

清华大学优秀博士学位论文丛书



低维材料及其界面的 热输运机制与模型研究

王艳磊 著 Wang Yanlei

Research on
Thermal Transport Mechanism and Model of
Low-Dimensional Materials and Their Interfaces

清华大学出版社
TSINGHUA UNIVERSITY PRESS



清华社官方微信号



扫我有惊喜

ISBN 978-7-302-53267-5



9 787302 532675 >

定价：89.00元

清华大学优秀博士学位论文丛书

低维材料及其界面的 热输运机制与模型研究

王艳磊 著 Wang Yanlei

Research on
Thermal Transport Mechanism and Model of
Low-Dimensional Materials and Their Interfaces

北京师范大学内部使用

清华大学出版社
北 京

内 容 简 介

本书是作者在其博士学位论文的基础上总结、改进、提炼而形成的学术著作。本书通过运用大规模分子动力学模拟与理论分析相结合的方法,重点研究了石墨烯等低维材料中缺陷、无序度、弱耦合界面和强耦合界面等因素影响热输运过程的微观机制,进而基于分子动力学模拟的结果构建了适用于不同低维体系的预测热输运过程的理论模型,促进了对低维材料热输运过程的合理理解,可为微纳米电子器件热管理、新型相变传热材料设计等提供一定的科学参考依据和新思路。

本书可供微纳米材料与器件设计领域相关的学者和科研人员参考。

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

低维材料及其界面的热输运机制与模型研究/王艳磊著. —北京:清华大学出版社,2019

(清华大学优秀博士学位论文丛书)

ISBN 978-7-302-53267-5

I. ①低… II. ①王… III. ①纳米材料—热传导—研究 IV. ①TB383

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2019)第 138263 号

责任编辑:黎强 戚亚

封面设计:傅瑞学

责任校对:王淑云

责任印制:丛怀宇

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 刷 者:三河市铭诚印务有限公司

装 订 者:三河市启晨纸制品加工有限公司

经 销:全国新华书店

开 本:155mm×235mm 印 张:10.25 插 页:6 字 数:182 千字

版 次:2019 年 10 月第 1 版

印 次:2019 年 10 月第 1 次印刷

定 价:89.00 元

产品编号:080939-01

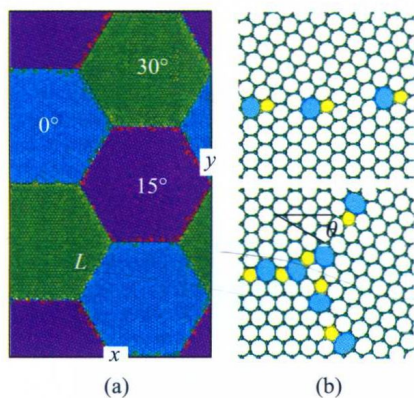


图 2.1 多晶石墨烯的原子结构图

(a) 由三种晶粒拼接而成的、晶粒尺寸为 L 的多晶石墨烯的原子结构；(b) 多晶石墨烯中的晶界的原子结构，晶界由 5|7 元环构成

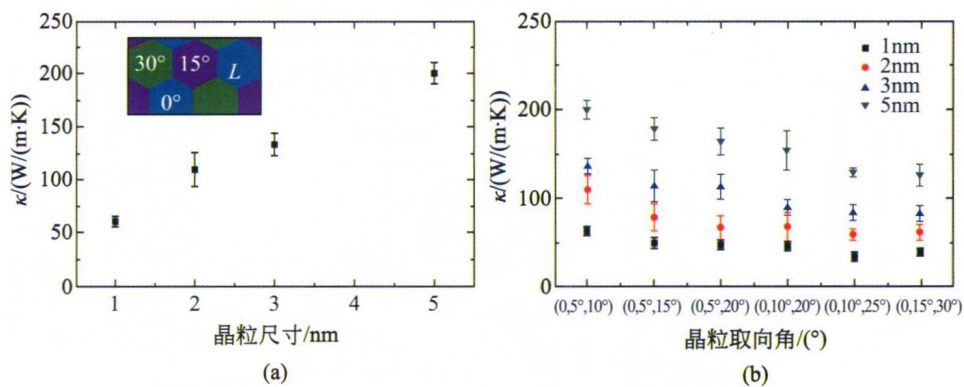


图 2.3 不同结构多晶石墨烯的热导率

(a) 不同晶粒尺寸的晶界角为 $(0, 5^\circ, 10^\circ)$ 的多晶石墨烯的热导率；(b) 不同晶界角的多晶石墨烯的热导率，晶界角从左到右依次为 $(0, 5^\circ, 10^\circ)$, $(0, 5^\circ, 15^\circ)$, $(0, 5^\circ, 20^\circ)$, $(0, 10^\circ, 20^\circ)$, $(0, 10^\circ, 25^\circ)$ 及 $(0, 15^\circ, 30^\circ)$

