代表的半导体超晶格声子模式理论的发展，揭开了低维体系声子性质研究的序幕，引发了一系列的理论、计算和实验研究。在国内外出版的专著中，最具代表性的是陶文铨先生所著的《传热与流动问题的多尺度数值模拟：方法与应用》。这本专著全面介绍了传热与流体问题数值计算方面的研究进展，特别是多尺度与跨尺度数值计算的最新成果，如格子-玻尔兹曼方法、直接模拟蒙特卡罗法和分子动力学模拟。与陶先生的专著相比，本书将侧重点放在纳米材料中声子热传导的新奇物理效应方面，同时全面介绍常用的理论和实验方法，包括分子动力学模拟、非平衡格林函数方法、结合第一性原理计算的声子玻尔兹曼输运理论、传输矩阵方法、实验上的热桥测量以及拉曼谱测量方法。其中的非平衡格林函数方法可以深入研究声子的量子热传导，是探讨低维体系声子的量子行为的有力工具。此外，本书还较详细地介绍了纳米材料的独特应用，如热整流器、热三极管、热隐身技术在宏观体系无法实现的新型热功能器件。

纳米材料热传导是一个新兴的领域，蕴含着大量的科学问题。完成这样一部专著，是一项非常艰巨的任务。衷心感谢全书各章节作者的共同努力，正是他们的卓

越贡献才使得本书能够顺利出版，同时也感谢国家科学技术学术著作出版基金对本书出版的资助。希望本书能够起到抛砖引玉的作用，吸引更多的科技工作者进入这个领域，为增强我国的科技竞争力、为人类探索未知领域做出贡献。虽已尽力，我们也深感学识的浅薄和时间的仓促，本书不妥之处在所难免，诚恳希望读者提出宝贵的意见，以便再版时修正。

科学技术的发展为人类文明的进步做出了巨大的贡献，科技工作者是推动科技进步的主体。但在这些背后，是家人长期的默默支持和奉献。最后，特别感谢家人和朋友们一直以来的关心、支持和帮助。

段文晖

于北京清华园

张刚

于新加坡科技园

2015 年冬

# 目 录

## 序

## 前言

<b>第 1 章 晶格振动与热传导的基本理论</b> .....	1
1.1 晶格振动的经典理论 .....	1
1.1.1 一维单原子链 .....	2
1.1.2 一维双原子链 .....	5
1.2 晶格振动的量子理论 .....	8
1.2.1 声子的概念 .....	8
1.2.2 晶格比热 .....	9
1.3 热导率 .....	11
1.3.1 声子热导和傅里叶定律 .....	11
1.3.2 电子热导 .....	14
1.3.3 热电势 .....	15
1.4 一维简谐格点模型 .....	15
1.5 一维非简谐格点模型 .....	18
参考文献 .....	21
<b>第 2 章 二维材料的基本物理性质</b> .....	23
2.1 石墨烯的基本物理 .....	23
2.2 过渡金属二硫族化合物 .....	29
2.3 黑磷 .....	34
2.4 其他二维材料 .....	37
2.4.1 硅烯 .....	37
2.4.2 锗烯 .....	39
2.4.3 锡烯 .....	41
2.4.4 二维氯化硼以及硼氮碳杂化材料 .....	41
2.4.5 二维硒化镓 .....	42
参考文献 .....	43
<b>第 3 章 一维材料热传导</b> .....	46
3.1 纳米管 .....	48
3.1.1 碳纳米管的高热导率和尺寸效应 .....	48
3.1.2 碳纳米管中的反常热扩散 .....	51

3.1.3 影响碳纳米管热导率的因素 .....	55
3.1.4 纳米管与热整流 .....	56
3.2 纳米线 .....	59
3.2.1 几何效应对热输运的影响 .....	60
3.2.2 纳米线中的散射机制 .....	64
3.2.3 同轴纳米线中的共振效应 .....	70
3.3 一维高分子聚合物 .....	72
3.4 本章小结 .....	76
参考文献 .....	76
<b>第 4 章 二维材料热传导特性 .....</b>	<b>81</b>
4.1 石墨烯 .....	81
4.1.1 石墨烯的热导率 .....	82
4.1.2 影响石墨烯热导率的因素 .....	85
4.1.3 应用 .....	96
4.2 二硫化钼的热性质 .....	99
4.2.1 二硫化钼声子谱 .....	100
4.2.2 单层二硫化钼的热导率 .....	102
4.2.3 模式贡献及与石墨烯的比较 .....	104
4.3 磷烯的晶格热导 .....	105
4.3.1 磷烯的声子性质 .....	105
4.3.2 磷烯的各向异性热导率 .....	107
4.3.3 势函数 .....	108
4.4 其他二维材料 .....	109
4.4.1 氮化硼热导率 .....	109
4.4.2 硅烯材料热性质 .....	109
参考文献 .....	111
<b>第 5 章 声子非平衡格林函数方法 .....</b>	<b>115</b>
5.1 量子热输运 .....	115
5.1.1 热输运：从经典到量子 .....	115
5.1.2 量子热导 .....	116
5.2 声子非平衡格林函数方法 .....	120
5.2.1 声子哈密顿量与简谐近似 .....	120
5.2.2 声子热流 .....	121
5.2.3 局域声子热流 .....	128
5.2.4 表面格林函数 .....	128

