

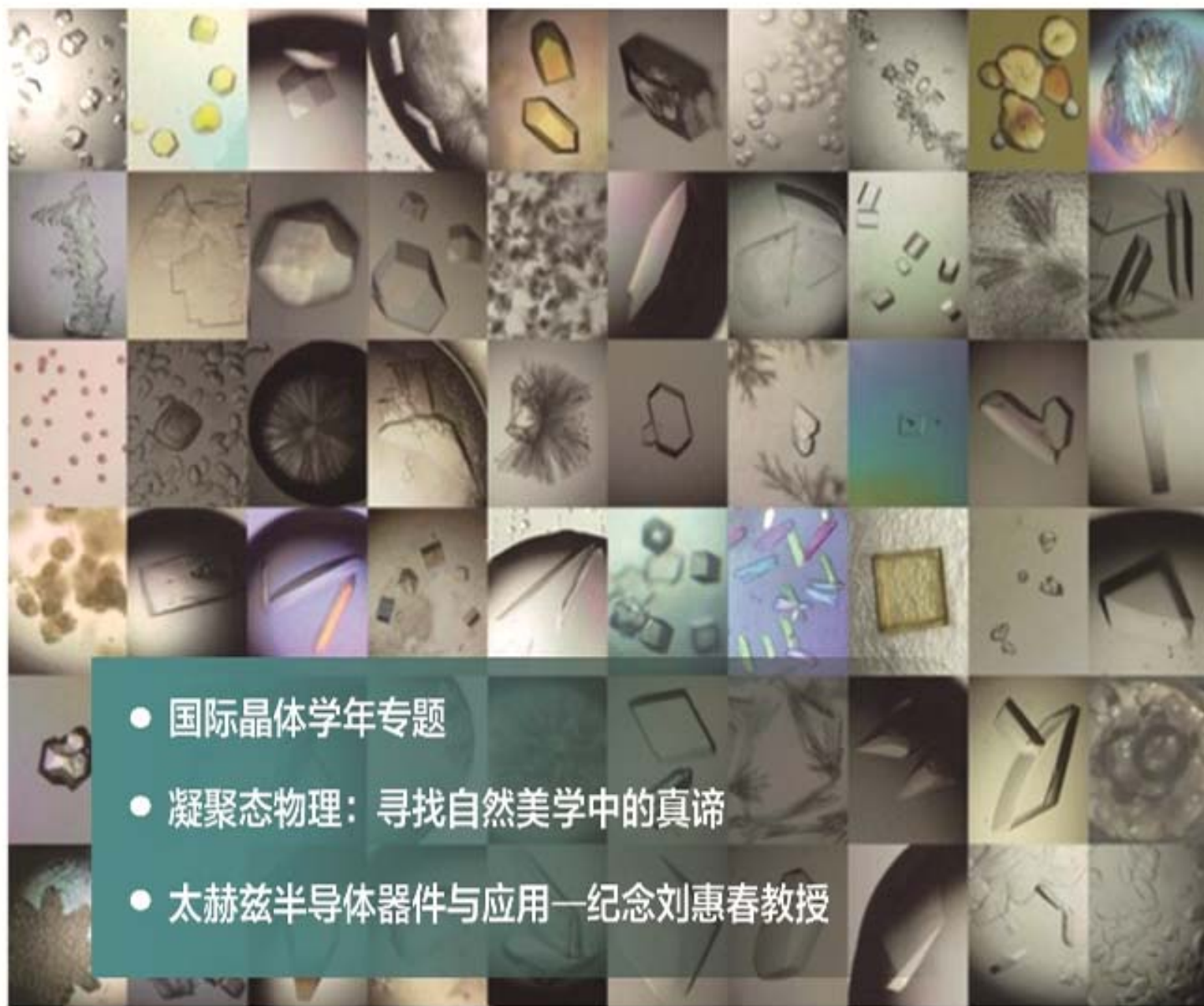
PHYSICS

ISSN 0379-4148

CN 11-1957/O4

物理

第43卷 第8期 2014



- 国际晶体学年专题
- 凝聚态物理：寻找自然美学中的真谛
- 太赫兹半导体器件与应用—纪念刘惠春教授



中国物理学会 主办
中国科学院物理研究所

物理

(WULI)

