

湖南省大学生研究性学习和创新性实验计划

项目结题报告书

项目名称: 微波外场调控下介观电子器件中电流热效应研究

项目编号: 794

学生姓名: 邹同华

所在学校和院系: 湖南工学院数理科学与能源工程学院

项目实施时间: 2016.5-2019.4

指导教师: 谢忠祥

联系电话: 13787343525

填表日期: 2019.4.14

湖南省教育厅
2019 年制

一、基本情况

项目名称	微波外场调控下介观电子器件中电流热效应研究					
立项时间	2016.5		完成时间	2019.4		
项目主要研究 人员	序号	姓名	学号	专业班级	所在学院	项目中的 分工
	1	邹同华	1330140329	电气工程及其自动化	电气与信息工程学院	公式推导
	2	李星宇	1330140346	电气工程及其自动化	电气与信息工程学院	数值模拟
	3	田波	1330140352	电气工程及其自动化	电气与信息工程学院	数值模拟
	4	苏宁宇	1330140333	电气工程及其自动化	电气与信息工程学院	MATLAB 编程
	5	张君	1330140337	电气工程及其自动化	电气与信息工程学院	文献查阅

二、研究成果简介

1. 研究目的及其意义

随着新材料技术和纳米技术的飞速发展，器件的尺寸已进入到纳米尺度。纳米尺度的量子器件已成为世界各国所追求的新型器件。目前主流 CPU 的尺寸已达到 65nm, 其运行频率已达到 GHz 的数量级。随着微电子器件和电路特征尺寸的持续减小, 特别是大规模集成度的迅速提高, 使芯片等元器件的功耗密度也随之成倍增长, 达到的数量级。如此高的功耗导致芯片的温度过高, 因而不能正常工作。降低温度的途径有两条: (1) 迅速将热导走; (2) 尽可能少的产生热。然而由于新型介观器件特殊的结构以及大多数制作介观器件的材料热导率低于晶体硅, 导热变得非常困难。因此介观器件电流热效应的研究成为凝聚态物理学中一个重要的科学问题, 对于设计和制作介观器件至关重要。

基于上述问题, 本项目研究了微波外场所引起的光子辅助隧穿对电流热效应的影响; 光电泵浦电流的热效应; 双微波外场调控下的多场间关系特性对介观器件的电流热效应的影响。该项目的完成不仅完善了当前的基础理论, 而且可为设计介观器件提供有价值的理论参考和技术支持。

2. 研究成果的主要内容

本项目针对具有广泛应用前景的介观电子器件,研究了其在微波外场调控下的电流热效应,研究主要内容如下:

(1) 研究了微波外场所引起的光子辅助隧穿对电流热效应的影响;微波外场作用下,隧穿电流中体现了由光子辅助隧穿所引起的新的非线性行为,出现了新的共振峰。我们研究了这种非线性行为在电流热效应中的体现,并对比电流和热的变化趋势,寻找电子器件的最佳工作区间;研究了泵浦电流的热效应:当在源、漏极加上不同强度的微波外场时将会出现光电泵浦效应,光电泵浦效应引起的电流我们称为泵浦电流,因此我们研究了泵浦电流的热效应。研究了双微波外场调控下的介观电子器件的电流热效应:当双微波外场非相干时,引发的隧穿电流具有对称的共振行为。然而当双微波外场相干时,则引发非对称隧穿,这是由于隧穿电流分支间的干涉,形成非对称光子辅助净电流,因此我们研究了双微波外场调控下的介观电子器件的电流热效应。

(2) 研究了量子体系声子传输和散射机制,建立了混合弹性-扩散声子热输运方程,该方程包含了声子-声子相互作用,能处理从低温到高温的量子体系热输运性质,能区分弹性和扩散声子输运对热导的贡献;运用非平衡格林函数方法推导出了微波外场扰动下量子点耦合系统电流发热公式,该公式包含了微波外场所带来的所有可能效应。

(3) 我们还研究了温度场调控下,一些典型介观器件(材料),比如:石墨烯纳米带、石墨炔纳米带、纳米管、单个的有机分子等分子体系的声子输运与热导性质,系统探索了声子-声子相互作用、电子-声子相互作用以及分子裁剪、引入侧基团等分子工程对其热输运和热电性质的调控机理。

