

破解芯片过热之谜：“看清”界面原子级声子传热

毛瑞麟^{1,2} 刘法辰^{2,3} 高鹏^{1,2,3,*}

(1 北京大学物理学院 量子材料科学中心 北京 100871)

(2 北京大学 电子显微镜实验室 北京 100871)

(3 北京大学 前沿交叉科学研究院 北京 100871)

2025-07-12收到

* email: pgao@pku.edu.cn

DOI: 10.7693/wl20250805

CSTR: 32040.14.wl20250805

1 界面热阻的发现以及影响

在日常生活经验中，人们对物体的热传导现象形成了直观认知：当物体的温度不均匀时，热量会从高温区域流向低温区域，使得温度会从高温区到低温区呈现连续变化。这一现象早在1822年就由傅里叶^[1]通过“热扩散定律”进行了理论描述。该定律指出，单位时间内通过给定截面的热量，与垂直于该截面方向上的温度变化率及截面面积成正比，其中的比例系数便是衡量材料导热能力的关键物理量——热导率。此后，泊松于1835年提出“分子辐射理论”，该理论预言在两种不同导体的交界处会出现温度不连续变化^[2]。不过，由于这种温度不连续变化极其微弱，直到1898年，斯莫卢霍夫斯基(Smoluchowski)等学者才通过精密实验测量证实，玻璃—空气界面处的温度不连续变化量级，约等同于气体中1 μm尺度的温度变化^[3]，对应的界面热阻(界面热导率的倒数)数值约为 10^{-6} — 10^{-5} m²K/W。1941年，卡皮查(Kapitza)在液氦—金属界面实验中也观察到类似

现象^[4]：每施加1 mW/cm²的热流时，界面处存在约2 mK的温度跳变，且该现象发生在界面10 μm的范围内。这种界面处的温度不连续特性，意味着界面对热流传递产生了阻碍作用，即产生了“热阻”。鉴于卡皮查实验的深远影响，学术界将此类界面热阻命名为“卡皮查热阻”。后续研究发现，卡皮查热阻不仅存在于固体—气体、固体—液体等非同相系统界面，在固体—固体界面同样普遍存在。

在热流密度较低、温度梯度较小的条件下，卡皮查热阻导致的温度变化极其微弱，甚至可忽略不计。斯莫卢霍夫斯基和卡皮查的早期实验已证实，小热流工况下，界面温度不连续变化通常为毫开尔文量级。然而，随着当今半导体技术的迅猛发展，器件功率集成密度持续攀升，工艺制程不断向更小尺度推进。目前，芯片的面功率密度可达kW/cm²量级，与火箭喷口的功率密度相当^[5]。美国国防高级研究计划局(DARPA)在电子器件级散热技术项目(THREADS)中计划达到81 W/mm的线功率密度^[6]。在典型的第三代半导体芯片中，十几微米的小区域内

密集分布着众多不同材料构成的异质界面。当热流通过时，界面处会出现温度骤降，使得数十微米区间内即可产生显著的温度降。在此情形下，界面热阻引发的温度变化在整个热传递过程中占据重要比例，成为了散热过程的瓶颈因素^[7]。界面高温侧形成的纳米尺度“热点”，会导致芯片性能

