

学校代码 10530

学 号 201330101076

分 类 号 O469

密 级

湘潭大学

硕 士 学 位 论 文

二维硅纳米材料热输运性质及 其调控

学 位 申 请 人 陈 超 育

指 导 教 师 郭志新 副教授

学 院 名 称 物理与光电工程学院

学 科 专 业 物 理 学

研 究 方 向 计算物理

二〇一六年六月四日

Thermal transport properties of two-dimensional silicon nanomaterials and their manipulation

Candidate_____Chaoyu Chen_____

Supervisor_____Associate Professor Zhixin Guo_____

College_____School of Physics and Optoelectronics_____

Program_____Physics_____

Specialization_____Computational Physics_____

Degree_____Master of Science_____

University_____Xiangtan University_____

Date_____June 4, 2016_____

湘潭大学

学位论文原创性声明

本人郑重声明：所呈交的论文是本人在导师的指导下独立进行研究所取得的研究成果。除了文中特别加以标注引用的内容外，本论文不包含任何其他个人或集体已经发表或撰写的成果作品。对本文的研究做出重要贡献的个人和集体，均已在文中以明确方式标明。本人完全意识到本声明的法律后果由本人承担。

作者签名：

日期： 年 月 日

学位论文版权使用授权书

本学位论文作者完全了解学校有关保留、使用学位论文的规定，同意学校保留并向国家有关部门或机构送交论文的复印件和电子版，允许论文被查阅和借阅。本人授权湘潭大学可以将本学位论文的全部内容编入有关数据库进行检索，可以采用影印、缩印或扫描等复制手段保存和汇编本学位论文。

涉密论文按学校规定处理。

作者签名：

日期： 年 月 日

导师签名：

日期： 年 月 日

摘要

最近，一种类石墨烯结构的二维硅纳米材料——硅烯，从理论预测到实验合成得到广泛的研究。不同于石墨烯的平面六角结构，硅烯具有低的 buckling 六角结构。不同于石墨烯的多层堆垛形成石墨结构，其层间仅存范德瓦尔斯作用，也无表面重构。硅烯的多层堆垛结构丰富，其层间存在强的共价键作用，并且具有明显的表面重构。这些二维硅纳米材料其具有优异的物理性能，在微电子、新能源等领域具有广泛的应用前景。热输运性质是二维硅纳米材料的一个重要的基本属性。而由于实验条件的限制，理论模拟也处于起步阶段，人们对二维硅纳米材料热传导机制认识不清晰，对其热输运性质的调控手段也较为匮乏。因此，本论文中我们基于分子动力学模拟，系统开展了二维硅纳米材料热输运性质及其调控的研究。本论文的具体要点如下：

1. 介绍了对硅基纳米材料的分类及发展历程，侧重阐述了对二维硅纳米材料热输运性质研究的重要性。
2. 详细介绍了分子动力学的发展及其基本概念，计算模拟的大致流程及作用势的选取和两类典型的非平衡态方法对热输运性质的模拟，同时介绍了利用分子动力学模拟来计算声子谱的方法。
3. 我们采用外加温度梯度的 NEMD 方法模拟计算了硅烯在光滑的 h-BN 衬底及 h-BN 三明治结构下热导随长度变化的关系。发现硅烯热导 κ 与长度的关系满足 $\kappa \propto L^\beta$ 。同时发现 h-BN 界面耦合作用可使 β 显著增大，表明硅烯声子的弹道输运特性在衬底作用下得到了增强。对于放置在 h-BN 衬底上的情形，我们发现 β 增大主要来源于 h-BN 作用使硅烯 ZA 声学支的变化和光学支上移的共同作用。而对于在 h-BN 三明治结构的情形，硅烯声子弹道热输运的增强主要归因于层相互作用加强而导致所有声学支的速度增大。
4. 基于 NEMD 模拟，我们研究了层间具有共价键作用的多层硅热输运性质与其表面重构及厚度尺寸的关联。我们首先发现双层硅结构因表面重构结构的差异使得其热导率呈现显著的各向异性和高热导与低热导的双向性。继而固定其表面结构，研究了多层硅热输运随其厚度的演化关系。发现随着层数的增加而其热导差异减小，同时各向异性逐步减小。当厚度达到十层的时候，多层硅热导的各向异性基本消失。

关键词：硅烯；多层硅；分子动力学；界面耦合；热输运的各向异性。

Abstract

Recently, a two-dimensional (2D) silicon structure (silicene) which is analogy to graphene has been widely studied both in the theoretical predictions and experimental synthesis. Unlike graphene which has a flat hexagonal structure, silicene has a low buckling of structure. It is known that stacked multilayer graphene forms the graphite structure with weak van der Waals interlayer interactions, and there is no surface reconstruction. While, there are covalent interlayer interactions in the stacked silicene structures, which have significant surface reconstructions. The two-dimension silicon nanomaterials have excellent physical properties, and have great application potentials in microelectronics, new energy and other fields and so on. The thermal transport is an important property of two-dimensional silicon nanomaterials. Due to the limitation of experimental conditions, as well as the theoretical simulation is still in its infancy, the understanding of the heat conduction mechanism of silicon-based nanoscale still not clear and people knows little on the ways to effectively manipulate its thermal transport property. Therefore, by using the molecular simulation method calculation, in the present thesis we systematically investigate the thermal conduction in the 2D silicon nanomaterials and explore the ways on their thermal conductivity manipulation. This thesis is structured as following:

1. The classification and development processes of silicon nanomaterials are firstly introduced. Then the significance of investigating thermal transport properties of 2D silicon nanometer materials are specifically elaborated.

2. The basic concept and the development of molecular dynamics (MD), the MD computation flow chart, as well as the selection of potential and two kinds of typical non-equilibrium MD (NEMD) methods on the thermal conductivity calculations are introduced. A direct-measured method for the phonon spectrum calculation in use of MD is also introduced.

3. We have performed the external temperature gradient NEMD calculations on the length dependence of thermal conductivity of silicene both supported on and sandwiched between smooth surfaces of h-BN. It is found that the thermal conductivity κ of silicene follows a power law $\kappa \propto L^\beta$ with β distinctly increasing with the effect of h-BN interface coupling, which shows an enhancement of the ballistic thermal transport property. we have found that the increase of β for silicene supported on h-BN mainly comes from the diversification of ZA acoustic phonon mode as well as the upshift of

optical phonon mode. As for the silicene in the sandwich structure, the enhancement of ballistic thermal transport is attributed to the increase of velocity of all the acoustic phonon modes with the interlayer interaction increasing.

4. Based on the NEMD simulations, we have studied the thermal conductivity of multilayer silicon, explored the surface reconstruction and thickness effects on the thermal conductivity of 2D silicon. Firstly, we have explored the effect of surface reconstruction on thermal conductivity of 2D silicon. It is found that the thermal conductivity of two-layer silicon structures shows significant anisotropy, and it can be either high or low depending on the reconstructed surface structures. Then, we have explored the thickness effect on thermal conductivity of 2D silicon with the same surface structure. It is found that the thermal conductivity difference among the multilayer silicon structures is reduced with their thickness increasing. Also, the thermal conductivity anisotropy is much smaller in the thicker multilayer silicon. Especially, the thermal conductivity anisotropic is nearly disappeared when the thickness increases to 10 silicon layers.

Keywords: Silicene; Multilayer silicon; Molecular dynamics; Interface coupling; Thermal conductivity anisotropy.

目 录

第 1 章 绪论	1
1.1 引言	1
1.2 硅纳米材料分类及其研究现状	2
1.3 二维硅纳米材料热输运性质的重要性	4
1.4 主要研究的内容	5
第 2 章 分子动力学方法	6
2.1 分子动力学简介	6
2.1.1 基本概念和原理	6
2.1.2 势函数的选取	8
2.1.3 积分算法	10
2.2 热传导的分子动力学模拟	11
2.2.1 两类热传导分子动力学的考察	11
2.2.2 声子谱的分子动力学方法	13
第 3 章 硅烯热传导性质及其调控的研究	15
3.1 研究背景	15
3.2 计算方法与模型	16
3.3 h-BN 衬底对硅烯热导率的影响	17
3.3.1 弱相互作用界面效应	18
3.3.2 强相互作用界面效应	19
3.3.3 机理分析之界面效应对硅烯声子散射的影响	21
3.4 小结	22
第 4 章 多层硅热输运性质的研究	23
4.1 研究背景	23
4.2 计算方法与模型	24
4.3 多层硅热导率随层数的各向异性与尺寸效应	26
4.4 小结	30
第 5 章 总结与展望	31
5.1 工作总结	31
5.2 工作展望	32
参考文献	33
致谢	40
个人简历、在学期间发表的学术论文与研究成果	41

第1章 绪论

1.1 引言

自从上世纪五十年代由著名理论物理学家、诺贝尔获得者 Richard Feynman 提出对原子或分子按照人们的意志进行操控设想, 纳米科技的雏形便逐渐完善^[1]。经过半个多世纪的发展, 如今以纳米材料及纳米工艺为主要对象的纳米科技已日渐成为基础研究与应用的前沿领域之一。本世纪的首个十年, 各国投入大量的人力与物力在纳米科技上取得重大突破, 尤其是出现的纳米团簇、管、线及纳米纸等相继被报道。以 2010 年物理 Nobel 得主因在二维材料石墨烯的实验制备突破事件为标志掀起了纳米科技的高潮^{[2][3]}。从物理尺寸上而言, 纳米科技主要针对是体系在 1~100nm ($1\text{nm}=10^{-9}\text{m}$) 之间, 研究其材料的组分、制备、性能及应用相关。同时作为纳米科技发展的重要基础和研究对象——纳米材料, 根据相关定义由其维度上区分大致可归纳成三大类: ①零维性材料, 它的直观特征是三个维度都处于纳米量级。常有的有原子点、团簇以及纳米颗粒等; ②一维性材料, 指其空间中有且仅有两个维度处于纳米尺度范围, 典型的有纳米的线、棒和管; ③二维性材料, 指在三维空间中只有单独的一个维度属于纳米量级, 这类材料有超薄纳米膜、片及组合的超晶格等。另一方面, 由构成物质的组分及类别可以有多种, 大体上可分为金属、半导体、陶瓷、有机-无机复合及介孔固体与介孔复合等等纳米材料^[4]。

硅作为地壳层含量第二的元素, 自然界主要以化合物存在于石英(主要成分 SiO_2) 中, 1789 年法国化学家 Antoine Lavoisier 预言硅的存在^[5], 22 年后首次提炼出无定形硅, 直到 1854 年才制备出晶体硅^[6]。硅作为第四主族碳族元素, 具有类似于碳的晶体结构, 它是一种良好的半导体的材料。硅对于现代电子设备而言是一类极好的应用材料, 随着硅基设备逐步地精细化, 其尺寸接近纳米而表现出奇特的纳米特性。同碳基纳米材料一样, 硅基纳米材料结构也具有丰富多样性, 由于这些独特的结构, 表现出与常规材料不同的性质, 这主要归因于纳米材料特有的表面、小尺寸、宏观量子隧道三大基本效应。因而, 硅纳米与传统硅材料相比表现出一些独有的力、热、光、电及磁等特性, 使得硅纳米材料一直在纳米科技中占据重要的一席。

1.2 硅纳米材料分类及其研究现状

由于硅材料具有多种应用领域，有了半个多世纪的应用事实。传统工艺上按其单质纯度上划分主要：工业级硅、太阳能级硅、电子级硅；同时按晶体学定义的结构分为单晶、多晶和非晶硅。按特定产业如光伏领域又可分硅带、硅晶；硅结合纳米维度来分，主要有（1）零维硅粒团簇，主要有原型硅，类富勒烯的硅球及其氢化物、金属包裹球等硅自组装团簇；（2）一维硅材料，常见硅纳米线，硅纳米管（Si-NT）；（3）二维纳米硅，主要有硅烯（Silicene），多层硅膜；几类硅纳米材料如图 1-1 所示，接下来分别对这几类典型硅纳米材料研究进展及现状作进一步介绍。

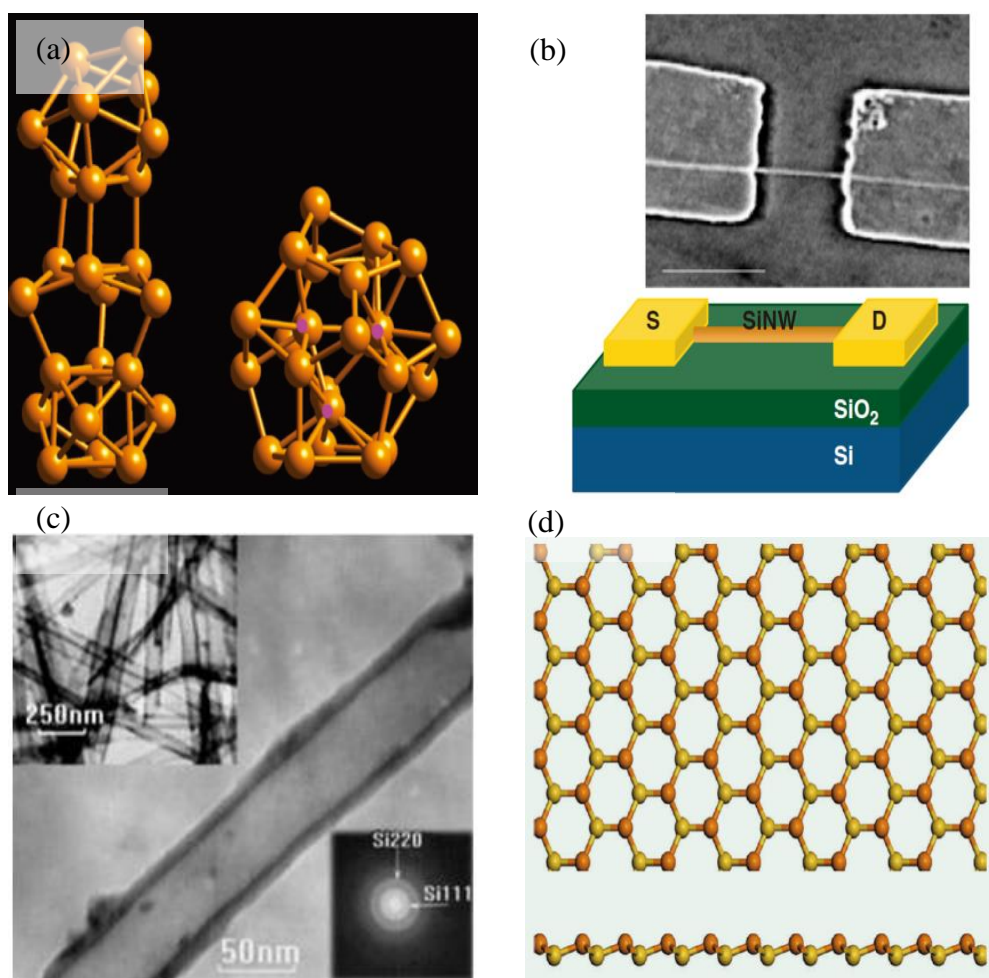


图 1-1 几种常见的硅基纳米材料:(a)硅团簇^[7]；(b)硅纳米线^[13]；(c)实验观察的硅纳米管^[13]；(d)硅烯^[15]。

硅团簇习惯上认定其尺寸小于 10nm 体系，上世纪大量的研究主要集中在硅晶粒、多孔或非晶体硅结构相变维持 2-3nm。对于 Si_n 团簇体系， n 表征体系的大小。当 $n < 14$