PHYSICS

(Monthly, First Published in 1972)
Http: www.wuli.ac.cn

月刊·1972年创刊
国家科技部“中国科技论文统计源期刊”
(中国科技核心期刊)
国家自然科学基金委员会数理学部资助
中国科协精品科技期刊工程资助

主管 中国科学院
主办 中国物理学会
中国科学院物理研究所
协办 国家自然科学基金委员会数理科学部
中国工程物理研究院
主编 杨国桢
副主编 刘寄星 朱邦芬 朱星 张闯
出版 《物理》编辑部
地址 北京603信箱,100190
电话 (010)82649470,82649277
传真 (010)82649029
广告业务 (010)82649277
Email: physics@iphy.ac.cn
Http: www.wuli.ac.cn

印刷装订 北京科信印刷有限公司
国内统一刊号 CN11-1957/O4
国内邮发代号 2-805
国内定价 20.00元
总发行 北京报刊发行局
订购处 全国各地邮局
国际标准刊号 ISSN0379-4148
国外代号 M51
国外总发行 中国国际图书贸易总公司
(北京399信箱 100044)
广告经营许可证 京海工商广字 第0335号
出版日期 2014年8月12日
© 2014 版权所有

Editor-in-chief:
YANG Guo-Zhen

Editorial Office:
Institute of Physics, Chinese Academy of
Sciences, 8 Nanshanjie Zhongguancun, P.O.
Box 603, Beijing 100190, China

Tel:
+86-10-82649470 or 82649277

Fax:
+86-10-82649029

Email:
physics@iphy.ac.cn
Published monthly by the Chinese
Physical Society
Supported by the National Natural
Science Foundation of China

Distributed by China International Book
Trading Corporation
P.O.Box 399, Beijing 100044, China

© 2014 Chinese Physical Society.
All rights reserved. No part of this publica-
tion may be reproduced, stored in a re-
trieval system, or transmitted in any form
or by any means, electronic, mechanical,
photocopying, recording or otherwise, with-
out the prior written permission of the copy-
right owner.

目次 CONTENTS

第43卷 第8期 2014年8月

评述 Review Articles

500 太赫兹半导体器件与应用
——纪念刘惠春教授
曹俊诚 雷啸霖 胡青 张潮 张希成

Terahertz semiconductor devices and their
applications—In memory of Hui-Chun Liu
CAO Jun-Cheng LEI Xiao-Lin HU Qing
ZHANG Chao ZHANG Xi-Cheng

国际晶体学年专题 Feature Articles

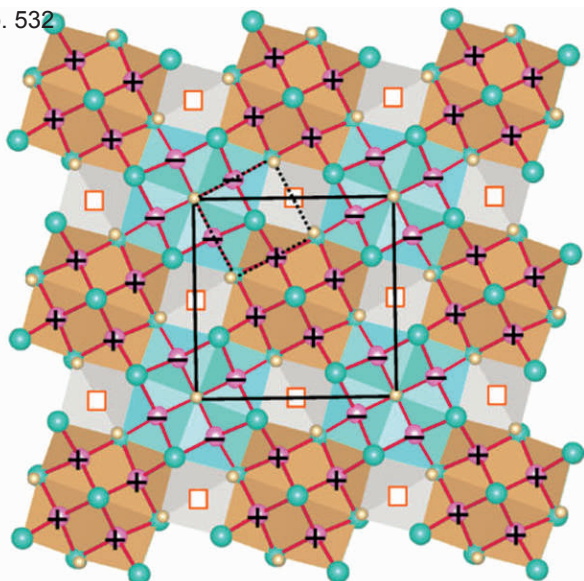
512 X射线粉晶衍射在新功能材料探索中
的一些应用
金士锋 王刚 陈小龙

Examples for application of X-ray powder
diffraction in exploring new functional
materials
JIN Shi-Feng WANG Gang CHEN Xiao-Long