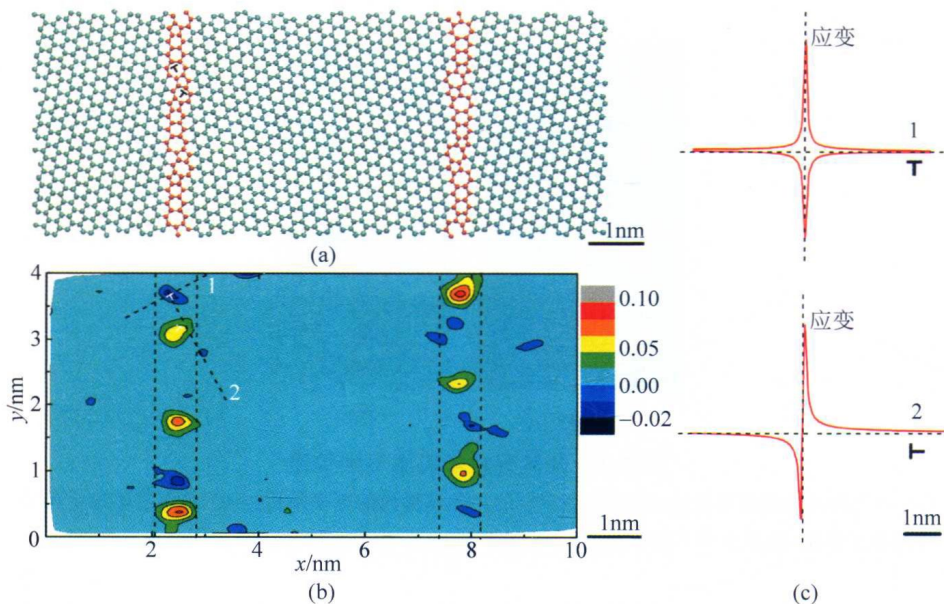


图 2.6 双晶石墨烯的应变分布

(a) 晶界角为 15.4° 的双晶界石墨烯的原子结构；(b) 利用 MD 方法计算得到的双晶界石墨烯的切应变的空间分布；(c) 根据式(2-6)计算的单个位错引起的切应变场,方向如图(b)所示