3. 成果的重要观点或对策建议

(1) 低温下半导体纳米线异质结中的弹性热输运

结果表明当应力自由边界条件被运用时,输运系数对于对称异质结和不对称异质结展现不同的行为,然而当硬壁边界条件被运用时,输运系数对于对称异质结和不对称异质结展现相同的行为。低温极限下,对于应力自由边界条件下的对称异质结,量子化热导能被观察到。然而,量子化热导不能在应力自由边界条件下的不对称异质结中观察到,且此时的热导非常依赖于两端的横向宽度比。当横向宽度比增加时,两种异质结中的热导都增加,且增加度在高温下更明显。

(2) 石墨烯纳米带异质结中热整流局域共振机理

结果表明石墨烯纳米带异质结在小温差场中热整流效率达到 470%,同时热整

流效率随着温差增加而快速增加。而且，温度场、缺陷密度、系统长度都将热整流效率有着显著的影响。

(3) 含拓扑线缺陷锯齿型石墨烯纳米条带中的电子热输运

结果显示线缺陷能有效调整锯齿型石墨烯纳米条带的电子结构和电子热导。在费米能级附近，4—对应于 4—TLD 和 8—TLD 的归一化热导等于完美石墨烯纳米条带的值，然而对应于 558—TLD 和 5757—TLD 的归一化热导大于完美石墨烯纳米条带的值。当费米能级高于第一个子带的最大值时，对应于线缺陷的归一化热导都要小于理想值。研究结果还显示对于不同的线缺陷，归一化热导与线缺陷位置的关系呈现出类似的缺陷，但是这种缺陷非常依赖于费米能级的取值。

(4) 石墨烯纳米带同位素超晶格中的热输运

结果显示同位素超晶格能大幅度降低石墨烯纳米带的热导，而且扶手椅型石墨烯纳米带的热导降低比锯齿型石墨烯纳米带的热导降低更明显，特别是高温。在扶手椅型石墨烯纳米带和锯齿型石墨烯纳米带中，热导的降低严重依赖于同位素的质量和超晶格的周期长度。在临界周期长度，最小的热导，大约是理想扶手椅型石墨烯纳米带（扶手椅型石墨烯纳米带）对应值的 25%（32%），能被观察到。结果还显示临界周期长度敏感于总散射区的总长度，但是不敏感于带的宽度。

4. 成果的创新点和特色

微波外场扰动下介观电子器件的热效应反映了外场作用下新的输运机制和量子本性，是待开发探索的新领域，同时也富有挑战性。本项目针对介观电子器件（材料），研究其在微波外场调控下的电流热效应，其特色与创新之处包括：

(1) 本项目率先从原子尺度的模拟手段出发，系统研究微波外场扰动下介观电子器件的热效应，可让人们全面认识微波外场扰动下介观电子器件的热效应机理，同时发现新的量子现象，扫清一些研究盲点。

(2) 本项目从分子、原子层面上阐明微波外场扰动下介观电子器件的热效应机理，可为调控介观结构（材料）的热量提供物理模型和参数，并为设计介观电子器件提供有价值的技术指导和理论参考。

5. 成果的实践意义和社会影响

本项目率先研究微波外场所带来的非线性效应，比如光子辅助隧穿、光电泵浦效应等对介观电子体系电流热效应的影响，从而可用微波外场来调控介观电子器件的输运行为，比如：电子输运、声子输运，因此该项目同时具有一定的实际意义。

微波外场扰动下介观电子器件中的热效应反映了外场作用下新的输运机制和

量子本性。我们对微波外场扰动下介观电子器件中电流热效应的机理作全面系统的研究，可发现新的量子现象。本项目是多学科的综合交叉，不仅能完善基础理论，而且对介观电子器件的开发能提供有价值的技术指导和理论参考。上述研究成果已写成 3 篇论文发表于著名期刊上。

6. 研究成果和研究方法的特色

得到了微波外场调控下的介观电子器件电流热效应公式，探索清楚了微波外场所带来的非线性效应以及多场间的关系特性对电流热效应的影响，可为介观电子器件的开发提供有意义的参考。研究成果写成了 4 篇左右学术论文发表于国外学术刊物上，如下：

(1) Xue-Kun Chen, Zhong-Xiang Xie, Yong Zhang, Yuan-Xiang Deng, Tong-Hua Zou, Jun Liu. Highly efficient thermal rectification in carbon/boron nitride heteronanotubes. *Carbon* 148 532 (2019) <https://doi.org/10.1016/j.carbon.2019.03.073>

(2) Xue-Kun Chen, Jun Liu, Zhong-Xiang Xie, Yong Zhang, Yuan-Xiang Deng, and Ke-Qiu Chen. A local resonance mechanism for thermal rectification in pristine/branched graphene nanoribbon junctions. *Appl. Phys. Lett.* 113, 121906 (2018).