国际晶体学年专题 Feature Articles

- 520** 深紫外非线性光学晶体 $\text{KBe}_2\text{BO}_3\text{F}_2$ 的研究进展
陈创天 刘丽娟 王晓洋
Progress review of the deep-UV nonlinear optical crystal— $\text{KBe}_2\text{BO}_3\text{F}_2$
CHEN Chuang-Tian LIU Li-Juan
WANG Xiao-Yang
- 528** 利用中子散射研究铁基超导体的磁结构
李世亮
Neutron scattering studies on the magnetic structure of iron-based superconductors
LI Shi-Liang
- 535** 蛋白质晶体的魅力——国际晶体学年漫谈结构(晶体)生物学
苏晓东 曹颢
The charm of protein crystals—Structural biology at a glance in the International Year of Crystallography
SU Xiao-Dong CAO Qin
- 543** 锂离子电池电极材料原子尺度结构表征
肖东东 谷林
Uncovering the atomic-scale structure of electrode materials for lithium ion batteries
XIAO Dong-Dong GU Lin

p. 532



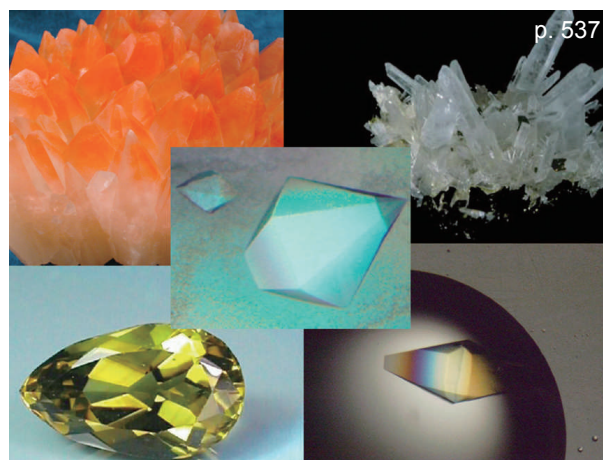
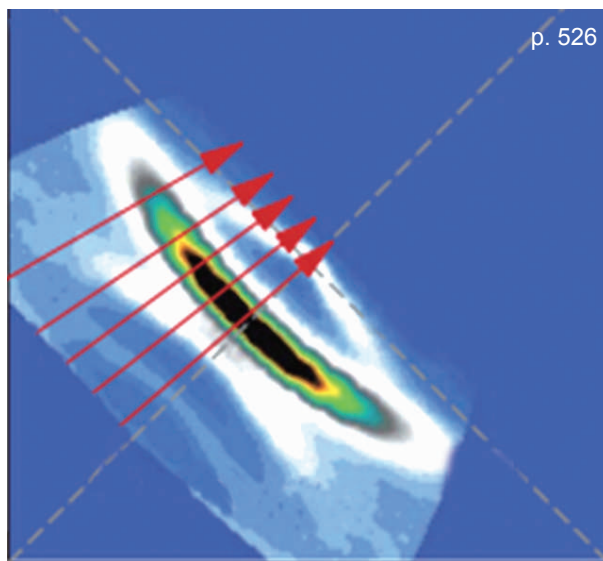
Physics Today 撷英

Highlights from Physics Today

- 552** 微观下的热
Heat under the microscope
陈济舸 方海平 译
- 554** “麦克斯韦妖”机
Engineering Maxwell's demon
厚美瑛 译

物理学漫谈

- 555** 凝聚态物理:寻找自然美学中的真谛
罗会仟



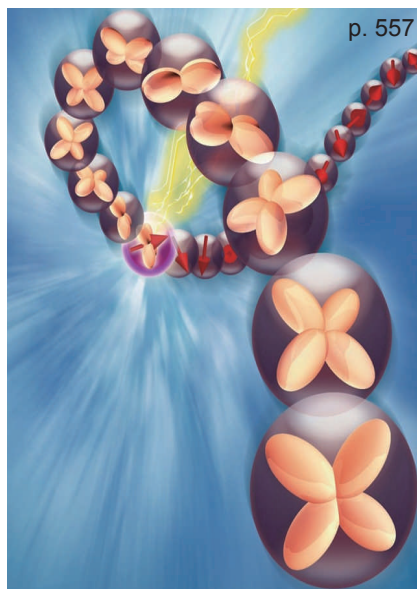
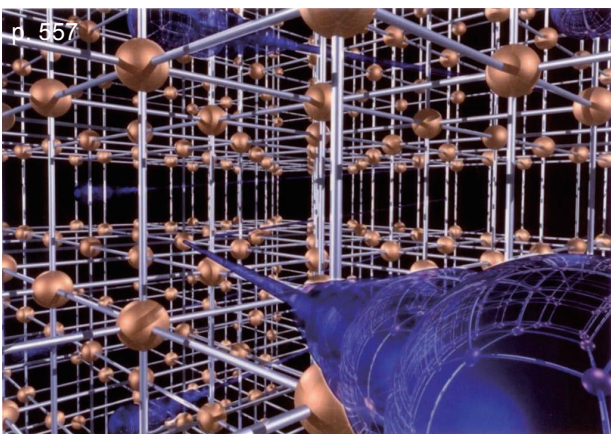
物理学咬文嚼字