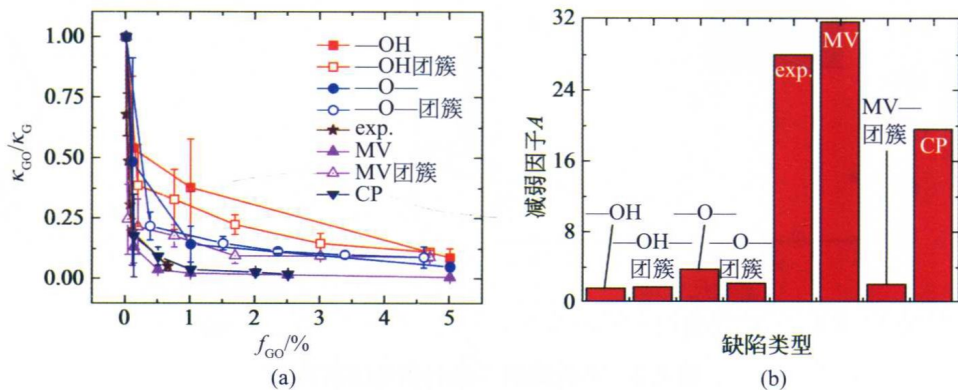


图 2.10 GO 的热导率对比

(a) 不同氧化官能团的 GO 的热导率及实验测量结果；(b) 不同类型氧化官能团对应的热导率减弱因子

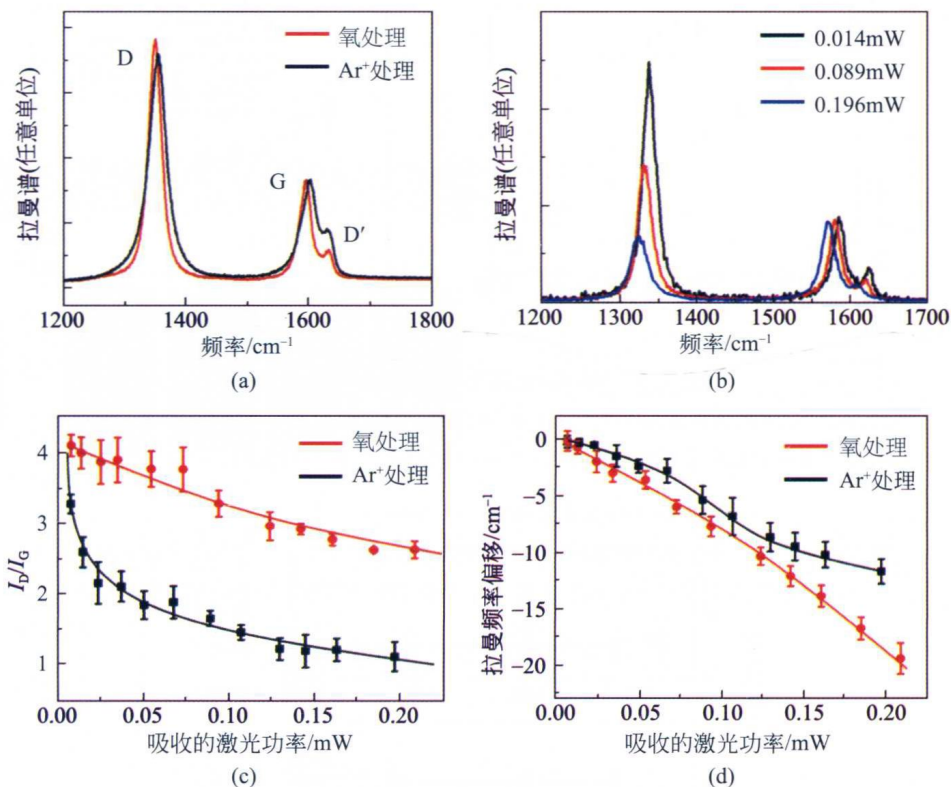


图 2.11 GO 的拉曼光谱及其特征峰偏移量

(a) 氧等离子体及 Ar^+ 等离子体处理样品得到的 GO 的拉曼光谱; (b) Ar^+ 等离子体处理得到的 GO 在不同的激光吸收功率下的拉曼光谱; (c)~(d) 氧等离子体及 Ar^+ 等离子体处理样品得到的 GO 在不同激光吸收功率下的 I_D/I_G 比值及频率偏移量

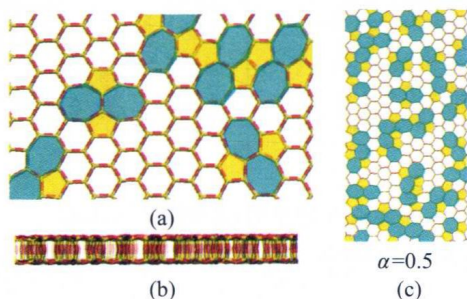


图 3.1 2D bi-silica 的原子结构图

(a) 2D bi-silica 结构的俯视图, 5|7|7|5 Stone-Wales 拓扑缺陷用黄色和天蓝色表示, 红色表示氧原子, 黄色表示硅原子; (b) 2D bi-silica 结构的侧视图; (c) 无序度 $\alpha=0.5$ 的 2D bi-silica 的原子结构

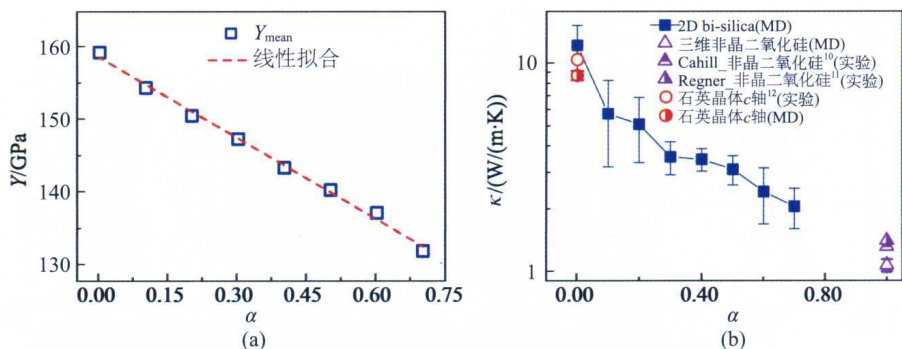


图 3.2 2D bi-silica 的杨氏模量及热导率

(a) 2D bi-silica 杨氏模量与无序度的关系,并利用线性关系拟合杨氏模量; (b) 三维二氧化硅晶体态和非晶态及不同无序度 2D bi-silica 的热导率,并与最近的实验结果相比较