称为小尺寸硅团簇；当 $20 < n < 100$ 归于中尺寸团簇；而大团簇一般要满足 $n > 100$ ^[7]。大量理论计算预测当团簇处于 30-100 个原子下开口比闭口包结构上能量更稳定，闭口包实验上限制不超过 14 个原子^[8, 9]，这与第一性 *ab initio* 及经验方法相一致^[10, 11]。直到 1990 年发现多孔硅具有冷致光现象掀起了世界范围内的研究热潮^[12]。其实从 20 世纪 50 年代多孔硅被发现以来，由于多孔硅具有大的比表面、高电阻率等性能致使其在传感器、微电子及光电子学、MEMS 器件及技术、能量转换甚至在生物医学领域都得到广泛的研究和应用。而对于一维的硅材料侧重研究硅纳米线和类似碳纳米管的硅纳米管^[13]。自然界中碳元素主要以 sp^2 杂化而稳定存在，而对于硅及其衍生物而言更加倾向 sp^3 杂化存在。因此碳纳米管相对容易形成，而硅纳米管结构很难形成，硅体系更易于形成稳定的金刚石结构，同时在制备上硅的典型一维材料主要以线型结构。虽然理论上表明可以制备出来 Si-NT，但实验上制备出硅纳米管的报到寥寥无几(湖南大学唐元洪教授做出来过)。已有理论中有 Kang 等人进一步研究发现硅中 sp^3 与 sp^2 比率与硅纳米管管径成反比^[14]。直到如今，硅杂化(sp^2 , sp^3 ，或两者的混合)是理论研究硅材料的结构、稳定性、电子性质等重要的主题。相比于碳管在场发射显式屏上的应用，硅纳米管主要优势是它是单一的半导体纳米管，克服了碳纳米管的半导体和金属性的双重特性遇氧易于转变的不稳定性，同时兼容已有的硅微电子技术。硅烯作为紧随石墨烯之后的又一兴起之秀，它几乎继承了石墨烯的类似特性，比如狄拉克-费米特性^[15]。另一方面，它又具有一些石墨烯没有的特性。硅烯被 Guzman-Verri 等人在 2007 年命名为“silicene”之前就在理论上作为石墨烯的等价替代物提到过。当时，Takeda 和 Shiraishi 系统地研究过第四主族元素（碳、硅、锗等）能否形成单层原子结构^[16]，经研究发现相比于石墨烯的平面蜂窝状结构，硅更倾向形成非共面的翘曲（buckling）结构。之后大量的研究在考察硅烯的合成和生成问题^[17-19]，然而纯粹的 free-standing 硅烯至今也没制备成功过。Lalmi 等人于 2010 年首次宣称在 Ag(111)上制备出单层硅烯，这开辟了硅烯制备的一条新途径。目前，已有报道单层硅烯能够在一系列的衬底上制备，比如 Ag、Ir、ZrB₂ 等物质的表面^[18, 20, 21]。然而，大量研究表明硅烯与衬底相互作用会表现出一些新现象或属性，比如，当硅烯放在 ZrB₂ 薄膜上制备会打开硅烯的能带带隙，硅烯在六角蜂窝状的氮化硼（h-BN）上其狄拉克锥得到完美的保护，其电子属性也可以调制^[22]。随着纳米材料制备的直接地“top-down”与逆向的“bottom-up”方法的成熟，硅基

纳米材料的制备与应用已逐步实现了从零维到三维种类的完备。最近, Li 研究提出一个可行的在室温下操作方案硅烯场效应晶体管(FET), 是第一次直接论证了硅烯设备与预测的类狄拉克双极性电荷输运相一致^[23]。

1.3 二维硅纳米材料热输运性质的重要性

二维硅纳米材料作为传统的块体硅材料与纳米科学与工程相结合的一门新型研究课题, 在制备与应用过程中会遇到各类热输运相关问题, 如加热、熔化、凝固、隔热保温以及散热等。另一方面纳米尺度上的热传输与常规尺寸上的热传输又有一些表征上差异, 测定或预测硅纳米材料热性质已经变得越来越重要, 使得这些成为必须关注的焦点之一。

首先, 二维硅纳米材料与已有的微纳电子产业的发展密切相关, 热传导作为微纳电子产业关注的核心问题之一。伴随着科技的发展和生产需求, 微电子器件及其电路向高度集成化发展成为必由之路, 使得现有的微电子元件尺寸必须精细化。然而, 随着这些设备材料尺寸精细化, 表征材料的传热能力也需要同步提高, 为此需要对材料的热输运进行改进与提高。例如, 随着计算机发展, 其工作核心器件 CPU 性能成倍提高, 需要对晶体管成倍增加的同时减小比面积, 这使得散热任务变得十分严峻。

其次, 应对当前能源危机下的新能源的开发和利用而选择低热导的二维硅纳米热电材料是一条有效的途径。近些年的一些研究发现表明, 低维纳米材料可以制备出高热电转化效率器件, 这可以突破已有热电材料转化的瓶颈。与传统的基于发光转化的太阳能器件相比, 热电器件应用起来更加便捷, 应用范围更加广泛。

此外, 由于二维硅纳米材料结构丰富、其特性是环境友好型, 应用领域广泛, 对硅纳米材料的热输运研究也具有现实的意义。

对于这些列举的实际应用中可能出现的问题, 能够很好地解决它的前提是——揭示出纳米尺度下热传输的微观机理。研究二维纳米硅材料的热传输, 不但能够反向推动纳米科学与工程技术的发展, 同时也促进了对热传输本身的纵向发展, 是纳米科学中的重要内容。到目前为止已有一些关于二维硅纳米材料研究还十分有限, 同时由于不同实验、理论之间以及实验与理论之间都存在较大的差异。因此, 继续开展和完善对二维硅纳米材料的热传输研究是十分必要的。

1.4 主要研究的内容

论文中涉及到的所有工作都是基于经典的分子动力学方法，采用的是大型并行高效的 LAMMPS 软件包进行模拟^{[24][25]}，本文侧重研究二维硅基纳米体系的声子热输运性质。论文主要围绕两种典型作用力下的硅材料沿不同方向上的其热输运性质。一是基于范德瓦尔斯作用力的硅烯与 h-BN 对硅烯热输运性质的调控影响；二是基于层间存在共价键作用的多层硅热导随其厚度、尺寸的演化。论文由五部分构成，具体如下：

第一章首先调研了硅基纳米材料的分类及发展历程，其次分别介绍了几类典型的硅基纳米材料的应用潜力，论述了对硅基纳米材料热输运性质研究的重要性。最后陈述论文研究框架。

第二章优先介绍了分子动力学是当代数值模拟中比较突出的方案之一，紧接着介绍了分子动力学的起源、常用的基本概念以及涉及到的作用势，探讨了几类常用热导率方法的优缺点。同时为了恒量热导机制，简单陈述了几类计算声子谱的机制及分子动力学方法直接测量声子谱原理。

第三章，我们构建了一类典型的光滑界面的模型，利用分子动力学计算研究了硅烯及其在光滑界面 h-BN 上热输运性质。

第四章，通过多层硅的复杂重构结构模型，研究了这类具有层间强相互作用的多层硅其热输运性质随长度、层数的演变规律。

第五章，综合整理了本论文的两方面的工作总结，并针对已有结果对未涉及到的因素加以提出观点与展望。

第2章 分子动力学方法

随着计算机的发展，数值计算模拟真实实验已经成为一种新的手段，它在理论与实验中无形地构建了一座桥梁。数值微机模拟技术经过几十年的发展，主要包括了蒙特卡罗模拟、经典的分子动力学方法（Molecular dynamics 简称：MD）、MD 与密度泛函结合的第一性方法、离散方法如晶格玻耳兹曼方法。广义上来讲，以上这些方法主要归为两类：随机性模拟和确定性模拟。到目前为止，用来模拟计算材料的热传导方法有：（1）基于晶格动力学的玻耳兹曼（Boltzmann）输运方法（2）非平衡态格林函数方法（NEGF）（3）分子动力学方法。Boltzmann 输运方法基于复杂方程，使得很难得到完备的解析解，因此在实际处理中依赖于多次的离散化近似。导致 Boltzmann 方法处理过程中需要人为地引入了经验参数，容易影响了计算精度。除此之外，该方法对于处理低温热导率也是一大瓶颈。NEGF 对于算法的复杂量庞大，使得现有计算机性能只能满足小尺寸的模拟，该方法主要应用于处理低温热传导问题。另外，以上两种方法都需要对研究体系的声子散射机理有一定的了解的基础上才能很好地求解。MD 方法基于经典的牛顿力学无需对声子散射机制有深入了解，可直接对材料的热传导性质进行模拟，是确定性模拟方法。基于 MD 这一特性使得其在纳米材料热传导性质上应用最为广泛。下面我们将对分子动力学的基本内容和热传导相关的分子动力学模拟方法进行简单介绍。

2.1 分子动力学简介

20 世纪 50 年代末，B. J. Alder, T. E. Wainwright 相继提出并应用在理想的硬球液态模型，初步构建了 MD 的雏形，后续发展经历 Andersen, Parrinello 和 Rahman 等人建立了恒压分子动力学^{[26][27]}，以及由 Nosé 等人完成恒温分子动力学方法并成功应用^{[28][29]}，才使得分子动力学模拟得到完善和真正成为一种材料物性研究的重要方法。接下来从 MD 的基本原理、作用势、积分算法等做简要介绍。

2.1.1 基本概念和原理

经典的分子动力学方法是基于牛顿力学定则按照所研究对象的内禀属性（比如

常用的哈密顿量或拉格朗日函数来描述) 计算并确定体系的位形转变。对于 N 个原子构建的研究体系中, 每个原子满足:

$$m_i \frac{\partial^2 r_i}{\partial^2 t} = f_i \quad (2.1)$$

$$f_i = - \frac{\partial U(R_N)}{\partial r_i} \quad (2.2)$$

式中 m_i 表示原子质量, r_i 是原子 i 的位置坐标。原子间的力是相互作用的势能函数对原子位移的负偏导。 $R_N = (r_1, r_2 \cdots r_N)$ 是体系 N 个原子坐标集合。

$U(R_N)$ 分子动力学研究的基本考虑要点是 (1) 对于研究体系, 其粒子数 N , 粒子间彼此有相互作用, 选取合适的作用势; (2) 基于基本牛顿力学方程组, 数值解析出粒子当前和下一时刻的物理量, 如速度、位移等; (3) 设定恰当的周期性边界条件; (4) 统计约束, 比如施加在体系中能量、温度等相关量。具体的 MD 模拟细节大致可以归纳为流程图 2-1 所示。

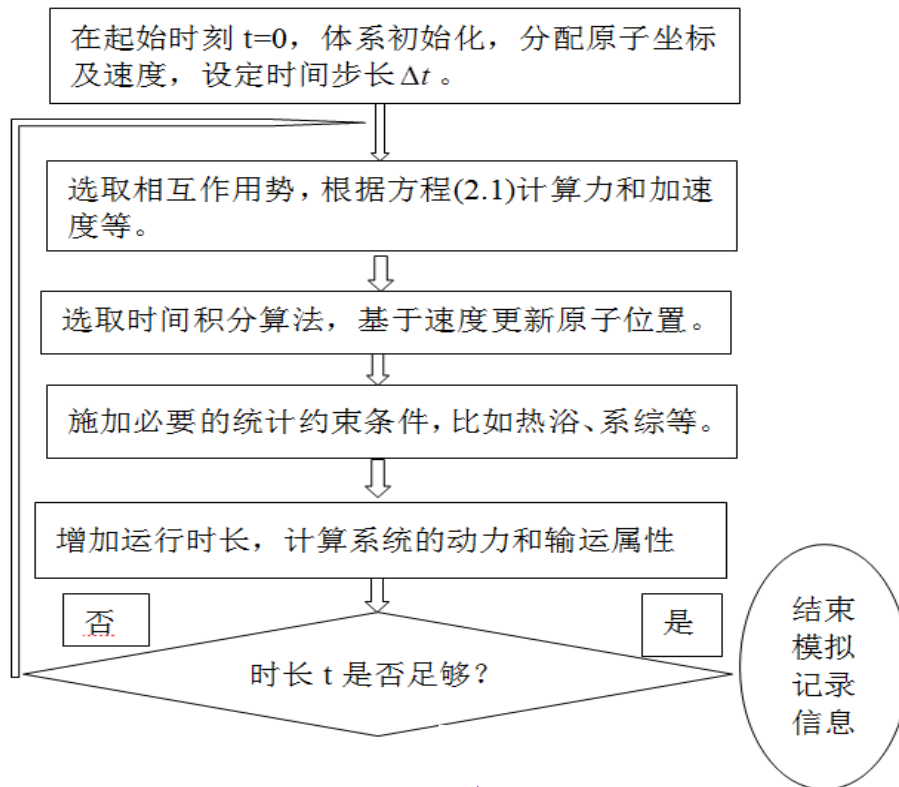


图 2-1 分子动力学方法模拟的流程图

2.1.2 势函数的选取

在模拟过程中，原子间的作用势选取是模拟的关键，而势函数一般形式可以表示为：

$$V = \sum_i v_1(r_i) + \sum_i \sum_{j>i} v_2(r_i, r_j) + \sum_i \sum_{j>i} \sum_{k>j>i} v_3(r_i, r_j, r_k) + \dots \quad (2.3)$$

公式按原子间相互作用关联数量展开分为单体势、二体势、三体势等等，为了遍及所有原子求和项粒子下标设定满足条件 $k > j > i$ 使得不重复计算。作用在原子上的力可以通过(2.1)得到。势函数的选取是模拟前必须要考察的步骤之一，现有对势的研究一般是基于原子间作用是短程的，即原子 j 与原子 i 之间的力是有作用范围的，当超过这一距离后两原子间的作用力可以忽略不计。在实际应用模拟中，引入了这一最大作用距离 R_c ，称之为截断距离。这在计算上能节约大量的计算资源，因为在相对原子距离为 r 的原子数目几乎是随 r^2 指数增长。引入截断距离 R_c 时，原先的作用势如两体作用势函数 $\phi(r)$ 会简化为：

$$i < j < k < \dots \phi(r) = \begin{cases} \phi(r) - \phi(R_c) & r \leq R_c \\ 0 & r > R_c \end{cases} \quad (2.4)$$

由于体系的复杂性以及原子间相互作用力的类型差异，很难找到适应各种不同体系、组分和物质的普适性的同时又具有高精度的普遍势函数，所以根据不同的物质体系大量工作者相继发展了多种势函数。目前来看，势函数主要有对势模型，半经验势，经验势。MD 模拟最先主要采纳对势模型，该模型适用于描述除金属和半导体以为的大部分无机化合物。势的发展主要途径一方面是经过一定的理论分析获得，但另一方面其中的一些参数需要根据宏观实验参数用实验方法来确定，这些宏观实验参数主要表征物质的属性，常见的有弹性常数（包括杨氏模量、体变模量、剪切模量等）、平衡晶格常数、内聚能、缺陷导致的形成能等，这些归类为半经验势。再之后，一些学者为了拟合的方便，选取势函数的形式并不包含确定的理论依据，而是根据已有经验的估计与猜测，选用一些相对自由的函数形式，这类势函数属于经验势^[30]。本论文主要涉及到的几类作用势便是经由以上思想发展而来的，具体做如下介绍。

Lennard-Jones 势，标准形式也称为 12-6 两体作用势，早在上世界三十年代由 John Lennard-Jones 提出^[31]，是一类常见 van der Waals (vdW) 非共价键弱相互作用

力。

$$V(r_{ij}) = 4\varepsilon_{ij} \left[\left(\frac{\sigma_{ij}}{r_{ij}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma_{ij}}{r_{ij}} \right)^6 \right] \quad (2.5)$$