- 559** 物理学咬文嚼字之六十四
同乎哉?
曹则贤

中国物理学会通讯

- 563** 关于推荐及评选2014—2015年度
胡刚复、饶毓泰、叶企孙、吴有训、
王淦昌物理奖的通知
- 563** 关于推荐及评选第五届中国物理
学会谢希德物理奖的通知
- 564** 关于推荐及评选第四届中国物理
学会黄昆物理奖的通知
- 564** 关于推荐评选第十届周培源物理奖的通知

p. 561



读者和编者

- 542** 订阅《物理》得好礼
- 550** 《物理》有奖征集封面素材

招生招聘

- 565** 南京大学物理学院诚聘海内外优秀人才
中国科学技术大学国际功能材料量子设计中心
招聘启事
中物院高性能数值模拟软件中心诚聘英才
北京大学应用物理与技术研究中心诚聘英才
同济大学“声子学与热能科学研究中心”人才招聘
半导体超晶格国家重点实验室诚聘英才
天才纵横理论物理研究所诚聘研究人员
北京大学量子材料科学中心博士后招聘启事

广告

Zurich Instruments(封二) 住友重机械工业管理(上海)
有限公司(封三) 美国理波公司(封底) 北京汇德信科技
有限公司(插1) 牛津仪器国际有限公司(插2、3) Stan-
ford Research Systems(插4、5) 北京优赛科技有限公司
(插6) 中国光电周(第511页) Advanced Research Sys-
tems, Inc.(第527页) 北京鼎信优威光子科技有限公司
(第551页) 北京西燕超导量子技术有限公司(第558页)
安徽量子通信技术有限公司(第562页)

微观下的热*

(中国科学院上海应用物理研究所 陈济舸、方海平 编译自 Ilari Maasilta, Austin J. Minnich.

Physics Today, 2014, (8): 27, 原文详见 <http://ptonline.aip.org>)

在日常生活中,热传导现象很常见。宏观上热传导被看作能量在温度梯度场下的扩散行为,而这一输运过程取决于傅里叶定律给出的材料热导率。由傅里叶定律与能量守恒定律所衍生出的热传导方程,则描绘了温度在时间与空间中的分布。

但是,这个宏观热传导方程留下了很多未解之谜。例如,为什么金刚石具有极高的热导率,而和它具有相同晶体结构的砷化镓则只具有普通的热导率?晶格振动被认为是固体热传导的主要物理机制,但在所有的振动模式中,究竟哪些对热传导起主要作用?不同振动模式的输运距离又是多少?

当前电子器件的设计越来越

小、越来越快,针对上述问题的研究具有重要的实际意义。例如,晶体管功放区间的温度变化比傅里叶定律给出的结果高了数十度,这种偏移将会极大地影响电子器件(如智能手机或信号增益器等)的可靠性与稳定性。因此,热的微观机制日益引起研究者的关注。

早在一个世纪前,Debye就提出了绝缘体中的热传导过程是由晶格中非局域的振动模式(声子)所决定的,此后一系列关于热输运的微观理论被相继提出,其中包括采用 Boltzmann 输运方程来描绘声子输运的理论,声子间相互作用的理论,声子被晶格缺陷所散射的理论等。1959年,Callaway等人提出用

声子的群速度、平均自由程等微观动力学参量来从微观上解释热导率(κ):

$$\kappa = \frac{1}{3} \int C_{\omega} v_{\omega} \Lambda_{\omega} d\omega,$$

这里 ω 表示频率, C_{ω} 表示声子的比热, v_{ω} 表示声子的群速度, Λ_{ω} 表示声子的平均自由程。比热与群速度由声子的振动谱所决定,因此可以通过中子的非弹性碰撞等实验来测量得到。声子平均自由程由温度、频率、声子间相互作用以及晶格缺陷