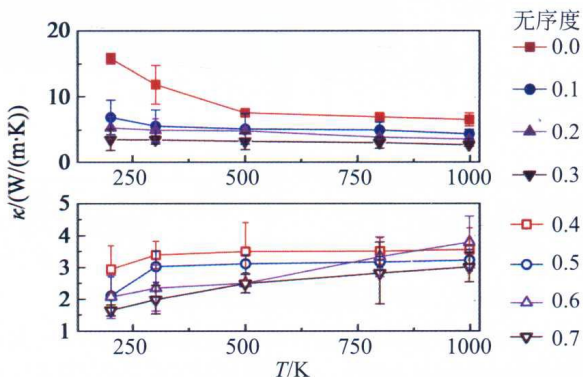


图 3.3 不同无序度的 2D bi-silica 的热导率对温度的依赖性

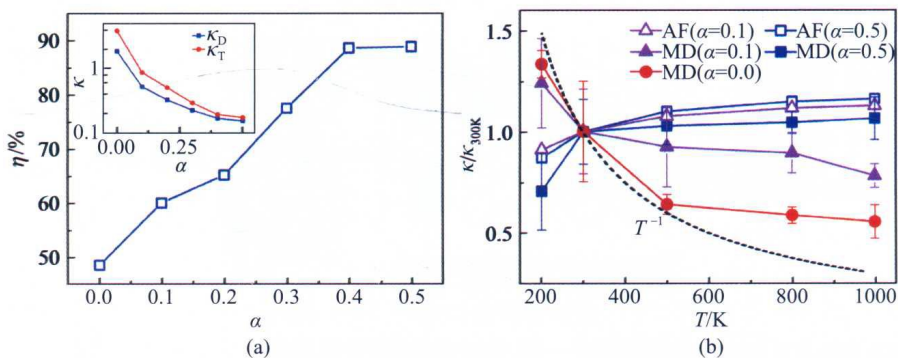


图 3.5 热导率预测模型的合理性检验

(a) 扩散式模态贡献的热导率所占的比例,插图总结了利用 Allen-Feldman 理论得到的声子及局域化振动模态所贡献的热导率; (b) MD 模拟与 Allen-Feldman 理论的比较

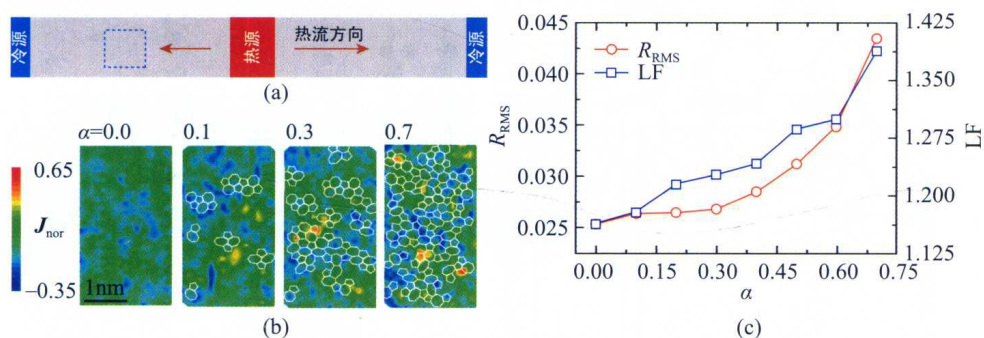


图 3.7 2D bi-silica 的面内热流分布情况

(a) 计算热流时 2D bi-silica 的温度设置及热流方向,同时选取虚框内的原子热流进行后续分析;
 (b) 不同无序度二氧化硅的热流空间分布情况;(c) 热流空间分布的粗糙度及局域化因子与材料无序度的关系