5.2.5 声子态密度 .....	129
5.2.6 声学求和规则与声学支 .....	130
5.2.7 声子与电子格林函数方法的对比 .....	134
5.3 声子 NEGF 方法的应用 .....	134
5.3.1 一维原子链 .....	135
5.3.2 NEGF 数值计算 .....	140
5.3.3 实际体系的 NEGF 计算 .....	141
5.4 本章小结 .....	145
附录 .....	145
A.1 Dyson 方程 .....	145
A.2 小于自能函数 .....	146
A.3 式 (5.2.52) 积分核的对称性 .....	147
参考文献 .....	148
<b>第 6 章 分子动力学方法 .....</b>	<b>151</b>
6.1 分子动力学简介 .....	151
6.2 基本原理与模拟流程 .....	152
6.2.1 基本概念 .....	152
6.2.2 分子动力学模拟流程 .....	155
6.2.3 势函数 .....	156
6.2.4 数值积分算法 .....	159
6.2.5 量子修正 .....	160
6.3 热导率计算方法 .....	162
6.3.1 非平衡态模拟 .....	162
6.3.2 平衡态模拟 .....	168
6.4 声子相关性质计算 .....	176
6.4.1 声子态密度 .....	176
6.4.2 声子色散关系 .....	177
6.4.3 声子参与率 .....	180
6.4.4 声子群速度 .....	181
6.4.5 声子弛豫时间 .....	182
参考文献 .....	185
<b>第 7 章 玻尔兹曼方程输运计算 .....</b>	<b>189</b>
7.1 晶格振动的基本属性 .....	190
7.1.1 声子散射 .....	190
7.1.2 第一性原理计算 .....	191

7.2 声子玻尔兹曼输运方程 .....	192
7.2.1 线性化声子玻尔兹曼方程 .....	192
7.2.2 迭代求解声子玻尔兹曼方程 .....	193
7.2.3 Callaway 模型 .....	194
7.3 数值计算中的问题和处理 .....	196
7.3.1 独立三阶力常数 .....	196
7.3.2 三阶力常数求和规则 .....	197
7.3.3 $\delta$ 函数的处理 .....	198
7.4 示例 .....	199
7.4.1 GaN .....	199
7.4.2 复杂材料 skutterudites .....	200
7.4.3 二维 MoS <sub>2</sub> .....	202
7.4.4 合金 .....	203
7.4.5 纳米线 .....	204
7.5 存在的挑战和展望 .....	206
参考文献 .....	206
<b>第 8 章 散射矩阵方法在声子热传导方面的应用 .....</b>	<b>211</b>
8.1 低维量子结构中声子热输运 .....	211
8.2 理论与计算方法 .....	213
8.2.1 弹性波理论 .....	213
8.2.2 散射矩阵方法 .....	219
8.2.3 朗道热输运理论 .....	234
8.3 低维量子结构中低温弹性热输运性质研究 .....	236
8.3.1 二维量子结构中弹性热输运性质研究 .....	236
8.3.2 三维量子结构中弹性热输运性质研究 .....	240
8.3.3 六支低阶振动模的热输运性质研究 .....	242
8.3.4 含缺陷量子结构中低温热输运性质的对比研究 .....	243
8.4 总结 .....	245
参考文献 .....	245
<b>第 9 章 声子热传导的模型研究 .....</b>	<b>251</b>
9.1 Klemens 热传导模型 .....	251
9.2 Callaway 模型 .....	255
9.3 石墨烯条带热导率 .....	259
9.4 空位缺陷效应 .....	264
参考文献 .....	267

<b>第 10 章 非平衡声子输运的数学模型</b>	268
10.1 玻尔兹曼输运方程的推导及数学结果	268
10.2 傅里叶定律	274
10.3 热导率：傅里叶定律和非傅里叶定律	277
10.3.1 扩散尺度	277
10.3.2 双曲尺度	279
10.3.3 中间尺度	281
参考文献	283
<b>第 11 章 低维材料热传导测量技术及实验进展</b>	285
11.1 悬空微桥法	285
11.1.1 悬空微桥法背景	285
11.1.2 悬空微桥法测量原理	285
11.1.3 悬空器件加工过程	287
11.1.4 悬空微桥法测量极限及误差分析	288
11.1.5 悬空微桥法发展现状	291
11.1.6 电子束自加热法	294
11.2 拉曼测量法	296
11.2.1 拉曼测量二维材料热导率	296
11.2.2 拉曼法测量一维材料热导率	298
11.2.3 误差分析	299
11.2.4 双激光拉曼法	300
11.3 $3\omega$ 法	301
11.3.1 $3\omega$ 法用于块体材料测量	302
11.3.2 $3\omega$ 法用于薄膜材料测量	304
11.3.3 $3\omega$ 法用于一维材料测量	305
11.3.4 测量电路	307
11.4 时域热反射法	308
11.4.1 时域热反射法实验装置	308
11.4.2 TDTR 测量原理	310
11.4.3 TDTR 温度模型	311
11.5 热扫描探针法	312
11.5.1 SThM 基本原理	312
11.5.2 SThM 探针类型	313
11.5.3 SThM 测量模式	314
11.5.4 SThM 热传递通道分析	315
11.5.5 SThM 的应用	316