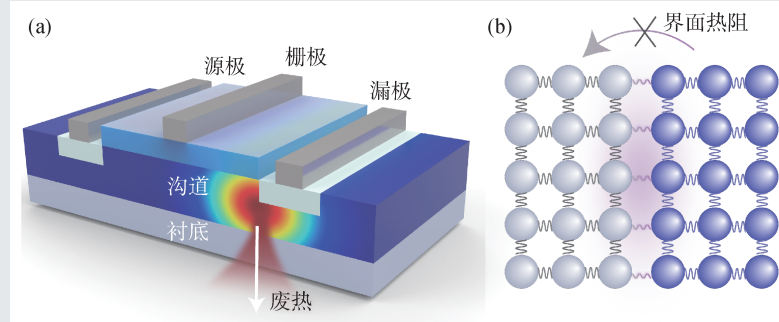


图1 芯片中的热点与界面热阻 (a)一个芯片中典型的金属—氧化物—半导体晶体管(MOSFET)单元中的热点以及散热路径；(b)声子失配造成的界面热阻

衰退甚至失效(图1)。因此,研究微米乃至纳米尺度下的界面局部温度分布和测量界面热阻,对于揭示半导体芯片的失效机制、提升性能与可靠性都具有关键意义。但当前面临的困境在于,受限与现有表征技术的分辨率及探测灵敏度,难以对芯片内部纳米尺度区域的温度变化进行有效测量。此外,即便能够获取界面温度变化数据,若要实现界面结构优化以提升半导体器件性能,仍需深入探究界面热阻产生的物理机制。

2 界面热阻的产生原因

自“界面热阻”研究起步以来,科学家们便致力于构建理论模型以阐释其物理本质。早在泊松时代,热传导方程中就已引入描述界面热阻的边界条件;在固体—气体界面热阻研究中,气体分子与界面的散射及局部热平衡构建过程也得到详细探讨。而固相—液相、固相—固相体系界面热阻理论的突破,则得益于“声子”概念的提出。声子是晶格振动的量子化描述,在固体中可以将其视为热载体的一种“粒子”。尤其是在半导体材料中,其热的传导主要是由声子的输运来实现的。

在半导体材料内部,声子可以分成两种模式:一种是原子们步调一致地前后移动(声学模),像波浪一样传递;另一种是相邻原子你推我拉地相对运动(光学模)。通常情况下,像波浪一样传播的声学模,对材料导热能力的贡献更大。早期理论认为,界面热阻源于声子声学模式的不匹配^[8],该理论认为携带热量的弹性波的输运类似于光跨介质传输时的行为,在界面附近也会发生镜面反射与折射。随后发展的扩散不匹配模型^[9],着重考虑界面附近声子的漫反射行为。然而,这些基于连续介质理论的模型,既无法考量界面原子结构等微观因素,又缺乏对非弹性散射过程的分析,导致对界面热阻的预测精度不足。此外,固体材料中声子能量(频率)与动量遵循复杂的规律,即复杂的色散关系,使得区分不同频率与振动模式声子对热输运的贡献变得尤为关键。

随着理论计算技术的革新,晶格动力学^[10]、格林函数^[11]、分子动力学^[12]及玻尔兹曼方程^[13]等

方法被广泛应用于声子介导的界面热输运研究。这些方法能够实现原子尺度、模式分辨的界面热输运分析,从而预测界面缺陷、元素混排等微观结构对热输运性质的影响。近十余年,模式分辨模拟技术的发展^[14–16],进一步揭示了不同声子模式在界面处的散射机制。研究表明,界面对称性破缺引发的只在界面附近纳米尺度存在的局域振动模式,因其与其他振动模式容易发生相互作用,在界面热输运中发挥核心作用。分子动力学模拟证实,该模式在非平衡态下对界面热导的贡献可超过50%^[17]。这些局域振动模式犹如界面热输运中的“立交桥”,有效弥合了界面两侧声子模式失配,降低了热阻效应。尽管界面热阻的理论工作得到了长足的发展,但从实验角度,为了揭示这些界面局部模式的作用,我们需要一种能够同时在纳米尺度表征界面温度与声子输运行为的方法。

3 STEM-EELS 技术探测声子信号与温度测量的原理

在过去半个世纪里,界面热阻的探测技术取得了显著进展。自20世纪80年代起步^[18],于本世纪初发展成成熟的时域/频域热反射测量技术^[19, 20],已成为当前测量界面热阻最常用的手段。不过,该技术缺乏空间分辨能力,无法捕捉界面附近纳米尺度的温度变化与声子行为,仅能提供热导率相关信息。而基于扫描探针显微镜的技术(如扫描热探针显微镜^[21]、针尖增强拉曼光谱技术^[22]等),虽能在空间上实现纳米尺度温度的精确分辨,但受限于表面敏感的技术特性,难以对包埋界面的热阻进行有效探测。近年来,随着扫描透射电子显微镜(STEM)与电子能量损失谱技术(EELS)的不断进步,纳米尺度温度与声子行为的同步探测得以实现,这为界面热导研究领域带来了新的突破与希望。