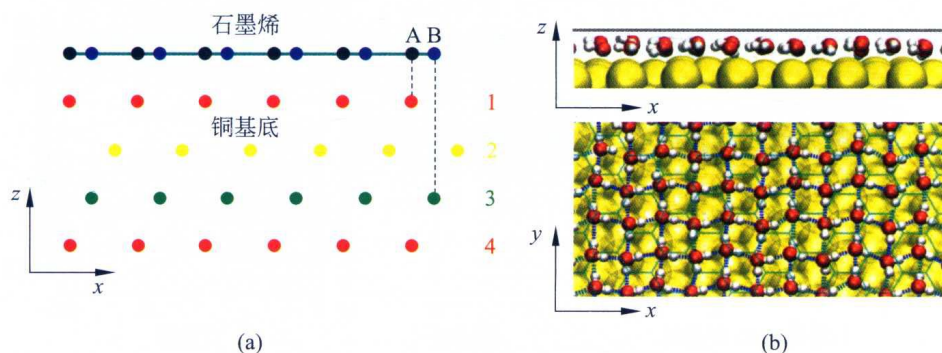


图 4.1 石墨烯/铜基底复合模型

(a) 石墨烯与铜(111)面之间的三种不同界面;(b) 石墨烯/铜基底之间的 IWL 示意图

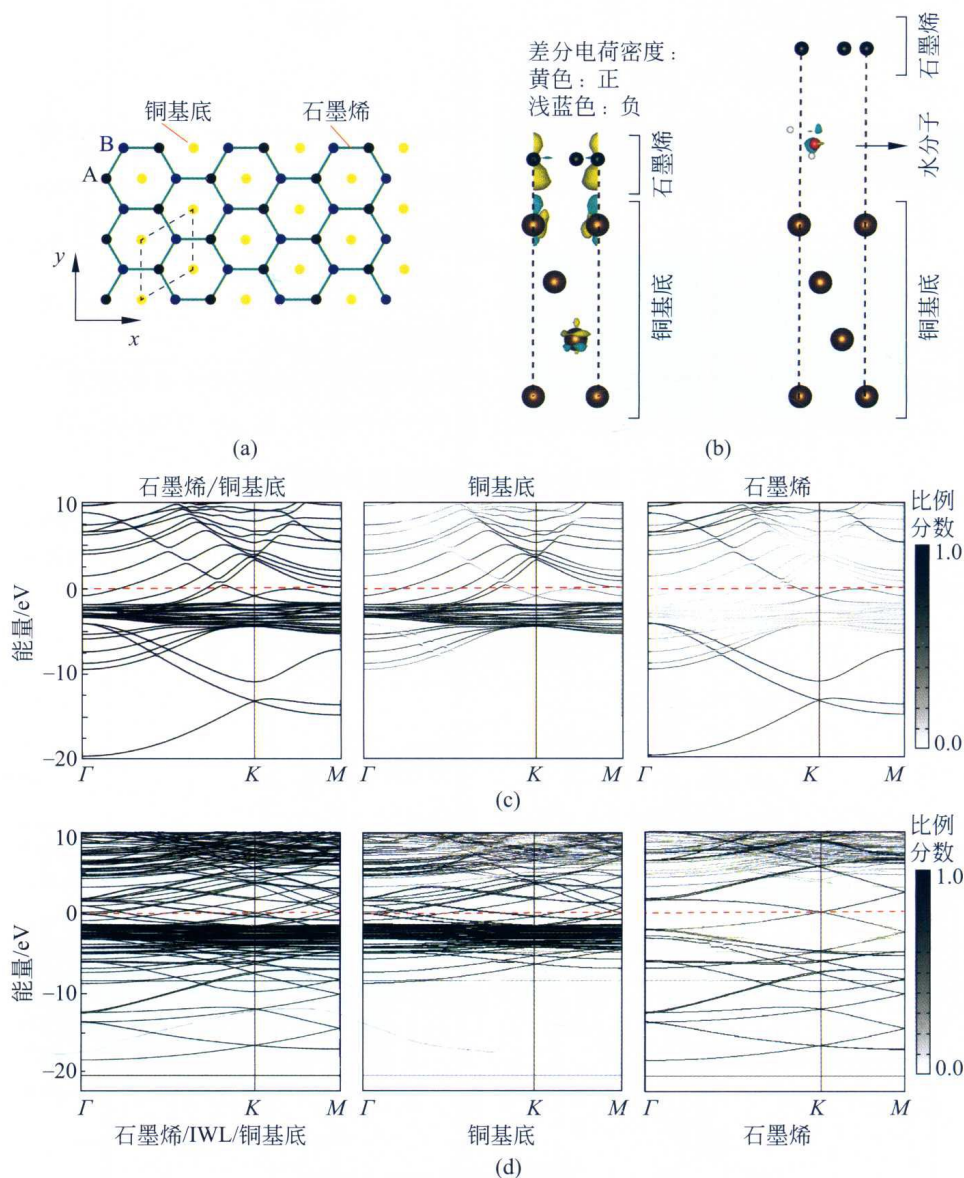


图 4.3 石墨烯/水插层/铜基底的电子结构

(a) DFT 计算中的元胞结构,铜基底包含 4 层原子,石墨烯的元胞如图中虚线所示;(b) 有、无水分子插层情况下石墨烯/铜基底界面的差分电荷密度图;(c)~(d) 有、无水分子插层时石墨烯/铜基底的电子能带及向铜原子和石墨烯原子分解的情况