所决定。声子平均自由程很难通过实验来直接测量,因此研究者们通常采用拟合实验数据与半经验模型参数的方式来得到,但这样的方法却具有很大的局限性。首先,这种方法没法预测热导率,它必须在已有实验的基础上来拟合模型参数;其次,这种方法强烈依赖于拟合的函数与方法。因此,对于绝大部分的晶体而言,声子的平均自由程仍然还是一个未知数。

声子研究是一个持续多年的挑战性问题。声子不像电子,没法通过外加磁场或者电场的方式进行控制。声子不像光子,没有一个能产生特定频率声子的放射源,同时也很难直接测量材料中声子的频率。声子之间具有强烈的非线性相互作用,但这种非线性作用却恰恰是固体材料中热阻的来源。幸运的是,现代计算机模拟与实验技术的进步为我们理解这一问题带来了新的希望。以下我们将从声子谱的计算与测量、热整流、反常热传导以及流体中的热输运这几个方面来介绍目前热传导研究中的最新进展。

声子谱的计算

研究者们采用密度泛函理论(DFT)来计算原子间的相互作用,从中提取出相互作用的四次方项(非线性项)来研究热导率。我们所熟悉的热的良导体(金刚石、硅、碳化硅等),其高热导率源于其具有较强的原子间相互作用以及小的原子量导致的高声子群速度。在通常的研究

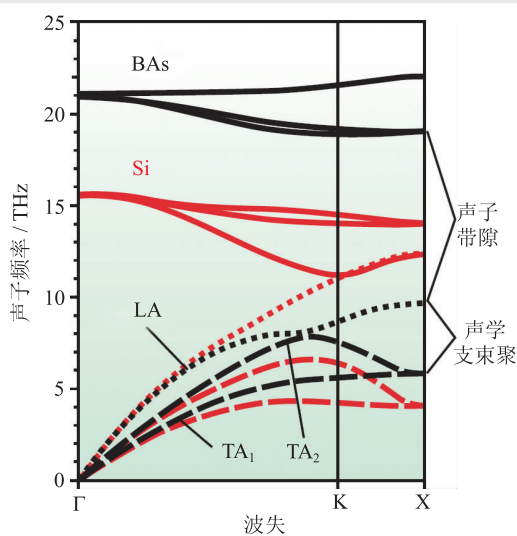


图1 硅与砷化镓的声子谱。与硅相比,砷化镓具有的声子带隙与声学支束聚增加了声子平均自由程,从而提高了热导率

* 应编辑部的邀请,译者增加了近期国内研究者在本领域的工作,见文中楷体字部分。

中，散射导致的平均自由程变化被忽视，因此在过去的40年间，新的高导热材料始终未能发现。直到去年，Reinecke等人通过第一性原理的计算提出，砷化硼具有极高的热导率(2000 W/m·K)，远高于类似材料硅的热导率(200 W/m·K)。

砷化硼极高的热导率能通过图1的声子谱来理解。在大部分材料(如图1中的硅)中，声子散射过程牵涉到光学支部分，如一个光学支声子散射成为两个声学支声子。而在砷化硼的声子谱中，光学支与声学支之间具有声子带隙，抑制了散射过程。砷化硼的声学支束聚在一起，束聚效应同样抑制了散射。因为砷化硼的声子平均自由程高达1 μm，从而具有极高的热导率。

声子谱的测量

MFP 频谱技术是一种通过测量分子平均自由程的分布以及热导率随平均自由程分布的依赖关系，从而来研究声子振动谱的实验手段。它基于一个简单的原理，即热流的耗散取决于系统热程的大小(热程即系统温差存在的长度)。如图2(a)所示，如果热程远大于声子的平均自由程，声子运输是一个随机扩散的过程，热传导满足傅里叶定律。如果热程远小于声子平均自由程，声子是弹道扩散的行为，同时热传导不满足傅里叶定律。