式中 r_{ij} 是原子间作用距, 两个参数 ε_{ij} 和 σ_{ij} 分别描述原子间的作用强度和势能为零时的距离。

Tersoff 作用势最初由 J. Tersoff 于 1985 年依据键序取决于局部环境, 由 Morse 对势的演变而来。它能很好地描述 diamond 型的碳、硅体系, 经过不断对不同体系的拟合, 现在能很好地描述碳、硅、硼、氮等元素间的作用势, 它也是一种最常用也是最有效的势函数。具体表达形式可以写成^[32-36]:

$$V = \sum_i \sum_{j(i < j)} f_c(r_{ij}) [V_R(r_{ij}) - b_{ij} V_A(r_{ij})], \quad (2.6)$$

V 下标中的 R 与 A 分别表示为物理上的排斥项和吸引项, 其中:

$$V_R(r_{ij}) = A \exp[-\lambda_1 r_{ij}], \quad (2.7)$$

$$V_A(r_{ij}) = B \exp[-\lambda_2 r_{ij}], \quad (2.8)$$

$$f_c(r_{ij}) = \begin{cases} 1 & , r_{ij} < R \\ \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \cos[\pi(r_{ij} - R)/(S - R)] & , R < r_{ij} < S, \\ 0 & , S < r_{ij} \end{cases} \quad (2.9)$$

$$b_{ij} = (1 + \xi_{ij}^\eta)^{-\delta}, \quad (2.10)$$

$$\xi_{ij} = \sum_{k(i \neq j)} f_c(r_{ik}) g(\theta_{ijk}) \exp[\alpha(r_{ij} - r_{ik})^\beta], \quad (2.11)$$

$$g(\theta_{ijk}) = g_{org}(\theta_{ijk}) = a \left(1 + \frac{c^2}{d^2} - \frac{c^2}{d^2 + (h - \cos \theta_{ijk})^2} \right) \quad (2.12)$$

式中 r_{ij} 表征原子 i 与原子 j 之间的作用距离, θ_{ijk} 衡量 $i-j$ 键与 $i-k$ 键之间的夹角大小, 是描述键角间的具体势能参数。需要特别注意的是体系中必须满足参数 β 和 $\eta \times \delta$ 分别等于 3 和 0.5。Tersoff 势的优点是能满足原子间作用力的描述和计算速度的提高, 实用性比较广泛。2009 年由 T. Kumagai 等人对 Tersoff 势进行局部修改, 形成 Mod 势^[37], 它能很好的描述硅结构的相变和动力学行为。相比于原 Tersoff 势主要修改了(2.9)为

$$f_c(r_{ij}) = \begin{cases} 1 & , r_{ij} < R \\ \frac{1}{2} + \frac{9}{16} \cos \left[\pi(r_{ij} - R) / (S - R) \right] - \frac{1}{16} \cos \left[3\pi(r_{ij} - R) / (S - R) \right] & , R < r_{ij} < S \\ 0 & , S < r_{ij} \end{cases} \quad (2.13)$$

除此之外，关键的角依赖项修正为

$$g(\theta_{ijk}) = g_{trans}(\theta_{ijk}) = c_1 + \frac{c_2(h - \cos \theta_{ijk})}{c_3 + (h - \cos \theta_{ijk})^2}, \quad (2.14)$$

此处 c_1, c_2, c_3, h 是势参数。当 $c_1 = a, c_2 = \frac{ac^2}{d^2}, c_3 = d^2$ 时，修正的 $g_{trans}(\theta_{ijk})$ 与原有的 Tersoff 项 $g_{org}(\theta_{ijk})$ 完全等价。为了增加 Mod 势的弹性度，它没有 Tersoff 的约束条件 $\beta = 3$ 和 $\eta \times \delta = 0.5$ 的限制。

2.1.3 积分算法

Verlet 积分算法是 MD 模拟中最常见和使用最广泛的算法^[38]，其中心思想是基于粒子位置量 $r(t)$ 关于时间的 Taylor 展开保留到三阶项：

$$\begin{aligned} r(t + \delta t) &= r(t) + v(t)\delta t + \frac{1}{2}a(t)\delta t^2 + \frac{1}{6}b(t)\delta t^3 + O(\delta t^4), \\ r(t - \delta t) &= r(t) - v(t)\delta t + \frac{1}{2}a(t)\delta t^2 - \frac{1}{6}b(t)\delta t^3 + O(\delta t^4). \end{aligned} \quad (2.15)$$

式中 v 是粒子的速度， a 是对应粒子加速度，参数 b 是位移对时间 t 的三阶导数。两式相减简化成

$$r(t + \delta t) = 2r(t) - r(t - \delta t) + a(t)\delta t^2 + O(\delta t^4). \quad (2.16)$$

这就是 Verlet 算法的基本形式。当体系随着 δt 演化时，该算法因展开的项数有限而带来的截断误差数量级是。这个算法的体现出来的优势首先是其表达式简单，递归突出且编程易于实现，再者随时演化带来的误差小，即计算结果稳定、可靠。Verlet 算法关键问题是粒子速度不能直接得到，需要通过先获取下一时刻的位置与前一时刻的位置，具体可以通过(2.15)式进行换算为：

$$\delta t^4 v(t) = \frac{r(t + \delta t) - r(t - \delta t)}{2\delta t} + O(\delta t^2). \quad (2.17)$$

然而，对比速度与位置的误差与时间 δt 的关系可知，速度的误差数量级是 δt 的二次方，而位置的误差是 δt 的四次项有关。为了消除误差数量级的差异，人们对基

本的 Verlet 算法进行了一些改进形式。对速度进行处理更便捷有效的方式是 Velocity-Verlet 算法^[39]，具体变形式如下：

$$\begin{aligned} r(t + \delta t) &= r(t) + v(t)\delta t + \frac{1}{2}a(t)\delta t^2, \\ v(t + \delta t) &= v(t) + \frac{1}{2}a(t)\delta t, \\ a(t + \delta t) &= -\frac{1}{m}\nabla V[r(t + \delta t)], \\ v(t + \delta t) &= v(t + \frac{\delta t}{2}) + \frac{1}{2}a(t + \delta t)\delta t. \end{aligned} \quad (2.18)$$

Velocity-Verlet 算法在实际的模拟中已广泛被使用，论文中正是采用该算法对基本的运动方程进行时间积分。

2.2 热传导的分子动力学模拟

分子动力学对热传导的处理能有效的包含材料的物化属性，比如边界散射、晶格缺陷、同位素效应、参杂等等。这也是分子动力学广泛应用于热输运的原因之一。目前主要存在两大类分子动力学的热传导方法：(1)基于耗散波动理论的 Green-Kubo 公式的平衡态分子动力学（EMD）；(2)基于 Fourier 热传导公式的非平衡态分子动力学（NEMD）。另一方面表征热传导强弱的重要诱因是晶格集体振动——声子，声子的色散关系（声子谱）是考察热输运性质的重要手段之一。为此，接下来对两类热传导模拟方法和计算声子谱的方法进行简要介绍。

2.2.1 两类热传导分子动力学的考察

平衡态分子动力学模拟中，体系维持在稳定的平衡态，体系的粒子没有受到外加作用力，即处于微正则系综 NVE 下，其热导率依赖于热流自关联函数^[40]

$$\kappa = \frac{1}{3k_B T^2 V} \int_0^\infty \langle \vec{J}(0) \cdot \vec{J}(t) \rangle dt \quad (2.19)$$

式中 k_B 是玻耳兹曼常数， V 是研究系统的有效体积， T 对应系统温度， $\vec{J}(t)$ 描述的是系统热流，角括号 $\langle \rangle$ 是系综取平均值。热流 $\vec{J}(t)$ 是基于 Green-Kubo 线性响应，其表达式：

$$\vec{J}(t) = \frac{d}{dt} \sum_i r_i(t) \varepsilon_i(t), \quad (2.20)$$

此处， r_i 是与时间相关的原子 i 的坐标位置，当把势能 ε_i 简化为对势的形式时

$$\varepsilon_i = \frac{1}{2} m_i v_i^2 + \frac{1}{2} \sum_j u_2(r_i, r_j). \quad (2.21)$$

从热流定义式 (2.20) 出发, 可以得到:

$$\vec{J}(t) = \sum_i v_i(t) \varepsilon_i(t) + \frac{1}{2} \sum_{ij, i \neq j} r_{ij} (F_{ij} \cdot v_i). \quad (2.22)$$

以上公式还未提及的 v_i 及 u_2, F_{ij} 分别对应粒子的速度, 两体作用势, 受到的力。从理论公式(2.19)来看, 整个求解过程及积分无任何瑕疵, 但另一方面由于其积分上限时间是无限长, 这对于实际模拟计算是不可行的, 因此热导率的模拟跟时间总长有关, Li 等人提出了一个量化的方法确定热流自相关函数有效的截断时间^[41]。

非平衡分子动力学方法模拟热导常根据调控热流方式的不同来区分, 具体可分为直接法和各向同性法: (1) 直接法主要是给体系提供外加热流或温度梯度 (具体是通过两个区域加不同温度的热浴或注入抽取热流的方式维持体系达到动态的非平衡态) 使得体系有形成一定的温度梯度^[42, 43]; (2) 各项同性法通过给体系中的不同区域粒子施加微小的扰动, 它结合了平衡态的周期条件下的线性响应机制的同时具有非平衡的特性, 其物理量算法无梯度产生^[44]。由于各项同性 NEMD 难以控制外加扰动维持在线性响应区, 同时不直观, 在实际应用中并不广泛, 在这不再另做阐述。在 NEMD 方法中, 材料的热导率可由下式直接算出来:

$$\kappa = -\frac{J}{\nabla T \cdot S}. \quad (2.23)$$

直接 NEMD 方法的核心是如何建立一个稳定的非平衡态。实现这一要求的途径主要有两种: 一种是通过外加恒定热流建立, 比如 Jund 和 Jullien 建立的算法^[29]、Muller-Plathe(MP)算法^[42]等这些方法是直接形成热流间接建立温度梯度。另一种途径是通过外加恒定温度梯度建立。这两种直接的 NEMD 在模拟应用中比较广泛, 我们重点考察了这两种方法。

我们基于 LAMMPS 模拟, 对比了外加热流与外加温度法。在外加热流方式的 NEMD 中, 它主要是通过间隔一定的时间就在热区注入一定的能量, 同时从冷区抽取相同的能量来维持体系的恒定热流。由于注入或抽取的能量对特定系统而言需要量不确定, 因操控的热量或频次高而容易使得建立的温度梯度过大, 这对热导率的测定有很大的影响。但是这种方法的优点的体系建立温度梯度较快, 需要模拟的时间相对少。

以外加温度梯度的 NEMD 中，需要控制体系热、冷区在恒定的温度上，而控温的外加热浴与体系耦合需要比外加热流的方式形成温度梯度更长的时间，另一方面在热浴与体系的边界处会产生很大的温度非线性区。这种方式能很好地控制体系的温度，与真实的实验环境也更加接近。

本文根据两种方式的特点，在后文涉及到的 NEMD 模拟都采用外加温度梯度法。

2.2.2 声子谱的分子动力学方法

在晶体学中，晶格动力学是开启研究固体热属性的密钥，同时它应用于固态和矿物科学中^{[45][46]}。基于量子理论的晶格动力学它揭示了原子在晶体中的振动特性，振动模式以波的形式展开的一种集体振动称之为“声子”（phonon），其晶格振动的简正模的状态密度称为声子谱，假定第 i 支简振模式的色散关系为 $\omega_i(\vec{q})$ ，其中 \vec{q} 是波矢，则频率在区间 ω 到 $\omega+d\omega$ 的态密度 $g(\omega)$ 为

$$g(\omega) = \sum_{q_i} \delta(\omega - \omega_i(\vec{q})) \quad (2.24)$$

这里 $\delta(\omega - \omega_i)$ 是 Dirac δ 函数。由此可以推出，如果知道简振模式的色散关系就可以求得态密度 $g(\omega)$ 。因此有时声子谱也指简振模式的色散关系。

实验上可以间接地通过几个晶格波相互作用测量出声子色散，比如中子非弹性散射，或称之为电子能量损失谱。理论上测定声子谱主要有两种方法：（1）基于第一性原理的密度泛函（DFT）——直接法（frozen phonon）^[47]；（2）基于密度泛函微扰理论（DFPT），构建 Hellman-Feynman 力学动力矩阵^[48]，这方法相对来说容易实施，因此也被广泛的应用。然而对于第一性计算需要构建超包结构使其足够包含长相互作用和声子波包，而超包中原子与电子数量成倍增加导致计算量大。（3）基于线性响应机理的经验或半经验力场法，通过构建二阶力场数矩阵求解矩阵的特征值。该方法能直接给出声子色散关系。然而此类方法需要可靠的力场，同时力场不能过于复杂以至于无法求解二阶 Hessian 矩阵。目前，广泛使用的分子动力学法求解基于速度自关联函数，其机理通过模拟收集每个原子的振动轨迹，然后经行自关联函数的傅里叶变换得到声子态密度（PDOS）：

$$g(\omega) = \int e^{i\omega t} \frac{\langle v(t)v(0) \rangle}{\langle v(0)v(0) \rangle} dt \quad (2.25)$$

这种方法的优势在于能很好地精确模拟大尺寸包，但需要足够长的模拟时间和

复杂的数学变换操作。

最近, Kong 提出了基于分子动力学的另一方案^[49], 基于波动耗散理论, 通过直接分子动力学模拟获取弹性格林函数构建动力学矩阵。该方法不仅能获取 PDOS 而且可以获取任意低于熔点的有限温度下的声子谱。格林函数的分子动力学中, 格林函数系数 $G_{lk\alpha, l'k'\beta}$ 能通过不同时刻的位移获取:

$$G_{lk\alpha, l'k'\beta} = \langle u_{lk\alpha} u_{l'k'\beta} \rangle \quad (2.26)$$

同时力学矩阵与格林函数系数的关系式为:

$$\begin{aligned} \Phi_{lk\alpha, l'k'\beta} &= k_B T [G^{-1}]_{lk\alpha, l'k'\beta}, \\ \Phi &= k_B T G^{-1} \end{aligned} \quad (2.27)$$

对应倒空间相应变换就可以。本小节的具体理论及公式符号等可参考文献细节 [49, 50]。

第3章 硅烯热传导性质及其调控的研究

3.1 研究背景

最近，一种类石墨烯结构的二维硅纳米材料——硅烯，从理论预测到实验合成得到广泛的研究^[17, 23, 51-56]。不同于石墨烯的高热导，大量文献研究硅烯平面内的热导率为 $10\sim 70\text{W/mK}$ 远远低于块体硅的热导率（其热导约为 150W/mK ），由于硅烯具有高电输运能力和低热导率，使得其很有潜力作为下一代热电材料和兼容的硅基纳米设备^[23, 53, 57, 58]。目前，大量数值方法研究了纯硅烯的热输运性质，第一性方法，格林函数法，晶格动力学方法等等预测出其热导在 $10\sim 30\text{W/mK}$ ，而分子动力学方法依赖于经验势选取的不同计算结果差异也比较大，同时常规的经验势很难构造稳定 buckling 结构的动力学模型，2014 年 Zhang 基于 SW 势拟合了新的势参数，很好地得到与第一性原理计算相匹配的声子谱。单层硅烯的低热导特性限制了其在纳米电子器件上的应用。因此，对于硅烯的热输运性质的调控研究十分必要，已有研究主要集中在掺杂^[59]、多孔结构^[60]、同位素效应^[61]、应变^[62]。然而，这些调控方式破坏了硅烯原有的结构，对于实际应有很大的限制作用，同时在现有纳米技术下，硅烯的制备及应用离不开衬底，因此需要对衬底上硅烯的热输运性质进行深入研究。