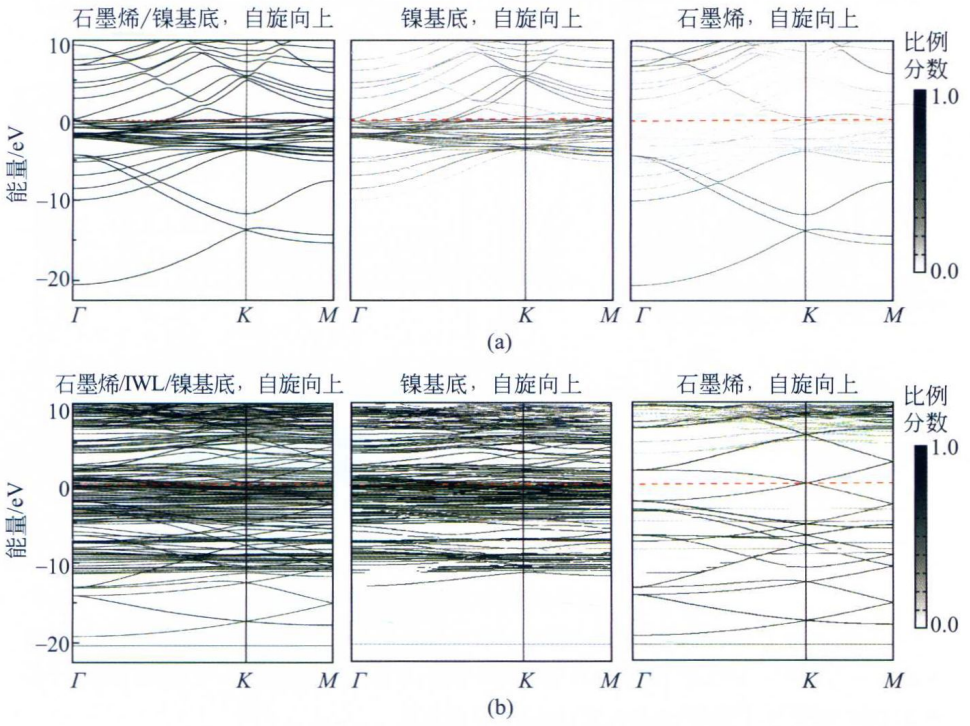


图 4.4 电子能带分解图

有、无水分子插层石墨烯/镍基底的电子能带及向铜原子和石墨烯原子分解的情况(由于自旋向下和向上的电子能带类似,因此这里只展示了自旋向上的电子能带)

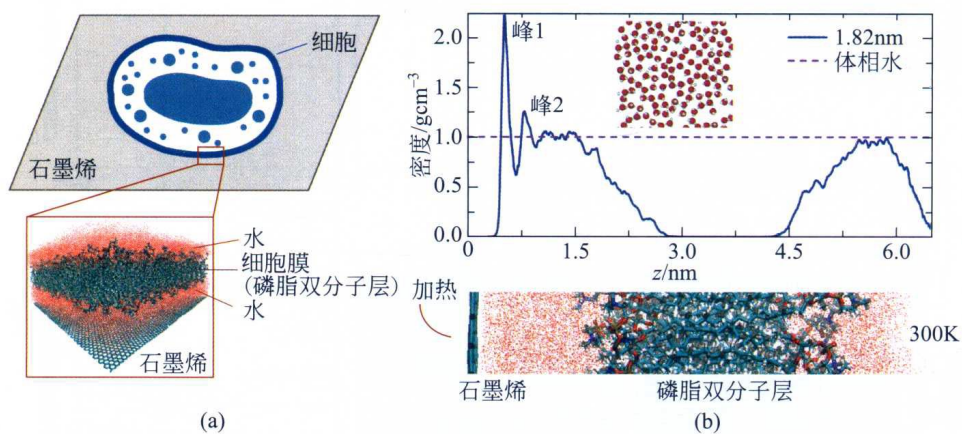


图 4.6 纳米材料细胞界面的微观结构

(a) 石墨烯/水分子插层/细胞膜的分子模型;(b) 上图是水分子的质量密度分布图(水分子插层厚度 $t_w = 1.82 \text{ nm}$),虚线表示块体水常温常压的密度,石墨烯的位置为 $z = 0.0 \text{ nm}$,下图是 MD 模拟过程中研究穿过界面的热量耗散时的边界条件设置