Johnson等人采用这种方式研究了硅薄膜的热传导。由图2(b)所示，两束具有正弦相干的激光打在硅薄膜上形成冷热相间的条纹，硅薄膜的相对热导率($\kappa_{\text{硅薄膜}}/\kappa_{\text{硅晶体}}$)随条纹间距而变化。他们发现，体系的热导率在条纹距离大于5 μm的情况下保持不变(满足傅里叶定律)，而当条纹距离减小到与部分声子的平均自由程可比拟的程度时，硅薄膜的热导率也随之下降(傅里叶定律

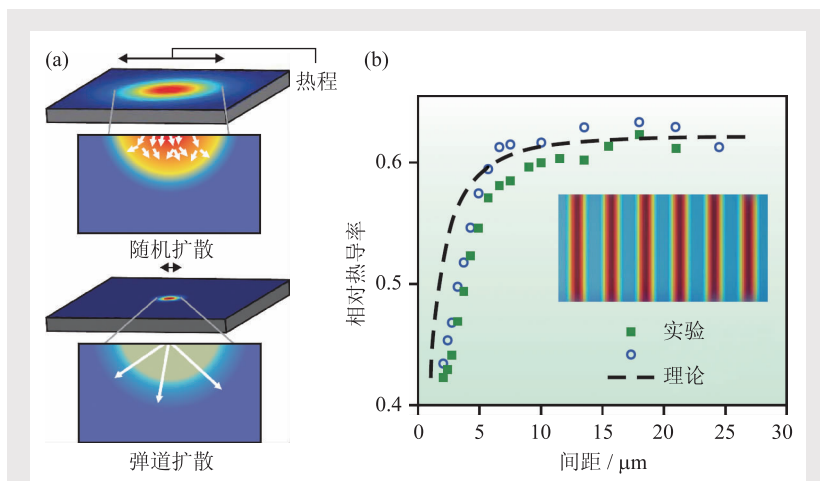


图2 (a)随着热程的减小，声子运输渐渐由随机扩散转变为弹道扩散；(b)通过激光产生瞬时冷热条纹来测量硅薄膜的热导率。在冷热条纹间距小于5 μm的情况下，热导率迅速减小，不再满足傅里叶定律

失效)。Minnich采用 Boltzmann 输运方程代替傅里叶定律来研究这个系统的热输运，得到了与实验一致的结果。通过调节热距和条纹间距的方法为实验学家提供了一种间接研究声子谱的手段。

热整流

热整流是指热输运效率依赖于热流方向的一种现象，它基于改变声子振动谱在不同方向重叠大小的方式来实现对体系热导率的调控。热整流材料在某一个方向具有较高的热导率，而在相反方向具有较低的热导率。在微纳尺度实现热整流是目前热学研究的热点，它意味着我们能够像控制电流一样制造出相应的热二极管、热三极管、热逻辑门甚至是热逻辑器件为基础的“热计算机”等的热学器件。同济大学的李保文等人最近在 *Review of Modern Physics* 上发表了关于声子学与热调控的综述文章，在其中详细讨论了微纳尺度实现热调控的最新进展。

反常热传导

反常热传导是指在动量守恒的低维晶格(如石墨烯、碳纳米管)中热导率随尺寸发散的现象，而三维

晶格体系则是满足傅里叶定律的正常热传导。厦门大学的赵鸿研究组提出，在具有非对称相互作用势的低维晶格中，因为流与流之间的交叉耦合可能会破坏反常热传导。这一结果已经引起了国际学术界的重视。最近同济大学的李保文研究组则在理论上解析给出了反常能量输运导致反常热传导的证据。

流体中的热输运

在实际应用中，流体中热输运热现象(水冷或液冷)同样非常普遍，它包括声子热传导与流体热对流两种效应，它们共同决定体系的热输运能力。中国科学院上海应用物理研究所的方海平研究组的最新研究表明，由于热传导和热输运的竞争，表面的微观结构会对固液界面热输运效率产生意想不到的影响。

热传导这一研究涉及到能源、环境、材料、物理、化学等多个交叉领域，有着实验和理论紧密结合的特点。尽管它经过了上百年的探索，但直到现在仍然属于一个新兴的研究领域。在能源危机和环境危机的今天，研究热的微观机制，对于降低能耗、节约资源和保护环境尤为重要。