硅烯置放在不同衬底上其电子属性能够得到有效调控，而关于其热输运的调控只有少量文献报道。硅烯放置在 6H-SiC 衬底上其热导得到提升^[63]，而在 3C-SiC 和 SiO₂ 上其热导急剧降低^[64]。这展示了硅烯热输运具有强烈的界面耦合关联效应，这与 Guo 提出的原子链耦合模型对支撑的材料热输运调控效应相互印证^[65]。另一方面，由于 SiC 与 SiO₂ 这种结构复杂的衬底对单层柔软的硅烯结构有强烈的影响，同时在以声子输运的过程中，其界面粗糙，容易引入过多的散射机制，对于调控的机理分析和模拟带来复杂性和不确定性。如何有效的提高硅烯的热导依旧是个关键问题，为此我们开展了以下研究。

3.2 计算方法与模型

我们选取了一种类石墨烯结构的六角氮化硼结构（h-BN）作为硅烯衬底来探索硅烯的热输运性质，由于 h-BN 与硅烯结构类似，其界面光滑，相互间的作用力为典型的范德瓦尔斯力，界面的声子散射比较小，容易形成异质结构器件^[66]。另一方面，已有研究表面 h-BN 能很好地保护硅烯的电子性质^[22]，同时单层硅烯也能够 c-BN（111）面上生成^[67]，这些为我们的研究模型提供了有力支撑。本工作中，我们系统地研究了硅烯在 h-BN 及其形成的三明治结构上的热导随长度的变化关系，着重考察了两种典型方向的硅烯热导，armchair 型（ASi）和 zigzag 型（ZSi）。

我们基于大型并行高效的 LAMMPS 分子动力学软件包，采用非平衡态外加温度梯度法来研究硅烯及其在 h-BN 上的热输运性质，其模型结构如图 3-1 所示。整个模拟过程中，我们分别用 Tersoff 势和 Mod-tersoff 来构建 BN 和硅烯层的相互作用，而 BN 层间及 BN 与硅烯之间势用 Lennard-Jones（LJ）描述，具体势函数见上章描述，对于 Tersoff 势及 Mod 势分别采用文献^[68]、^[37]，而 LJ 势见第二章公式（2.5），其参数来源于文献^[69]，如表 3.1 所示。

表 3.1 详细的 Lennard-Jones 势关于硅烯与 h-BN 及不同 BN 层间作用势参数，能量 ϵ_{ij} 和距离 σ_{ij} 单位分别是 meV 和 Å。

	Si		B		N	
	ϵ_{ij}	σ_{ij}	ϵ_{ij}	σ_{ij}	ϵ_{ij}	σ_{ij}
B	7.44	3.692	4.12	3.581	3.72	3.422
N	6.72	3.533	3.72	3.422	3.36	3.263

采用 velocity Verlet 积分算法，时间步长为 1 fs，研究体系在 X 方向上的长度范围为 10~80 nm，宽度 Y 方向选取 20 个单胞的 h-BN 与 13 个单胞的硅烯（其宽度对于 armchair 与 zigzag 边界对应为 5/8.6 nm）使其晶格匹配。Y 方向周期性边界条件，同时在长度 X 方向上最外层固定，紧邻的固定长度 3 nm 施加 Nosé-Hoover 热浴在硅烯上，其左右两端分别控温在 310 和 290 K，其示意图如图 3-2 所示。

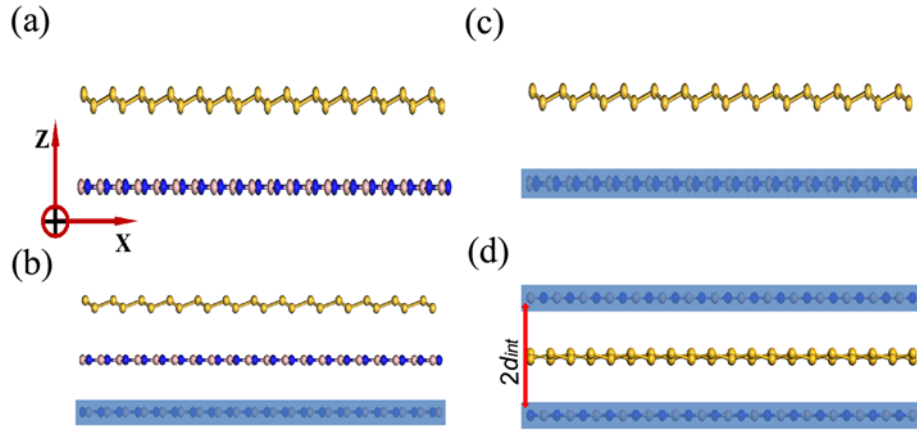


图 3-1 硅烯与 h-BN 四种典型的界面耦合情形（侧视图）：(a) 硅烯直接与单层 h-BN 耦合 (case A); (b) 硅烯与双层 h-BN 耦合，底层 h-BN 固定(case B); (c) 硅烯与固定的单层 h-BN (case C); (d) 硅烯与固定的双层 h-BN 形成三明治结构， d_{int} 表示硅烯与 h-BN 的层间距。

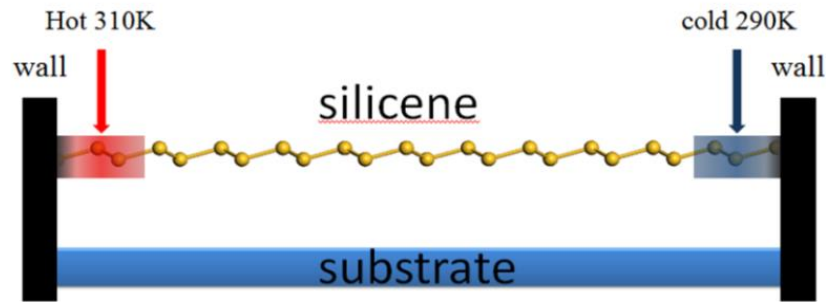


图 3-2 硅烯与衬底相互作用构建的非平衡态控温模拟示意图。

3.3 h-BN 衬底对硅烯热导率的影响

在低维纳米材料中，通常热导 κ 与长度 L 成一指数关系，即 $\kappa \propto L^\beta$ ，式中 β 的大小反映材料弹道热输运（BTT）的强弱^[70-72]。特别，当 $\beta=1$ 时表明体系无非谐相互作用，只存在 BTT 和声子的平均自由程（phonon mean free 简记 PMF）是无限长的。而当 $\beta=0$ ，则体系存在强烈的非谐相互作用，同时其 PMF 远远小于 L ，几乎不存在 BTT。目前研究已经发现，在室温下长度小于 100nm 的体系中，碳纳米管与石墨烯的高热导主要由于其弹道输运贡献， β 的取值范围在 0.36~0.47^[73-75]。这表明对于低维材料有效提高热导可以通过增加弹道输运的权重。

3.3.1 弱相互作用界面效应

首先,我们考虑最简单的情形,硅烯直接与单层 h-BN 作用(case A, 图 3-1(a))。计算两类型方向的硅烯热导随长度关系如图 3-3 所示。同时我们也计算了纯硅烯的热导,通过对比 case A 和纯硅烯的热导率随长度变化关系可知,放在衬底上的硅烯热导率明显增大,表明光滑的界面耦合对硅烯热导提高有强烈的促进作用。另一方面,硅烯与石墨烯、碳管一样符合 $\kappa \propto L^\beta$, 对 freestanding 和放衬底上的 Asi (ZSi) 其 β 是 0.34 (0.31) 小于石墨烯和碳管表明: 硅烯具有更小的 BTT, 其 PMF 更短。

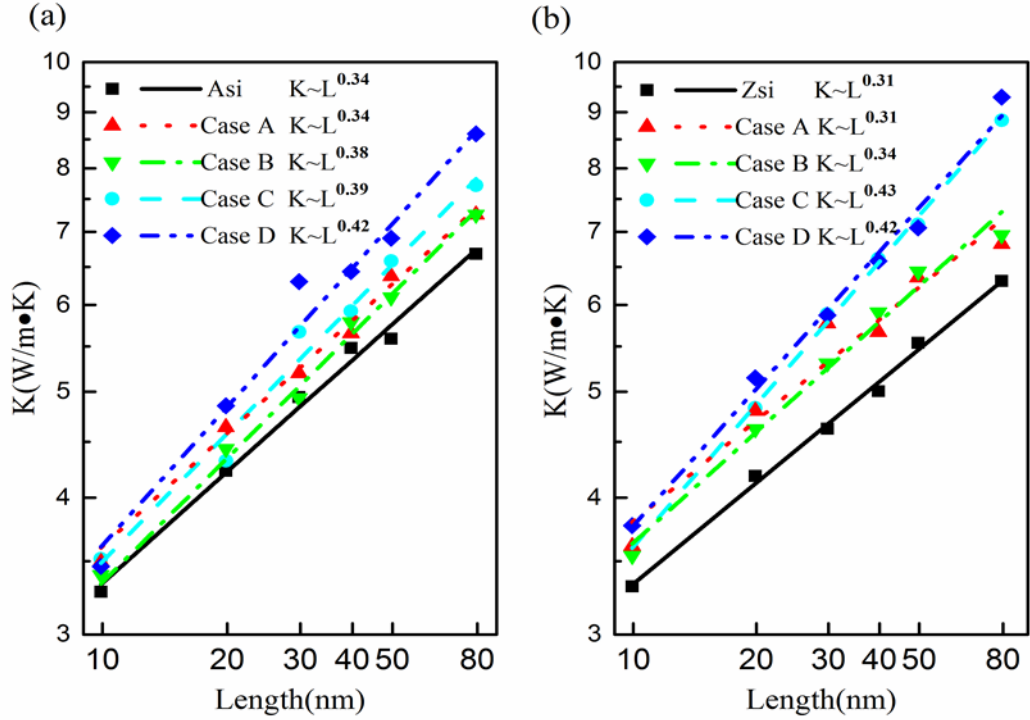


图 3-3 四种不同界面条件下与 freestanding 情形下硅烯热导随长度关系, (a) 对应 armchair silicene (Asi); (b) 对应 zigzag silicene (ZSi)。所有的情形下硅烯热导都遵循指数律 $\kappa \propto L^\beta$ 。

接下来,我们研究了更复杂的情形,硅烯放在块体 h-BN 上,为了节省计算量,我们选取双层 h-BN 且下层固定模型模拟块体衬底,如图 3-1 (b) 所示。由于 h-BN 之间的层间距大于 3 Å, 层间作用为弱的范德瓦尔斯作用,选取更多层 h-BN 来模拟衬底,得到的硅烯热导与我们的双层 h-BN 模型结果差异很小。计算得到的两种类型硅烯 (ASi 和 ZSi) 长度与热导率关系见图 3-3 (Case B), 明显可以看到,相比于 freestanding 硅烯其热导增加,且同样符合 $\kappa \propto L^\beta$ 关系。同时相比于单层 h-BN (Case A) 和 freestanding 情形,块体 h-BN 作用下硅烯的 BTT 效果更加明显。与此同时,

我们可以预期随着长度超过模拟长度使得增加的热导率表现更加显著。

Case A 与 Case B 两个最大的不同在于因 h-BN 界面引入 out-of-plane (ZA) 振动模式差异。Case B 因固定的底层界面处 BN 层的 ZA 模振幅相比于 Case A 而言变得更小, 从而导致硅烯的 ZA 模振动得也到限制, 继而导致其热导增大。因此, 限制 BN 界面的 ZA 声子模式能有效加强硅烯的 BTT。更加极端的情形是 BN 层振动完全被限制, 即 Case C, 单层 BN 固定, BN 仅仅充当势场的作用, 随长度变化的 κ 由于硅烯的声子模式发生变化而使得其 BTT 变得更加明显。也可以预测到因没有来自 h-BN 界面的声子散射而致使硅烯的 BTT 系数 β 具有最大值。从图中可知随长度变化的热导率的 β 变得更大, 对于 ASi (ZSi) 在 Case C 下增大到 0.39(0.43)。这证明了显著加强硅烯的 BTT 主要因界面处 BN 层的作用致使硅烯的声子模式发生变化。

硅烯的 BTT 可以通过在其上下引入 h-BN 夹层形成而带来双重界面效应的三明治结构。为此, 我们考虑了最简单的情形(见图 3-1 (d) 标记为 Case D), 上下两层 h-BN 固定。硅烯与 h-BN 之间距离为范德瓦尔斯平衡距离 (4\AA), 其热导随长度变化关系见 3-3 (Case D)。相比 Case C, 对于 ASi 和 ZSi 的热导都变大了, 这说明三明治结构对提高热导是最有效的。这是因为增加了界面相互作用和由于另一层 h-BN 带来的反演对称性保护。尤其是, 当长度 $L=80\text{ nm}$ 时, ASi (ZSi) 的热导对应是 $8.6(9.3)\text{W/mK}$ 相比于 freestanding 硅烯热导(纯 ASi 6.7W/mK , ZSi 对应是 6.3W/mK) 增大了 30% (48%), 这增加的效果明显大于粗糙界面的效果(文献^[63]中 SiC 在 80nm 时, 其热导相应地增大了 25%) 表明了三明治光滑界面结构模型是提高硅烯热导的最有效的方式。另一方面, 对于这情形下两种类型的硅烯其 β 是 0.42。值得指出的是, 相比 Case C 中 ASi (ZSi) 显著增大(或稍微减小)的潜在机理在后续小节讨论。另外, 我们也进一步检验了更厚的三明治结构, 比如, 硅烯上下都是双层 h-BN 的情形, 在双层的 h-BN 下离硅烯远的那层固定而与其紧密接触的能够自由振动, 计算了在长度为 30nm 时得到的热导值是 5.94W/mK 非常接近单层 h-BN 三明治结构时的热导(单层为 6.3W/mK), 这表明只考虑单层 h-BN 构建三明治结构模型是可行的。

3.3.2 强相互作用界面效应

在之前的情形中, 所有的硅烯与 BN 都是处于平衡作用距离下的相互作用, 存

在的只是弱相互作用界面，我们也考察了在强相互作用下其热输运性质。一种可行且常用的方式通过外界施加额外的压强使得三明治结构界面的层间距 d_{int} 变小 (Case D)。另一方面，硅、硼、氮的共价键原子半径分别是 1.11, 0.9 和 0.7 Å，这意味着当硅烯与 h-BN 距离在 2 Å 左右时容易形成复杂的界面重构，无法再适用于范德瓦尔斯作用力描述。因此，我们选取层间距 $d_{\text{int}} = 3$ Å 时，它既能实现强相互作用又能维持原有光滑的 h-BN 界面相互作用。