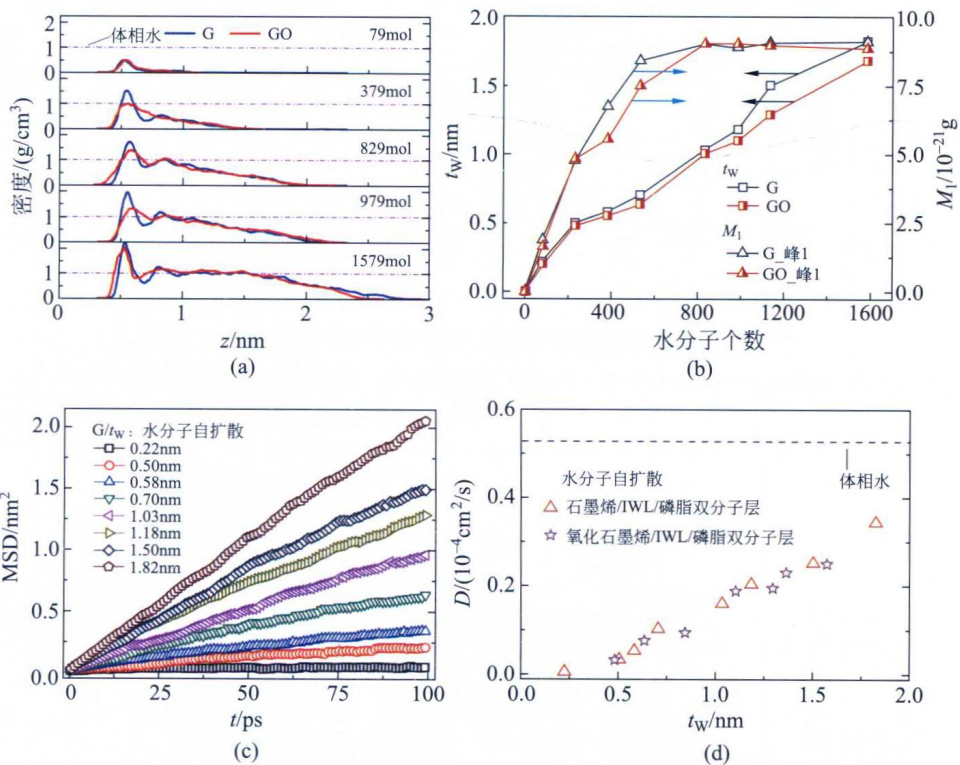


图 4.7 限域水分子插层的结构及运输性质

(a) 石墨烯和 GO 界面中水分子含量不同的水分子密度空间分布情况；(b) IWL 的厚度 t_w 及峰 1 中水的质量 M_1 与水分子插层中分子数的关系；(c)~(d) 不同厚度的 IWL 的均方距离 (MSD) 及自扩散系数 D

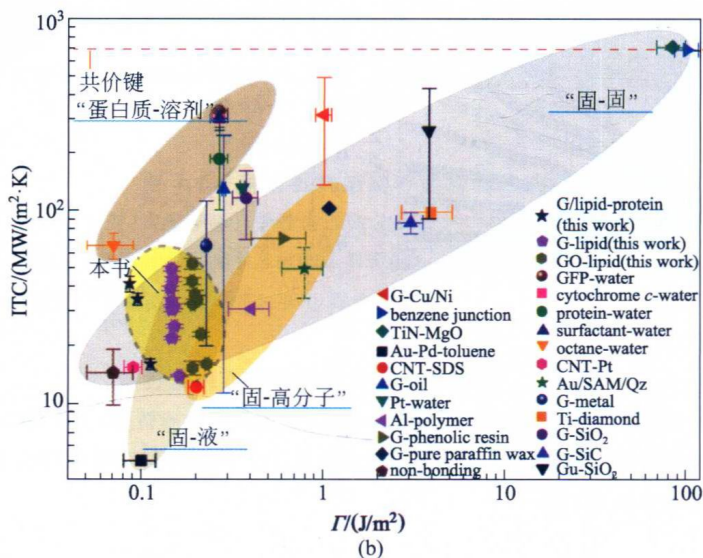
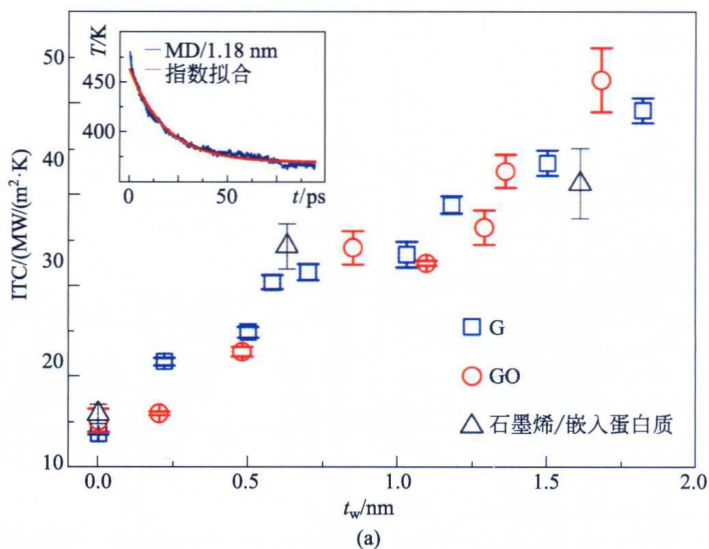