(3) Xue-Kun Chen, Jun Liu, Dan Du, Zhong-Xiang Xie, and Ke-Qiu Chen. Anisotropic thermal conductivity in carbon honeycomb. *J. Phys.: Condens. Matter* 30, 155702 (2018).

(4) ZhongXiang Xie, Xue-Kun Chen, Xia Yu, Yong Zhang, HaiBin Wang, Reduction of phonon thermal conduction in isotopic graphene nanoribbon superlattices. *Sci. China-Phys. Mech. Astron* 60, 107821 (2017).

研究方法的特色：本项目采用的研究方法是第一性原理、非平衡格林函数等方法。第一性原理能对体系进行弛豫，得到结构处于最稳态时的晶格力常数。另一方面，现存描述晶格振动的经验势能弥补第一性原理的耗时长和计算量大等问题，可在精度允许的情况下大大减少相关计算量。非平衡格林函数方法的理论基础源于量子场理论，现已发展成为研究低维介观体系中载流子（声子、电子）输运问题较理想的方法。该方法尤其在处理包含复杂相互作用的系统以及研究含时载流子输运等方面具有非常大的优势

三、项目研究总结报告

1. 预定计划执行情况

本项目在三年内完成（2016.5-2019.4），预定计划分为三个阶段执行：

2016年5月至2016年12月，主要工作是制定研究进展的详细计划、收集国内外相关研究的文献资料，分类整理和阅读文献资料，形成文献综述报告；学习第一性原理计算、非平衡格林函数方法及MATLAB软件的使用。

2017.01-2018.11：研究了微波外场所引起的光子辅助隧穿对电流热效应的影响；光电泵浦电流的热效应；双微波外场调控下的多场间关系特性对介观器件的电流热效应的影响三个方面的问题，探寻多场间的关系特性对电流热效应的影响，并撰写了3篇研究论文。

2018年11月至2019年4月，总结前阶段的研究成果，形成总结性的研究报告，并根据项目结题要求撰写结题材料，通过结题验收。

2. 项目研究和实践情况

微波外场调控下介观电子器件中电流热效应是当前国际上的前沿研究热点，许多基本的科学问题如微观分子与宏观尺度热库之间的耦合作用、声子-声子相互作用和电子-声子相互作用对体系热效应的影响，以及热量通过分子体系传输的机理等重要的科学问题仍不是很清楚。关于介观电子器件的研究仍处在原理性阶段，还有大量基础理论研究工作要做。无论从学术还是从应用的角度，对介观电子器件中电流热效应开展研究是十分重要的。本项目以非平衡格林函数输运理论和第一性原理计算为基础，结合分子动力学方法，研究微波外场调控下介观电子器件中电流热效应。本项目获得的主要研究成果有：

(1) 研究了微波外场所引起的光子辅助隧穿对电流热效应的影响；微波外场作用下，隧穿电流中体现了由光子辅助隧穿所引起的新的非线性行为，出现了新的共振峰。我们研究了这种非线性行为在电流热效应中的体现，并对比电流和热的变化趋势，寻找电子器件的最佳工作区间；研究了泵浦电流的热效应：当在源、漏极加上不同强度的微波外场时将会出现光电泵浦效应，光电泵浦效应引起的电流我们称为泵浦电流，因此我们研究了泵浦电流的热效应。研究了双微波外场调控下的介观电子器件的电流热效应：当双微波外场非相干时，引发的隧穿电流具有对称的共振行为。然而当双微波外场相干时，则引发非对称隧穿，这是由于隧穿电流分支间的干涉，形成非对称光子辅助净电流，因此我们研究了双微波外场