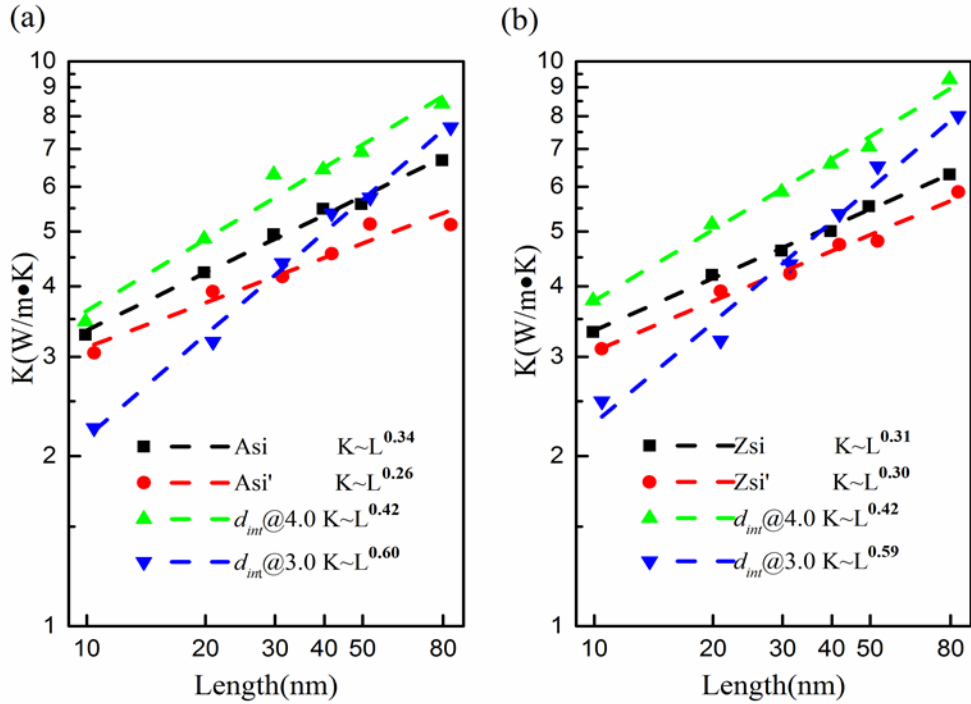


图 3-4 固定的 h-BN 与硅烯构建三明治结构与 freestanding 下硅烯热导与长度变化关系, (a) ASi 方向, (b) ZSi 方向。 $d_{\text{int}}@4.0$ 及 $d_{\text{int}}@3.0$ 分别表示硅烯与 h-BN 的层间距为 4.0 和 3.0 Å, ASi' 和 ZSi' 对应变平的 ASi 和 ZSi

在模拟中，固定层间距 $d_{\text{int}} = 3$ Å 时，先进行完全的结构优化，发现带有 buckling 结构几乎变成平的结构了，同时晶格常数变大到 4.02 Å。为了消除由结构变化导致硅烯热导变化，我们计算了去掉界面相互作用下的平整硅烯热导随长度变化。如图 3-4 所示（为了区分，变形后的 ASi 和 ZSi 两类型此时记为 ASi' 和 ZSi'），ASi' (ZSi') 的热导依旧服从 $\kappa \propto L^\beta$ 关系，此时的 β 对应为 0.26 (0.30) 比原有的 freestanding 翘曲结构的硅烯小，这说明平的硅烯结构不能提升其 BTT，然而，更小层间距的三明治结构致使一个异常大的 β （大约 0.6）这表明了增强的相互作用能使硅烯的 BTT 极大的得到加强。

3.3.3 机理分析之界面效应对硅烯声子散射的影响

为了深入理解光滑的界面效应促使硅烯的热导增大,我们计算了硅烯的声子谱,声子谱是直接通过分子动力学方法获得,具体细节见第二章描述。选取 $\sqrt{3}\times\sqrt{3}$ 的硅烯和 $\sqrt{7}\times\sqrt{7}$ 的 h-BN 组成的晶格失配率小于 3% 的晶胞,模拟中使用的是 $10\times10\times1$ 的超胞结构。整个模拟过程, h-BN 被固定,只抽取 $\sqrt{3}\times\sqrt{3}$ 的硅烯的动力学矩阵。

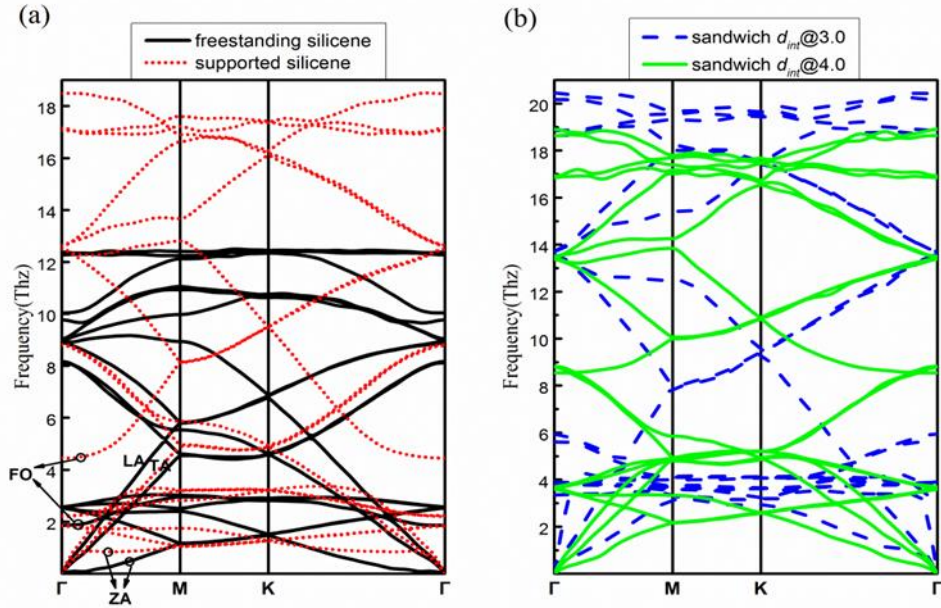


图 3-5 计算的 硅烯的声子谱 (a) freestanding 与支撑的硅烯谱线; (b) 不同层间距 d_{int} 时硅烯与 h-BN 构成三明治结构的声子谱。其中 (a) 中标注的 ZA, TA, LA 及 FO 分别代表垂直, 横向, 纵向的声学支和第一条光学支。(b) 中 $d_{int}@4.0$ 及 $d_{int}@3.0$ 分别表示硅烯与 h-BN 的层间距为 4.0 和 3.0 Å

图 3-5(a)是计算出来的 freestanding 和放置在固定单层 h-BN 上硅烯的声子谱, 如图所示, 尽管因为此处硅烯的单胞变大而带来了谱线折叠效应, 但硅烯的三声子的谱线与已有研究文献相似^[64, 76]。另一方面, 不同的是光学支, 我们计算出的声子频率比已有文献小, 这主要归因于我们采用了不同 Tersoff 势形式及参数来描述 Si-Si 相互作用。支撑与 freestanding 的硅烯声子谱存在的差异主要是界面效应使得高能区 (>6 THz) 的光学声子模上移, 同时在低能区 (大约 3 THz) 下移, 除了第一光学支 FO 在 Γ 点从 1.9 THz 上移到 4.5 THz.. 对于声学支而言, Γ 点处明显的谱线线性化和增加的是 ZA 模, 而横向声学支 TA 和纵向声学支 LA 只有微小变化。从 Bose-Einstein 分布和三声子 U 过程, 在我们模拟的 300K 温度下, 热输运主要是由低频声子 (<6 THz) 引起。上移的光学支模式具有类似于降低温度的效果, 在特定

的温度下声子是 Bose-Einstein 分布，致使更少的声子激发。因此，声子的散射率减少导致 BTT 加强，另一方面线性化和增加的声学支速度能够减少声子散射率使得 BTT 增强^[77]。因此，增大的 β 来源于界面引起 ZA 模和上移的 FO 模的共同作用。

为了能够理解强相互作用显著增加硅烯的 BTT 效应，分别计算了 $d_{\text{int}} = 4 \text{ \AA}$ 和 $d_{\text{int}} = 3 \text{ \AA}$ 时的声子谱，如图 3-5(b)所示，随着层间距减小，所有三声子的速度明显变大，而增大声学支的速度能够减小声子散射率，促使了 BTT 增强，即其 β 变大。值得注意的是，在我们的模拟结果中 $d_{\text{int}} = 3 \text{ \AA}$ 反而比 $d_{\text{int}} = 4 \text{ \AA}$ 的热导小，这归因于在 4THz 附近处出现的局域声子模，它有效地减小了声子通道。

3.4 小结

我们采用外加温度梯度的 NEMD 方法模拟计算，在室温时，考察两种典型方向 armchair 与 zigzag 型的硅烯在光滑的 h-BN 衬底及其三明治结构下热导随长度变化情况。发现两种方向下的热导与长度都满足 $\kappa \propto L^\beta$ ，由于界面耦合作用使得 β 从 0.3 增加到 0.4 作用，这展现出加强的弹道热输运性质。同时我们也发现通过减小层间距而增加三明治结构的耦合作用在硅烯的强度使得 β 进一步变大。同时所有结果不依赖硅烯的手型。表明通过光滑界面耦合能增加硅烯的弹道热输运性。基于计算的声子谱，我们发现对于放置在 h-BN 上的硅烯，变大的 β 主要是因为线性化与增大 ZA 模和上移光学模的共同作用。至于硅烯和 h-BN 形成的三明治结构，其加强的弹道热输运归因于层相互作用加强而致使所有的声学支速度增大。我们的结果提供了一种有效加强纳米材料弹道输运的新途径。

第4章 多层硅热输运性质的研究

4.1 研究背景

随着现有硅基电路工业的发展,其集成化、微型化的要求促使大量的科研工作关注于满足特定应用的新型的二维材料。最近十多年的理论与实验表明,一些新型的二维材料相比于常规材料,由于其结构及尺寸的量化带来许多新奇、优异的物理性能。例如,单原子层 MoS_2 具有合适的禁带宽度,其场效应晶体管可以实现 10^8 的开关比^[78];几个原子层厚度的黑磷 (BP) 具有极高的电子/空穴迁移率 ($1000 \text{ cm}^2/\text{Vs}$) 和漏电流调制率 (石墨烯的 10^4 倍),其场效应晶体管在纳米电子器件应用方面潜力巨大^[79];石墨烯超高的热导率和电子迁移率则使其在纳米电路方面极具应用前景^[80, 81]。然而,实际应用中制备的材料往往到达几个纳米的多层结构,已有研究主要侧重于层间作用是弱的范德瓦尔斯作用(vdW),且不存在表面重构现象。这类典型的层状结构及其异质结已有大量的研究其电子及热输运性质,如石墨烯^[82-84]、 MoS_2 ^[85]、黑磷^[86-88]等二维层状结构。对于层间存在强相互作用的材料,由于现有制备技术如机械剥离、分子束外延生长等难以很好地制备出纳米层状结构,使得人们对于这种强层间作用型的超薄纳米材料的研究一直十分匮乏。最近人们发现利用分子束外延技术可在一些金属衬底生长出单层原子层和多原子层硅材料^[20, 21, 89-91]。这些实验进展点燃了人们对层间强作用型二维纳米材料的热潮。与 vdW 作用不同,以多层硅为代表的强层间作用型二维纳米材料表现出有别于块体表面的奇特表面重构^[20, 21, 91, 92],并且其物理、化学性质也非常独特^[93, 94],预示着这类超薄纳米材料中存在新的物理。

硅纳米体系是目前唯一的一个从单层到多层,再到块体结构都被实验制备出来的体系;并且其在零维、一维、三维尺度都有丰富、典型的结构,这些为二维尺度多层硅的研究奠定了非常好的基础。开展多层硅的研究也有助于人们系统认识物质从低维到高维尺度的物性演化,对纳米科学的纵向发展极有好处。此外,硅纳米材料的生产制备工艺成熟、原材料丰富,其在未来微纳电子、能源、信息等重要领域中有极为广阔的应用前景。

目前,基于硅纳米体系结构的热输运性质的研究主要有硅纳米线^[95-98],硅烯^[61],

99-102], 衬底支撑的硅烯^[63, 64], 硅薄膜及其块体结构^[103-107]。不同于块体硅, 多层硅结构由于厚度方向的量子尺寸效应以及表面重构效应, 我们预期其热导比块体更低, 更适合应用于热电领域。然而, 当前对于多层硅热输运的性质的研究报道还是十分罕见, 为此, 我们基于 Guo 从第一性原理计算探索的多层硅结构^[108], 系统研究了 2~10 层硅结构的平面内的热输运性质。

4.2 计算方法与模型

我们基于大型并行高效的 LAMMPS 分子动力学软件包, 采用非平衡态外加温度梯度法来研究多层硅结构热导率。由于硅结构的模型丰富, 其相变重构一直倍受研究, 为了能够很好地采用 MD 模拟出这些相变结构, 选取了最新能够重构出硅材料的弹性常数与熔点及相变的 Mod 势^[37]。首先, 我们采用共轭梯度法对这些结构进行静态优化, 所有结构见图 4-1。为了方便, 我们定义了这些结构的名称 “nlxs”, n 是纯数字, 表示结构层数。l 是代表层 (layer), x 区分不同结构 (具体 1, 2, 3,...), s 表示沿长度方向的类型其取值为 a (armchair) 或 z (zigzag) 在后文图中涉及到。表 4.1 中列出了多层硅的结构名称、最小重复单胞周期性、其对空间群、分子动力学计算的结合能、第一性结合能以及结构特性等, Mod 势是修改键角依赖项拟合多类型硅结构的熔点和弹性常数, 它参照了第一性的局域密度近似 (LDA) 与广义梯度近似 (GGA) 预测的弹性属性。然而, 这些第一性方法往往容易高估材料的结合能和低估其平衡晶格常数。为此, Mod 势在构造时特意参照 diamond 结构的硅的实验值对其平衡键长修正, 导致结合能比第一性原理方法预测的小。

表 4.1 结构对称性, 结合能 $E_c(\text{eV/Si})$, 结构特性

名称	最小周期性	对称性	Guo 中 E_c	MD 中 E_c	结构 buckling 特性
2l1	1×1	Cmme	5.000	4.145	表面平整
2l2	$\sqrt{2} \times \sqrt{2}$	C12/m1	4.991	4.204	表面高 buckling 对称
2l3	2×2	C12/m1	5.063	4.257	表面高 buckling 斜对称
2lh	2×2	P1	5.073	4.216	上表面高 buckling
2lr3	$\sqrt{3} \times \sqrt{3}$	P1	-	4.225	上下微 buckling 对称
3l1	2×1	P121/m1	5.138	4.337	-
3l2	2×1	P1	5.135	4.298	-
4l1	2×1	P1	5.225	4.368	-