图 4.10 生物纳米界面的热导率对比

(a) 石墨烯(GO)/磷脂双分子层的界面热导 ITC; (b) 液体-高分子、固体-液体、固体-高分子以及固体-固体界面的界面热导与界面能的关系, 图中虚线表示的是共价键连接的固体-固体界面的界面热导。ITC 的数据来自文献[59, 172, 194-209]

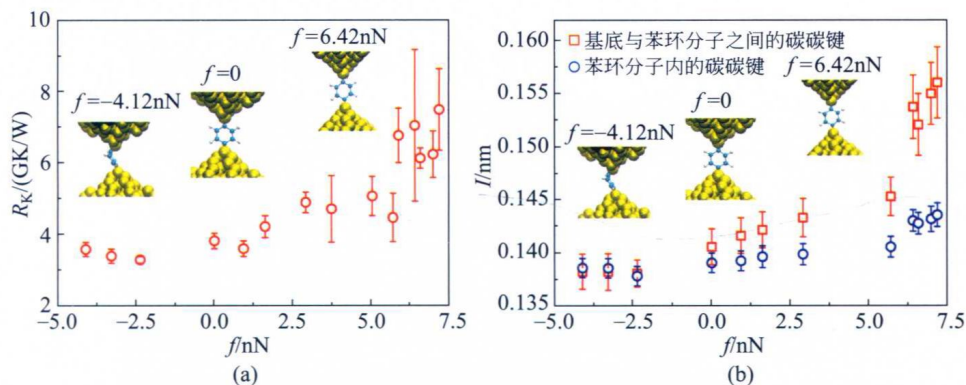


图 5.3 分子结界面的热阻与分子结键长

(a) 穿过分子结界面的界面热阻 R_K 与外界载荷 f 之间的关系；(b) 承受外界载荷时，苯环分子内部及苯环分子与基底之间的 C—C 键长的变化

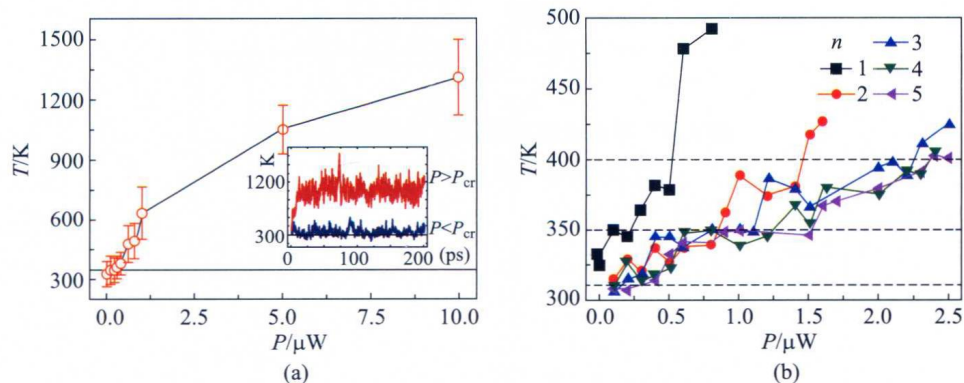


图 5.5 分子结的热量耗散过程

(a) 单分子结的温度 T_M 与加热功率 P 之间的关系，插图是苯环分子与金刚石基底的温度变化图；(b) 不同长度分子结的温度 T 与加热功率之间的关系，图中虚线代表分子结的不同临界温度 $\Delta T_{th} = 10$ K, 50 K 和 100 K

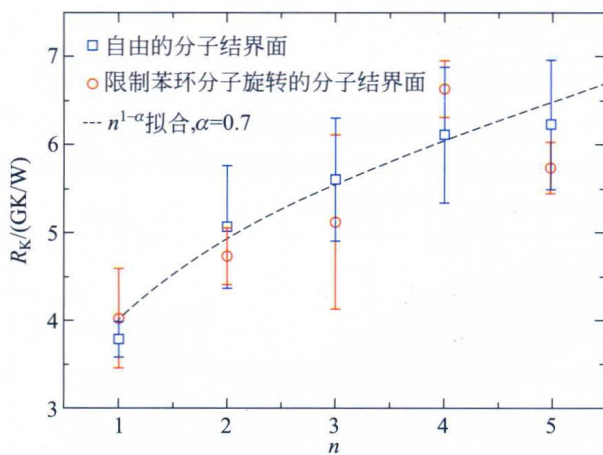


图 5.8 不同长度的苯环分子结的界面热导
红色表示限制苯环旋转时的情况

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。