调控下的介观电子器件的电流热效应。

(2) 研究了量子体系声子传输和散射机制，建立了混合弹性-扩散声子热输运方程，该方程包含了声子-声子相互作用，能处理从低温到高温的量子体系热输运性质，能区分弹性和扩散声子输运对热导的贡献；运用非平衡格林函数方法推导出了微波外场扰动下量子点耦合系统电流发热公式，该公式包含了微波外场所带来的所有可能效应。

(3) 我们还研究了温度场调控下，一些典型介观器件（材料），比如：石墨烯纳米带、石墨炔纳米带、纳米管、单个的有机分子等分子体系的声子输运与热导性质，系统探索了声子-声子相互作用、电子-声子相互作用以及分子裁剪、引入侧基团等分子工程对其热输运和热电性质的调控机理。

总之，通过本项目研究，我们对微波外场调控下介观电子器件中电流热效应有了一个比较系统深入的认识。

3. 主要成绩和收获

围绕微波外场调控下介观电子器件中电流热效应，本项目研究了微波外场所引起的光子辅助隧穿对电流热效应的影响；光电泵浦电流的热效应；双微波外场调控下的多场间关系特性对介观器件的电流热效应的影响，等问题，获得了一些有意义的结果。

主要成绩写成了4篇左右学术论文发表于国外学术刊物上，如下：

(1) Xue-Kun Chen, Zhong-Xiang Xie, Yong Zhang, Yuan-Xiang Deng, Toong-Hua Zou, Jun Liu. Highly efficient thermal rectification in carbon/boron nitride heteronanotubes. Carbon 148 532 (2019) <https://doi.org/10.1016/j.carbon.2019.03.073>

(2) Xue-Kun Chen, Jun Liu, Zhong-Xiang Xie, Yong Zhang, Yuan-Xiang Deng, and Ke-Qiu Chen. A local resonance mechanism for thermal rectification in pristine/branched graphene nanoribbon junctions. Appl. Phys. Lett. 113, 121906 (2018).

(3) Xue-Kun Chen, Jun Liu, Dan Du, Zhong-Xiang Xie, and Ke-Qiu Chen. Anisotropic thermal conductivity in carbon honeycomb. J. Phys.: Condens. Matter 30, 155702 (2018).

(4) ZhongXiang Xie, Xue-Kun Chen, Xia Yu, Yong Zhang, HaiBin Wang, Reduction of phonon thermal conduction in isotopic graphene

nanoribbon superlattices. Sci. China-Phys. Mech. Astron 60, 107821 (2017).

4. 存在的主要困难、问题和不足

微波外场的非线性扰动、特别是双光场的扰动，使得体系的电流热效应变得复杂。如何将微波外场的非线性效应包含进电流热效应公式是一个重要的问题，具有挑战性。另外，学生对本项目研究需使用的软件 MATLAB 不怎么熟悉，特别不会调试程序。

5. 下一步研究工作建议

(1) 围绕微波外场调控下介观电子器件中电流热效应，就微波外场的非线性扰动、特别是双光场的扰动在下一步工作中进行更深入的研究。

(2) 建议学校出台相关制度，激励学生投入更多的时间和精力，参与到项目中来，提高学生开展项目研究的积极性。

四、经费使用情况

经费合计 18000 元。

经费支出情况：

支出项目	支出金额
资料费	0 元
材料费	0 元
调研差旅费	0 元
成果发表相关费用	0 元
资料搜集、处理相关费用	0 元
成果鉴定、申报专利等费用	0 元
其他	0 元
合计	0 元

五、指导教师及学院审核意见

项目指导教师对结题的意见，包括对项目研究工作和研究成果的评价等。

本项目研究微波外场调控下介观电子器件中的电流热效应，并在此基础上研究介观电子器件中热与电流之间的关系。项目完成了计划书约定的研究任务，发表了4篇论文，取得了预期的研究成果，符合项目结题条件，同意结题。

负责人签章：

年 月 日

项目主持人所在学院对结题的意见，包括对项目研究工作和研究成果的评价等

项目针对微波外场调控下介观电子器件中的电流热效应展开研究。项目完成了约定的研究任务，符合项目结题条件，同意结题。

负责人签章：

年 月 日

六、学校结题审核意见

学校对项目研究的任务、目标、方法和研究成果水平等进行评价，是否结题。

年 月 日