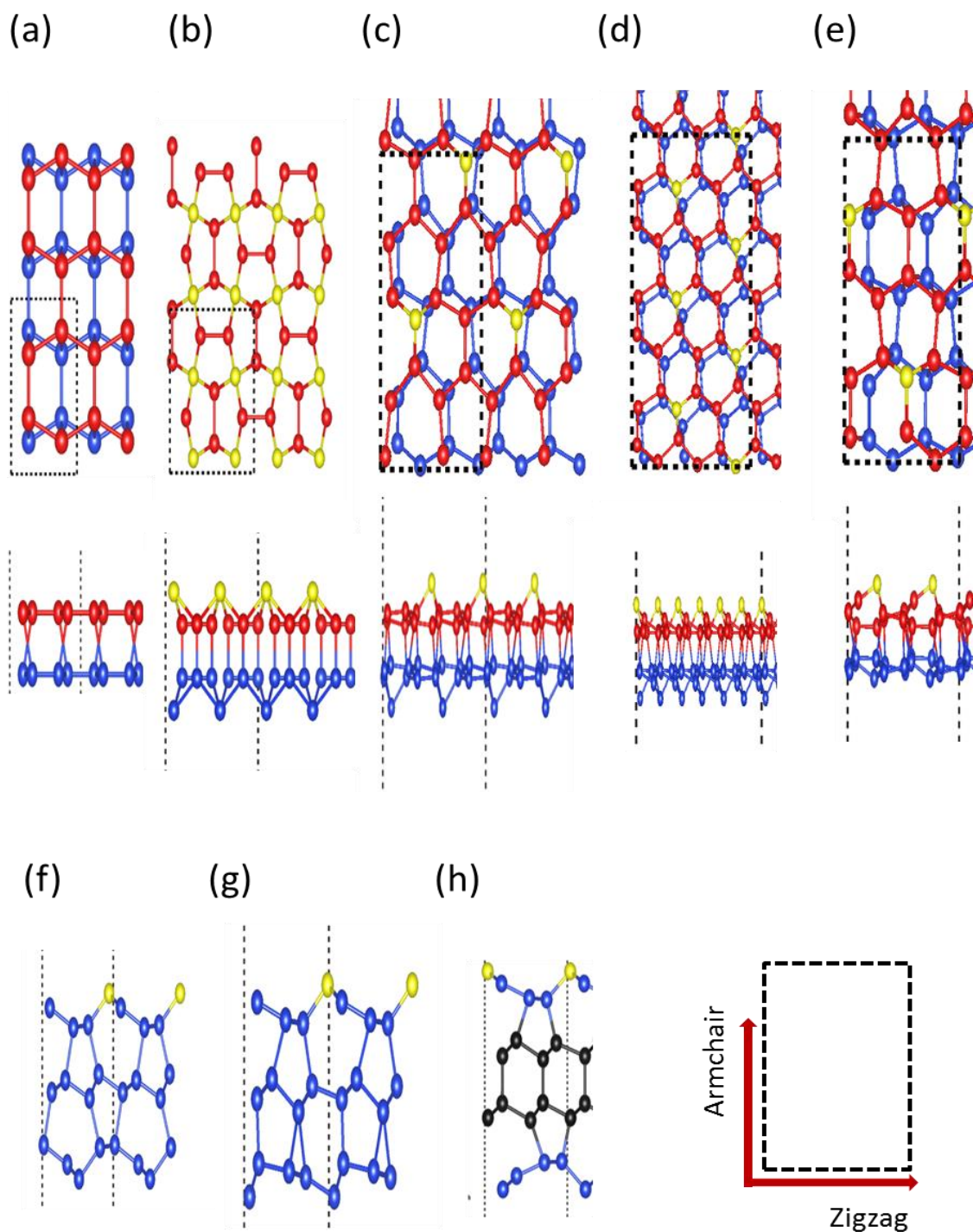


图 4-1 几种典型的多层硅结构示意图，其中 (a) ~ (e) 为二层结构，包含俯视图和侧视图；(a)211 (b)212 (c)213 (d)21r3 (e)21h. 3-10 层结构具有 2×1 周期性，只展示侧视图 (f) 311 (g) 312 为三层结构，(h) 为 4 层结构 411。上表面突出的 buckling 标记为黄色，上表非突结构出为红色，而下表面为蓝色，四层及以上重复部分以黑色标记。右下角为俯视图的方向示意图，黑色框为单胞结构，箭头方向分别是 Zigzag 与 Armchair 方向。

从表 4.1 考察 Guo 所采用第一性原理计算的结合能与 MD 计算的相比较，同时从堆垛角度来看，双层硅烯更倾向于形成单层中小 buckling 滑移堆垛结构。体系模

拟过程中 timestep 是 1fs, 采用 velocity verlet 积分算法, 研究体系在 X 方法上的长度范围为 10~100nm, 宽度 Y 方向是周期性边界条件 (其模拟宽度 5 nm), Z 方向为自由边界条件, 同时在长度 X 方向上最外层固定墙, 紧邻固定层的 3nm 施加 Nose-Hoover 热浴在多层硅上, 其左右两端分别控温在 310 和 290K。模拟先进行 0.4 ns NVT 动态弛豫结构达到平衡, 再进行控温建立温度梯度达到 10 ns, 最终统计 10 ns 的物理数据。由 Fourier 定律, 热导率与热流的关系为 $\kappa = -J_x / (\nabla T \cdot S)$, 式中 κ 为热导率, J_x 为沿着长度 X 方多层硅的统计的平均热流, $\nabla T = (T_L - T_R) / L_x$ 是沿着长度方向的温度梯度, T_L, T_R, L_x 对应左右两端的温度和介于热浴间多层硅的长度。横截面积 $S = W \cdot nd$, W, n, d 对应多层硅的宽度和层数及每层厚度。根据已有研究, 我们选取 Si (111) 面层间距 3.14 Å 作为每层的厚度。

4.3 多层硅热导率随层数的各向异性与尺寸效应

我们首先考察表面重构对热导的影响, 具体是选取了 5 种二层硅结构研究其 armchair 与 zigzag 方向的热输运性质。如图 4-2 所示, 不同方向下二层硅热导随长度变化关系, 由图可以看出, 211 结构热导随长度增长最为显著, 其次是 213 结构, 21r3 结构, 而最不显著的是 212 与 21h 结构。另外, 热导随长度显著增长的结构表现出的各向异性明显, 不同于单层硅及块体硅表现的更倾向于各向同性。从结构上看, 平整 211 最有利于导热, 而表面构成 5 环高度对称高 buckling ‘鸟笼’ 结构的 212 最不利于导热适合于热电材料。且其两个方向下的边缘形状交错类似, 其热输运差异较小。

多层硅长度小于其声子平均自由程时, 声子弹道输运特性明显; 而长度大于其声子平均自由程时, 声子散射输运特征明显。John A. Thomas^[109]所采用的经验公式可以有效表征纳米材料长度变化带来的声子输运从弹道到散射区域的热导变化, 同时较为准确地得到无限长时的纳米材料的热导率。利用该公式, 我们获得了无限长多层硅的热导率:

$$\kappa = \kappa_{\infty} \left[1 - e^{-L/L_c} \right] \quad (4.1)$$

其中 κ_{∞} 是拟合的全散射热导, L_c 是从弹道输运向散射输运的拟合转变长度。同时恒量沿不同方向的热导差异量 $\chi = \left| \kappa_{z,\infty} - \kappa_{a,\infty} \right| / \max \{ \kappa_{z,\infty}, \kappa_{a,\infty} \} \times 100\%$, $\kappa_{z,\infty} (\kappa_{a,\infty})$

表示 zigzag(armchair)方向的全散射热导(无限长热导率), $\max\{\kappa_{z,\infty}, \kappa_{a,\infty}\}$ 是取两个方向上的热导值中的较大值。

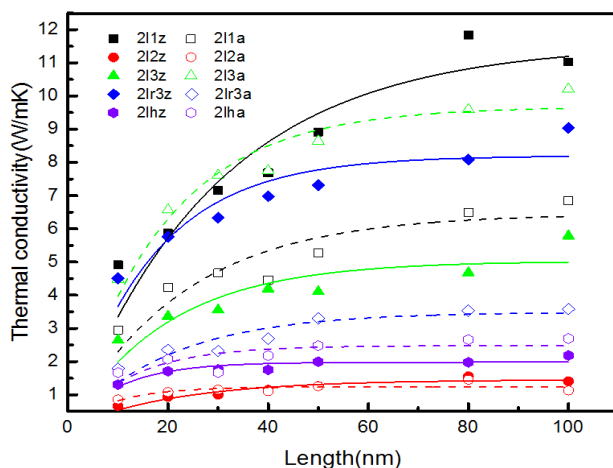


图 4-2 五种双层硅热导随长度变化关系, 线是利用公式(4.1)得到。图中结构命名 z 代表 zigzag 方向, a 表示 armchair 方向。

具体多层硅的全散射热导及各向异性差见表 4.2。从表中可以看出在双层表面重构的影响下, 2 层硅的热导高可达到 11.6 W/mK (2l1 结构), 低可至 1.2 W/mK (2l2 结构)。此外, 上下微 buckling 对称的 2l3 其各向异性量最大, 可达到 57.3%; 而最小的是 2l2 及 2lh 结构 (20%)。以上结果充分说明表面重构对多层硅热输运性质影响显著。平整光滑的表面有利于热传导, 而粗糙的表面大大抑制热传导。同时, 表面结构的各向异性导致热传导性质具有显著的各向异性。

表 4.2 不同结构的多层硅的全散射热导及各向异性值。

	$\kappa_{z,\infty}$	$\kappa_{a,\infty}$	χ		$\kappa_{z,\infty}$	$\kappa_{a,\infty}$	χ
2l1	11.6	6.5	43.9%	2l2	1.5	1.2	20.0%
2l3	5.0	9.7	48.5%	2l3	8.2	3.5	57.3%
2lh	2.0	2.5	20.0%	3l1	11.5	2.9	74.8%
3l2	10.2	5.2	49.0%	4l1	10.2	3.4	66.7%
5l1	11.7	5.7	51.3%	6l1	10.3	7.8	24.3%
8l1	13.2	14.9	11.4%	10l1	13.3	13.5	1.5%
Si111	33.6	34.7	3.2%	Silicene	11.4	11.6	1.7%

接下来考察了厚度变化对热输运性质的影响。这里我们研究主要集中在表面具有典型的 Si(111) 2×1 表面重构的 3-10 层的多层硅结构。为了对比, 我们也计算研

究了 si 在其 (111) 面的面内热导及单层硅烯的热导。其各向异性量大小在表 4.2 也有展示。

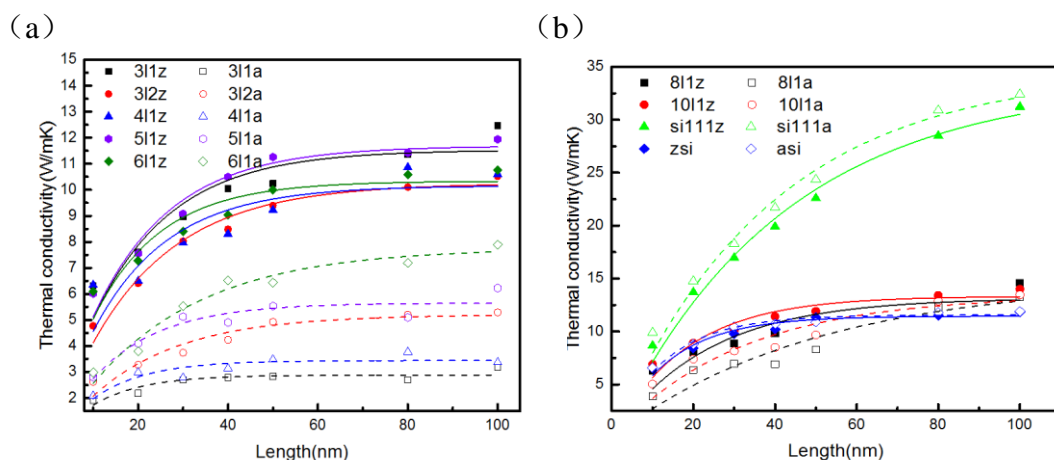


图 4-3 不同层数多层硅热导随长度的变化关系。

从图4-3 (a) 看, 在3~6层中等厚度的情况下, 多层硅的各向异性一致为zigzag型热导高于armchair型, 且随着层数增加这种各向异性逐步变小。究其原因, 主要是多层硅表面zigzag方向是由光滑的zigzag原子链构成 (如图4-1所示)。相比于块体硅结构, 沿着zigzag方向导热时, 其对热流并无明显阻碍作用。而沿着armchair方向看的话, 多层硅表面则是起伏很大, 其对热流阻碍作用明显。而这种差异主要是表面重构效应带来的, 会随着硅厚度的增加而变小。

为了进一步预测热导率随厚度的关系, 我们额外计算了表面为 2×1 重构的 8-10 层多层硅的热导。为了对比, 同时计算了无表面重构的块体 Si (111) 面的热导 (厚度为9层), 以及单层硅烯的热导。表4-2所示, 随着厚度的增加, 各向异性的差异逐步缩小, 厚度达到10层时, 多层硅热运输的各向异性几乎可以忽略 (仅为1.5%), 与块体硅和单层硅烯结果一致。另一方面, 如图4-3 (b) 所示, 同一厚度下, 在较短长度(10~50nm), 各向异性差异明显, 而长度达100nm左右时, 各向异性差异变得很小, 表现出明显的热导各向异性的长度尺寸效应。这本质上是由于多层硅结构沿不同方向上的声子模式中的长声学支 (LA)、横向声学支 (TA)、垂直平面的 out-of-plane 声学支 (ZA) 的差异。而随着长度增加, 其弹道运输逐渐饱和, 其umklapp过程引起的热运输各项差异逐渐缩小。

为了深入理解这不同结构及不同层数带来的热导随长度变化关系的差异及各向异性, 我们采用分子动力学直接测量了几种典型结构的声子谱。选取的是正交型的

$10 \times 10 \times 1$ 多层结构。选取的几个高对称点分别是 $K(0.5, 0.5, 0.0)$ 、 $\Gamma(0.0, 0.0, 0.0)$ 、 $J(0.5, 0.0, 0.0)$ 、 $J'(0.0, 0.5, 0.0)$ 。沿 $K \rightarrow \Gamma \rightarrow J \rightarrow J' \rightarrow \Gamma$ 取点，如图 4-4 所示。

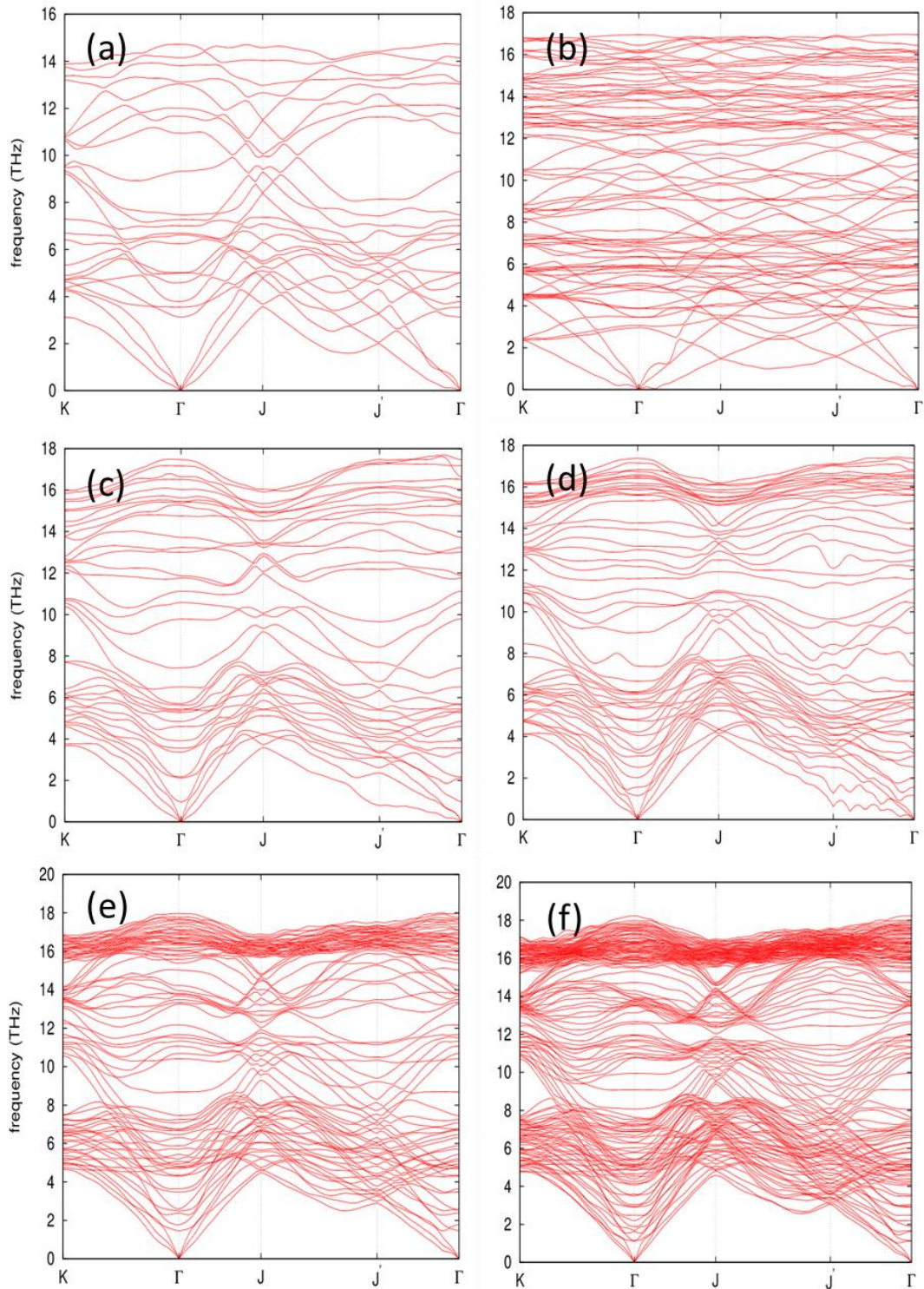


图 4-4 多层硅结构沿高对称点的声子谱线图, (a) 211 和 (b) 212 两层结构; 2×1 结构的多层硅 (c) 三层硅 (311), (d) 四层硅 (对应 411), (e) 六层硅 (611), (f) 十层硅 (1011)。

由选取的超胞结构沿 zigzag 边界对应谱线中 $\Gamma \rightarrow J$ 方向，而 armchair 边界对应

谱线 $\Gamma \rightarrow J'$ 方向。根据声子谱与热传导的关系可知，在二维纳米体系中，对热输运其主要作用的是声子谱中的声学支，共 3 条声学支，对应沿传输方向的 LA 模，沿横向的 TA，以及垂直平面的 ZA 模。图 4-4 (a)与(b)对应计算出的两层硅烯 211 与 212 谱线，211 中 $\Gamma \rightarrow J'$ 声学支群速度明显大于对应的 $\Gamma \rightarrow J'$ 方向的，使得 zigzag 方向更利于导热，这也证明了 211z 与 211a 热导的差异与各向异性。相应地 212 中两方向上三声子几乎一样，因此 212z 与 212a 是双层表面重构结构中各向异性最小。对比两图，可以明显发现 212 三声子速度都降低了，同时低频光学支有下移与声学支耦合的趋势，这不利于热传导，使得 212 热输运随长度变化小。而图中(c)(d)(e)分别是 311，411，611 的 2×1 结构的谱线，三者的 zigzag 方向三声子速度比 armchair 方向大，同时随着层数的增加，其参与的光学支逐步聚集在高频区 ($>15\text{THz}$)，几乎对热导没贡献，而低频 ($<5\text{THz}$) 区的振动模式几乎不变。另一方面，随着厚度的增加，armchair 方向的声学支速度逐渐增大，这促使了随着层数厚度的增加，多层硅的各向异性逐渐减小。相比于 6 层 (e) 的声子谱线，10 层 (f) 的差异主要是更多原子贡献的光学支分布于中高频 ($>5\text{THz}$) 区域，它对热导影响不大。

4.4 小结

通过非平衡态分子动力学模拟多层硅结构，我们发现多层硅结构其热输运性质存在显著的表面效应与厚度方向的尺寸效应。双层表面重构的影响下，2 层硅的热导高可达到 11.6 W/mK (211 结构)，低可至 1.2 W/mK (212 结构)，各向异性可高达 57.3%。平整光滑的表面有利于热传导，而粗糙的表面大大抑制热传导。超低的热导预示了 2 层硅可具有良好的热电性能。具有相同 2×1 表面结构的 3-6 层多层硅中，zigzag 方向更利于导热。随着层数的增加，其 zigzag 方向热导变化较小，而 armchair 方向热导增加显著，热导的各向异性减小。10 层以上厚度的多层硅热导各向异性变得很小，与块体 Si 及单层硅烯一致。

第5章 总结与展望

5.1 工作总结

丰富的二维硅纳米材料具有类石墨烯的一些物化性能，同时又具有自身的一些特性，如强烈的自旋耦合轨道而带来的 Dirac cone、自旋霍尔效应，量子反常霍尔效应。二维硅纳米材料的电子性质已经被广泛地从理论到实验及数值计算上得到研究，而其热输运性质由于结构演变复杂、制备条件苛刻等原因导致实验直接测量相对较少。另一方面，由于计算机的发展，使得数值模拟成为一种实用而相对低廉的研究手段。本文采用非平衡态分子动力学方法系统地研究了从单层硅烯到多层硅结构的热输运性质。

一方面，我们系统地研究了单层硅烯的热输运性质，同时研究了硅烯在弱范德瓦尔斯的光滑衬底耦合作用（典型的 h-BN）下其热输运性质得到加强。通过研究发现，在体系处于 10~80nm 之间，硅烯及在 h-BN 衬底作用下其热导 κ 与体系长度 L 满足 $\kappa \propto L^\beta$ ，由于界面的耦合作用使得 β 从 0.3 增加到 0.4 作用，这展现出硅烯较强的弹道热输运性质。同时我们也发现通过减小层间距而增加三明治结构中耦合作用于硅烯的强度使得 β 进一步变大。同时所有的结果不依赖于硅烯的手型。表明通过光滑界面耦合能增加硅烯的弹道热输运性。基于计算的声子谱，我们发现增大的 β 对于放置在 h-BN 上的硅烯主要是因为线性化和增加速度的 ZA 模以及上移的光学模共同作用。至于硅烯与 h-BN 形成的三明治结构，其加强的弹道热输运归因于层相互作用加强而致使所有的声学支速度增大。我们的结果为纳米材料热输运提供一条有效加强纳米材料弹道输运的新途径。

另一方面，我们研究了层间具有强相互作用的多层硅结构的热输运性质。发现双层硅结构因堆垛的方式差异使得双层硅的热导呈现各向异性和高热导与低热导的双向性。而厚度在三层到六层之间，随着层数的增加而其热导差异小，同时各向异性逐步减小。我们把多层硅结构随长度、层数的演变归于两方面：表面重构效应与厚度方向的量子尺寸效应。通过系统地研究多层硅的热导和声子谱，我们发现多层硅结构热输运存在各向异性，一般情形下 zigzag 方向有利于声子传输，而 armchair

方向不利于声子传输。这由于表面重构导致两个方向的声学支差异带来的。这对我们选取和理解多层硅的热输运机制有很大的帮助。

5.2 工作展望

尽管，我们已经对单层及多层硅结构的热输运性质进行系统地研究，但是由于实际制备硅纳米材料中不可避免地存在缺陷如空位、位错、晶界等，另一方面在应用电子电路中常常涉及到掺杂、高低温，接触面等外在因素。为此我们对二维硅纳米材料可以着重从以下几方面进行深入研究：

1. 发展二维声子输运模型，揭示表面效应与厚度尺寸效应对二维纳米材料热输运影响的内在机制及普适性规律。
2. 另外，硅基纳米材料一直被认为是低热导、具有潜在的热电领域应用前景。而热电材料中关注的不仅仅是热输运还需要系统地研究其电输运，通过外在条件调控热属性的同时，是否存在对电输运的变化还是研究的方向之一。
3. 二维硅纳米材料对于其它外在因素，如缺陷的影响、同位素效应、应力应变、不同温度等等其热输运的性质究竟又会有什么规律，这也是需要进一步解决的问题。

参考文献

- [1] 张立德, 牟季美. 纳米材料和纳米结构[M]. 北京: 科学出版社, 2001
- [2] http://www.nobelprize.org/nobel_prizes/physics/laureates/2010/
- [3] K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov, et al. Electric field effect in atomically thin carbon films [J]. Science, 2004, 306 (5696):666-669.
- [4] 方云, 杨澄宇等 纳米技术与纳米材料[A] 日用化学工业, 2003, 33: 55-58.
- [5] R.W. Cahn, Silicon: Child and Progenitor of Revolution., Into The Nano Era, Springer Series in Materials Science, 2009 106 p3.
- [6] <http://www.chemicool.com/elements/silicon.html>
- [7] P. M linon, X. Blase, A. S. Miguel, et al. Nonsilicon-chapter two - cluster assembled silicon networks [M]Amsterdam: Elsevier. 2008: 79-113.
- [8] E. Kaxiras. Effect of surface reconstruction on stability and reactivity of Si clusters [J]. Physical Review Letters, 1990, 64 (5):551.
- [9] J. R. Chelikowsky. Transition from Metallic to Covalent Structures in Silicon Clusters [J]. Physical Review Letters, 1988, 60 (25):2669-2672.
- [10] E. C. Honea, A. Ogura, D. R. Peale, et al. Structures and coalescence behavior of size-selected silicon nanoclusters studied by surface-plasmon-polariton enhanced Raman spectroscopy [J]. The Journal of Chemical Physics, 1999, 110 (24):12161-12172.
- [11] C. Xu, T. R. Taylor, G. R. Burton, et al. Vibrationally resolved photoelectron spectroscopy of silicon cluster anions $\text{Si}_n^-(n=3-7)$ [J]. The Journal of Chemical Physics, 1998, 108 (4):1395-1406.
- [12] J. C. Grossman, L. Mitáš. Quantum Monte Carlo Determination of Electronic and Structural Properties of Si_n Clusters ($n \leq 20$) [J]. Physical Review Letters, 1995, 74 (8):1323.
- [13] A. K. Singh, V. Kumar, Y. Kawazoe. chapter six - theoretical advances in the electronic and atomic structures of silicon nanotubes and nanowires [M] Amsterdam: Elsevier. 2008: 217-257.
- [14] X. Yang, J. Ni. Electronic properties of single-walled silicon nanotubes compared to carbon nanotubes [J]. Physical Review B, 2005, 72 (19):195426.
- [15] 陈岚, 吴克辉. 硅烯: 一种新型的二维狄拉克电子材料 [J]. 物理, 2013, 42 (09):604-612.
- [16] K. Takeda, K. Shiraishi. Theoretical possibility of stage corrugation in Si and Ge analogs of graphite [J]. Physical Review B, 1994, 50 (20):14916.
- [17] B. Lalmi, H. Oughaddou, H. Enriquez, et al. Epitaxial growth of a silicene sheet [J]. Applied Physics Letters, 2010, 97 (22)

- [18] B. Aufray, A. Kara, S. Vizzini, et al. Graphene-like silicon nanoribbons on Ag(110): A possible formation of silicene [J]. *Applied Physics Letters*, 2010, 96 (18):183102.
- [19] P. De Padova, C. Quaresima, C. Ottaviani, et al. Evidence of graphene-like electronic signature in silicene nanoribbons [J]. *Applied Physics Letters*, 2010, 96 (26)
- [20] A. Fleurence, R. Friedlein, T. Ozaki, et al. Experimental Evidence for Epitaxial Silicene on Diboride Thin Films [J]. *Physical Review Letters*, 2012, 108 (24):245501.
- [21] L. Meng, Y. Wang, L. Zhang, et al. Buckled Silicene Formation on Ir(111) [J]. *Nano Letters*, 2013, 13 (2):685-690.
- [22] H. Liu, J. Gao, J. Zhao. Silicene on Substrates: A Way To Preserve or Tune Its Electronic Properties [J]. *The Journal of Physical Chemistry C*, 2013, 117 (20):10353-10359.
- [23] L. Tao, E. Cinquanta, D. Chiappe, et al. Silicene field-effect transistors operating at room temperature [J]. *Nature Nanotechnology*, 2015, 10 (3):227.
- [24] S. J. Plimpton, A. P. Thompson. Computational aspects of many-body potentials [J]. *MRS Bulletin*, 2012, 37 (05):513-521.
- [25] <http://lammps.sandia.gov/>
- [26] Andersen H C. Molecular dynamics simulations at constant pressure and/or temperature[J]. *The Journal of chemical physics*, 1980, 72(4): 2384-2393.
- [27] Parrinello M, Rahman A. Polymorphic transitions in single crystals: A new molecular dynamics method[J]. *Journal of Applied physics*, 1981, 52(12): 7182-7190.
- [28] Nosé S. A unified formulation of the constant temperature molecular dynamics methods[J]. *The Journal of Chemical Physics*, 1984, 81(1): 511-519.
- [29] W. G. Hoover. Canonical dynamics: equilibrium phase-space distributions [J]. *Physical Review A*, 1985, 31 (3):1695.
- [30] 陈强, 曹红红, 黄海波. 分子动力学中势函数研究[J] *天津理工学院学报*, 2004 20(2):101-105
- [31] J. E. Lennard-Jones. Cohesion. *Proceedings of the Physical Society*, 43:461-482, 1931.
- [32] J. Tersoff. New empirical model for the structural properties of silicon [J]. *Physical Review Letters*, 1986, 56 (6):632-635.
- [33] J. Tersoff. Empirical Interatomic Potential for Carbon, with Applications to Amorphous Carbon [J]. *Physical Review Letters*, 1988, 61 (25):2879-2882.
- [34] J. Tersoff. New empirical approach for the structure and energy of covalent systems [J]. *Physical Review B*, 1988, 37 (12):6991-7000.
- [35] J. Tersoff. Carbon defects and defect reactions in silicon [J]. *Physical Review Letters*, 1990, 64 (15):1757-1760.
- [36] T. Ouyang, Y. Chen, Y. Xie, et al. Thermal transport in hexagonal boron nitride nanoribbons [J]. *Nanotechnology*, 2010, 21 (24):245701.
- [37] T. Kumagai, S. Izumi, S. Hara, et al. Development of bond-order potentials that can

- reproduce the elastic constants and melting point of silicon for classical molecular dynamics simulation [J]. *Computational Materials Science*, 2007, 39 (2):457-464.
- [38] Allen M P, Tildesley D J. *Computer simulation of liquids*[M]. Oxford university press, 1989.
- [39] F. Müller-Plathe. A simple nonequilibrium molecular dynamics method for calculating the thermal conductivity [J]. *The Journal of Chemical Physics*, 1997, 106 (14):6082-6085.
- [40] P. K. Schelling, S. R. Phillpot, P. Keblinski. Comparison of atomic-level simulation methods for computing thermal conductivity [J]. *Physical Review B*, 2002, 65 (14):144306.
- [41] J. Chen, G. Zhang, B. Li. How to improve the accuracy of equilibrium molecular dynamics for computation of thermal conductivity? [J]. *Physics Letters A*, 2010, 374 (23):2392-2396.
- [42] G. P. Morriss, D. J. Evans. *Statistical Mechanics of Nonequilibrium Liquids* [M]: ANU Press. 2007.
- [43] D. Frenkel, B. Smit. *Understanding molecular simulation: from algorithms to applications* [M]: Academic press. 2001.
- [44] T. Ikeshoji, B. Hafskjold. Non-equilibrium molecular dynamics calculation of heat conduction in liquid and through liquid-gas interface [J]. *Molecular Physics*, 1994, 81 (2):251-261.
- [45] M. Born, K. Huang, *Dynamical Theory of Crystal Lattices*, Oxford University Press, Oxford, 1956.
- [46] M.T. Dove, *Introduction to Lattice Dynamics*, Cambridge University Press, 1993.
- [47] B. Fultz. Vibrational thermodynamics of materials [J]. *Progress in Materials Science*, 2010, 55 (4):247-352.
- [48] S. Baroni, S. de Gironcoli, A. Dal Corso, et al. Phonons and related crystal properties from density-functional perturbation theory [J]. *Reviews of Modern Physics*, 2001, 73 (2):515-562.
- [49] L. T. Kong. Phonon dispersion measured directly from molecular dynamics simulations [J]. *Computer Physics Communications*, 2011, 182 (10):2201.
- [50] L. T. Kong, G. Bartels, C. Campa, et al. Implementation of Green's function molecular dynamics: An extension to LAMMPS [J]. *Computer Physics Communications*, 2009, 180 (6):1004-1010.
- [51] C. Lian, J. Ni. The effects of thermal and electric fields on the electronic structures of silicene [J]. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 2015
- [52] G. Le Lay. 2D materials: Silicene transistors [J]. *Nat Nano*, 2015, 10 (3):202-203.
- [53] L. Pan, H. J. Liu, X. J. Tan, et al. Thermoelectric properties of armchair and zigzag silicene nanoribbons [J]. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 2012, 14 (39):13588-13593.
- [54] E. Scalise, M. Houssa, G. Pourtois, et al. Vibrational properties of silicene and

- p>germanene [J]. Nano Research, 2012, 6 (1):19-28.
- [55] C.-C. Liu, W. Feng,Y. Yao. Quantum Spin Hall Effect in Silicene and Two-Dimensional Germanium [J]. Physical Review Letters, 2011, 107 (7):076802.
- [56] S. Lebegue,O. Eriksson. Electronic structure of two-dimensional crystals from ab initio theory [J]. Physical Review B, 2009, 79 (11)
- [57] H. Oughaddou, H. Enriquez, M. R. Tchalala, et al. Silicene, a promising new 2D material [J]. Progress in Surface Science, 2015, 90 (1):46-83.
- [58] A. Kara, H. Enriquez, A. P. Seitsonen, et al. A review on silicene — New candidate for electronics [J]. Surface Science Reports, 2012, 67 (1):1-18.
- [59] Y. Guo, S. Zhou, Y. Bai, et al. Tunable Thermal Conductivity of Silicene by Germanium Doping [J]. Journal of Superconductivity and Novel Magnetism, 2015:1-4.
- [60] H. Sadeghi, S. Sangtarash,C. J. Lambert. Enhanced Thermoelectric Efficiency of Porous Silicene Nanoribbons [J]. Scientific Reports, 2015, 5:09514.
- [61] B. Liu, C. D. Reddy, J. Jiang, et al. Thermal conductivity of silicene nanosheets and the effect of isotopic doping [J]. Journal of Physics D-Applied Physics, 2014, 47 (16)
- [62] H. Ming, Z. Xiaoliang,D. Poulikakos. Anomalous thermal response of silicene to uniaxial stretching [J]. Physical Review B, 2013, 87 (19):195417.
- [63] X. Zhang, H. Bao,M. Hu. Bilateral substrate effect on the thermal conductivity of two-dimensional silicon [J]. Nanoscale, 2015, 7 (14):6014-6022.
- [64] Z. Wang, T. Feng,X. Ruan. Thermal conductivity and spectral phonon properties of freestanding and supported silicene [J]. Journal of Applied Physics, 2015, 117 (8):084317.
- [65] Z.-X. Guo, D. Zhang,X.-G. Gong. Manipulating thermal conductivity through substrate coupling [J]. Physical Review B, 2011, 84 (7):075470.
- [66] A. K. G. I. V. Geim. Van der Waals heterostructures [J]. Nature, 2013, 499 (7459):7.
- [67] H. Wu, Y. Qian, S. Lu, et al. Two-dimensional silicon monolayers generated on c-BN(111) substrate [J]. Phys. Chem. Chem. Phys., 2015
- [68] C. Sevik, A. Kinaci, J. B. Haskins, et al. Characterization of thermal transport in low-dimensional boron nitride nanostructures [J]. Physical Review B, 2011, 84 (8):085409.
- [69] S. L. Mayo, B. D. Olafson,W. A. Goddard. DREIDING: a generic force field for molecular simulations [J]. The Journal of Physical Chemistry, 1990, 94 (26):8897-8909.
- [70] S. Lepri, R. Livi,A. Politi. Thermal conduction in classical low-dimensional lattices [J]. Physics Reports, 2003, 377 (1):1-80.
- [71] B. Hu, B. Li,H. Zhao. Heat conduction in one-dimensional nonintegrable systems [J]. Physical Review E, 2000, 61 (4):3828-3831.
- [72] G. Wu,J. Dong. Anomalous heat conduction in a carbon nanowire: Molecular

- dynamics calculations [J]. *Physical Review B*, 2005, 71 (11):115410.
- [73] G. Zhang, B. Li. Thermal conductivity of nanotubes revisited: Effects of chirality, isotope impurity, tube length, and temperature [J]. *The Journal of Chemical Physics*, 2005, 123 (11):114714.
- [74] Z.-X. Guo, D. Zhang, X.-G. Gong. Thermal conductivity of graphene nanoribbons [J]. *Applied Physics Letters*, 2009, 95 (16):163103.
- [75] Z.-X. Guo, X.-G. Gong. Molecular dynamics studies on the thermal conductivity of single-walled carbon nanotubes [J]. *Frontiers of Physics in China*, 2009, 4 (3):389-392.
- [76] C. Yang, Z. Yu, P. Lu, et al. Phonon instability and ideal strength of silicene under tension [J]. *Computational Materials Science*, 2014, 95:420-428.
- [77] R. Prasher. Thermal Transport Due to Phonons in Random Nano-particulate Media in the Multiple and Dependent (Correlated) Elastic Scattering Regime [J]. *Journal of Heat Transfer*, 2006, 128 (7):627.
- [78] Radisavljevic B, Radenovic A, Brivio J, et al. Single-layer MoS₂ transistors [J]. *Nat Nano*, 2011, 6 (3):147-150.
- [79] L. Li, Y. Yu, G. J. Ye, et al. Black phosphorus field-effect transistors [J]. *Nat Nano*, 2014, 9 (5):372-377.
- [80] J.-H. Chen, C. Jang, S. Xiao, et al. Intrinsic and extrinsic performance limits of graphene devices on SiO₂ [J]. *Nat Nanotechnol*, 2008, 3 (4):206-209.
- [81] A. A. Balandin, S. Ghosh, W. Bao, et al. Superior Thermal Conductivity of Single-Layer Graphene [J]. *Nano Letters*, 2008, 8 (3):902-907.
- [82] Z. Wang, R. Xie, C. T. Bui, et al. Thermal transport in suspended and supported few-layer graphene [J]. *Nano Letters*, 2011, 11 (1):113.
- [83] L. Lindsay, D. A. Broido, N. Mingo. Flexural phonons and thermal transport in multilayer graphene and graphite [J]. *Physical Review B*, 2011, 83 (23):235428.
- [84] Y. Ni, Y. Chalopin, S. Volz. Calculation of inter-plane thermal resistance of few-layer graphene from equilibrium molecular dynamics simulations [J]. *Journal of Physics: Conference Series*, 2012, 395 (1):012106.
- [85] B. Liu, F. Meng, C. D. Reddy, et al. Thermal transport in a graphene-MoS₂ bilayer heterostructure: a molecular dynamics study [J]. *RSC Advances*, 2015, 5 (37):29193-29200.
- [86] Y.-Y. Zhang, Q.-X. Pei, J.-W. Jiang, et al. Thermal conductivities of single- and multi-layer phosphorene: a molecular dynamics study [J]. *Nanoscale*, 2016
- [87] A. Jain, A. J. H. McGaughey. Strongly anisotropic in-plane thermal transport in single-layer black phosphorene [J]. *Scientific Reports*, 2015, 5:8501.
- [88] X.-F. Peng, K.-Q. Chen. Comparison on thermal transport properties of graphene and phosphorene nanoribbons [J]. *Scientific Reports*, 2015, 5:16215.
- [89] P. Vogt, P. De Padova, C. Quaresima, et al. Silicene: Compelling Experimental Evidence for Graphenelike Two-Dimensional Silicon [J]. *Physical Review Letters*,

- 2012, 108 (15):155501.
- [90] P. De Padova, P. Vogt, A. Resta, et al. Evidence of Dirac fermions in multilayer silicene [J]. *Applied Physics Letters*, 2013, 102 (16):163106.
- [91] B. Feng, Z. Ding, S. Meng, et al. Evidence of Silicene in Honeycomb Structures of Silicon on Ag(111) [J]. *Nano Letters*, 2012, 12 (7):3507-3511.
- [92] Z.-X. Guo, S. Furuya, J.-i. Iwata, et al. Absence and presence of Dirac electrons in silicene on substrates [J]. *Physical Review B* 2013, 87 (23):235435.
- [93] Z.-X. Guo, A. Oshiyama. Crossover between silicene and ultra-thin Si atomic layers on Ag(111) surfaces [J]. *New Journal of Physics*, 2015, 17 (4):045028.
- [94] J. Qiu, H. Fu, Y. Xu, et al. Ordered and reversible hydrogenation of silicene [J]. *Physical Review Letters*, 2015, 114 (12):126101.
- [95] A. I. Boukai, Y. Bunimovich, J. Tahir-Kheli, et al. Silicon nanowires as efficient thermoelectric materials [J]. *Nature*, 2008, 451 (7175):168-171.
- [96] A. I. Hochbaum, R. Chen, R. D. Delgado, et al. Enhanced thermoelectric performance of rough silicon nanowires [J]. *Nature*, 2008, 451 (7175):163-U5.
- [97] L. Shi, D. Yao, G. Zhang, et al. Size dependent thermoelectric properties of silicon nanowires [J]. *Applied Physics Letters*, 2009, 95 (6):063102.
- [98] Y. Xueming, C. T. Albert, T. Rong. Anomalous heat conduction behavior in thin finite-size silicon nanowires [J]. *Nanotechnology*, 2010, 21 (15):155704.
- [99] X. Zhang, H. Xie, M. Hu, et al. Thermal conductivity of silicene calculated using an optimized Stillinger-Weber potential [J]. *Physical Review B*, 2014, 89 (5):054310.
- [100] H. Xie, M. Hu, H. Bao. Thermal conductivity of silicene from first-principles [J]. *Applied Physics Letters*, 2014, 104 (13):131906.
- [101] N. Teng Yong, Y. Jingjie, L. Zishun. Molecular dynamics simulation of the thermal conductivity of shorts strips of graphene and silicene: a comparative study [J]. *International Journal of Mechanics and Materials in Design*, 2013, 9 (2):105-14.
- [102] P. Qing-Xiang, Z. Yong-Wei, S. Zhen-Dong, et al. Tuning the thermal conductivity of silicene with tensile strain and isotopic doping: A molecular dynamics study [J]. *Journal of Applied Physics*, 2013, 114 (3):033526.
- [103] A. Bodapati, P. K. Schelling, S. R. Phillpot, et al. Vibrations and thermal transport in nanocrystalline silicon [J]. *Physical Review B*, 2006, 74 (24):245207.
- [104] Z. Wang, Z. Li. Lattice dynamics analysis of thermal conductivity in silicon nanoscale film [J]. *Applied Thermal Engineering*, 2006, 26 (17-18):2063-2066.
- [105] W. Liu, M. Asheghi. Thermal Conductivity Measurements of Ultra-Thin Single Crystal Silicon Layers [J]. *Journal of Heat Transfer*, 2006, 128 (1):75.
- [106] C. Jeong, S. Datta, M. Lundstrom. Thermal conductivity of bulk and thin-film silicon: A Landauer approach [J]. *Journal of Applied Physics*, 2012, 111 (9):093708.
- [107] G. H. Tang, C. Bi, B. Fu. Thermal conduction in nano-porous silicon thin film [J]. *Journal of Applied Physics*, 2013, 114 (18):184302.

- [108] Z.-X. Guo, Y.-Y. Zhang, H. Xiang, et al. Structural evolution and optoelectronic applications of multilayer silicene [J]. Physical Review B, 2015, 92 (20)
- [109] J. A. Thomas, R. M. Iutzi, A. J. H. McGaughey. Thermal conductivity and phonon transport in empty and water-filled carbon nanotubes [J]. Physical Review B, 2010, 81 (4)

致谢

时光匆匆，研究生生涯在此要画上一个句号了。虽有留恋这种研究生涯的美好，但却不得不走向下一个路口。在三年的硕士生活中，伴随着太多的感激、恩情、友情及家的温暖。首先，感谢硕士阶段郭志新教授对我的栽培与关爱。郭老师为人务实，作风优良，在学术上具有扎实的功底，严谨地科学探索精神，敏锐的科研洞察力，使我在学习研究方面受益匪浅；生活中郭老师平易近人，昂然自得的为人处事风格镌刻在我的脑海中。在与郭老师这三年相处共事中，对我的谆谆教导和鼓励，使我在多次感到迷茫和困惑时找到了前进的方向，奋勇地走到现在。能够顺利地完成了硕士论文，这得益于郭老师的蓝图规划和悉心指导。在此，谨对郭老师的关怀与求真治学表示真诚地感谢。同时也祝福郭老师在学术上登峰造极，生活中阖家欢乐、健康平安。

另外，我要感谢曹觉先教授的悉心关照和帮助，曹老师严谨的治学之道使我深受启迪。同时十分感谢我的本科老师张卫兵教授几年来的关心和引荐之情。正是张老师的引荐才使我走上了计算物理这条道路，同时搭建了我与现任导师郭老师的师生情桥梁。除此之外，感谢丁建文教授的关系、孟利军老师及赵为老师对学习方法上的探讨让我受益良多。感谢 13 级物理全体同学，尤其是王咏春同学在科研技术上的帮助。

同样感谢物理二教 408 课题组的兄弟姐妹们，特别是已毕业的张云博士、曹国花、刘超、许望平、刘文戈以及同期毕业的卢金炼博士、江小蔚、李平、张惟栋和在研朱国俊等人在科研上、生活中的帮助与关心。

最后衷心地感谢我父母的支持和理解，女友杜涵的陪伴。您们是我顺利完成硕士阶段学习最无私、坚强的后盾。您们的陪伴让我勇往直前。

总之，世界这么大，我想去看看。感谢所有与我有过交集的老师、同学、朋友和亲人。在未来的征程中，我一定会且行且珍惜这种情谊，同时奋发强大，为美好的明天撑开一片天空回报大家的期望

2016 年 4 月于湘潭

个人简历、在学期间发表的学术论文与研究成果

I. 基本信息

陈超育 男 湖南邵阳人 1990 年 3 月 现就读于湘潭大学硕士研究生。

II. 教育经历

2009.09-2013.06 长沙理工大学物理与电子科学学院 物理学专业 理学学士

2013.09-2016.06 湘潭大学物理与光电工程学院 物理学专业 理学硕士

III. 发表论文

(1) Chen Chao-Yu, She. Yanchao, Xiao Huaping, Ding Jianwen, Cao Juexian, Guo Zhi-Xin, “Enhancing the ballistic thermal transport of silicene through smooth interface coupling”, **Journal of Physics: Condensed Matter**, **28 (2016) 145003**. IF=2.3

(2) Chen Chao-Yu, Guo Zhi-Xin, “Anisotropic in-plane thermal conductivity observed in multilayer silicene”, To be submitted

IV. 参与项目

A. National Natural Science Foundation of China: “Substrate effect and manipulation on thermal/electronic transport properties of nanomaterials” (2013—2015, Grant No. 11204259).

B. Natural Science Foundation of Hunan Province, China: “Computational study on thermal transport properties of two-dimensional nanosystems and their manipulation” (2015—2017, Grant No. 2015JJ6106).

V. 学术会议

2014.7.26-7.29 第十八届凝聚态理论与统计物理学术会议 中国重庆

2015.7.14-7.17 第一届凝聚态物理会议 中国北京

VI. 其它

兴趣: IT 及数据分析、信息解析、自然科学探究

E-mail: cychen2015@hotmail.com