在扫描透射电子显微镜中,电子束经多级磁透镜协同作用可汇聚至原子级尺寸,从而实现原子尺度的空间分辨率。同时,数十千伏的加速电压使电子速度接近光速,具备穿透薄样品的能力,

令包埋于材料内部的界面结构得以清晰呈现——这一特性使电镜在纳米尺度界面体系研究中具有不可替代的优势。更值得关注的是，冷场发射电子枪与单色仪技术的革新大幅提升了电子能量分辨率，这使得依赖于电子显微镜中非弹性散射信号的能量损失谱技术，如今可精确分辨电子与样品相互作用时约 10 meV 的能量变化^[23]——该能量精度足以捕捉声子。电子能量损失谱探测声子的原理是：高能电子在样品中会产生与湮灭声子，产生声子时将能量传递给声子，在能量损失一侧产生信号，而湮灭声子时电子获得声子的能量，则会在能量增益一侧产生信号。这一过程满足能量守恒与动量守恒定律，因此，通过探测散射后电子的能量与动量变化，即可获得对应的声子过程。

在热平衡状态下，声子的能量与占据特定能量的声子数目(声子布居数)严格遵循玻色—爱因斯坦

分布，这意味着通过探测声子布居数可反推出声子温度(图 2(a))。而电子与声子相互作用所遵循的“细致平衡规则”(图 2(b))，是实现这一探测的关键——该规则限定电子在与声子作用过程中，损失能量与获得能量的概率与布居数相关，且损失与获得能量概率的比值恰好是温度的函数^[24]。基于此特性，研究人员一方面可直接获取纳米尺度下界面附近的温度分布；另一方面，当界面附近声子布居呈现偏离玻色—爱因斯坦分布的特征时，电子能量损失谱能敏锐地捕捉这一变化，从而实现对声子非平衡输运行为的精准表征与量化测量。

4 “看清”原子尺度下跨界面的声子传热

为深入探究芯片界面热输运机制，2025 年，中国科学家首次借助扫描透射电子显微镜—电子

能量损失谱在半导体异质结界面中实现了亚纳米分辨的温度场和界面热阻测量，并阐明了由界面声子主导的跨界面热输运微观机制^[25]。研究者选取界面两侧存在声子失配(界面两侧组成材料具有不同能量—动量色散关系)的氮化铝/碳化硅异质界面作为研究模型体系(图 3(a))。通过自主设计的微区加热器件，在电子显微镜腔体内实现了微米尺度的局域可控加热，成功在界面处构建出高达 180 K/ μm 的陡峭温度梯度。借助电子能量损失谱的亚纳米级空间分辨率优势，研究人员首次获得了亚纳米尺度下界面附近的温度分布图谱(图 3(b))，这一成果刷新了现有温度测量技术的空间分辨率极限。基于温度分布数据，研究团队进一步提取了卡皮查长度参数——该参数通过等效体材料长度表征界面热阻。实验数据显示，在 180 K/ μm 的强温

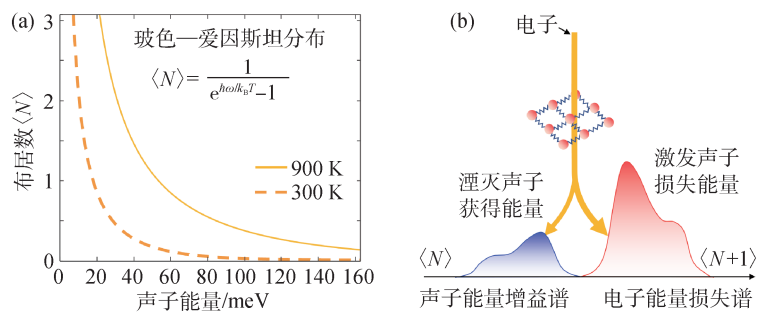


图2 利用电子能量损失谱探测温度的原理 (a)声子的布居数与能量关系符合玻色—爱因斯坦分布；(b)电子激发声子的细致平衡规则

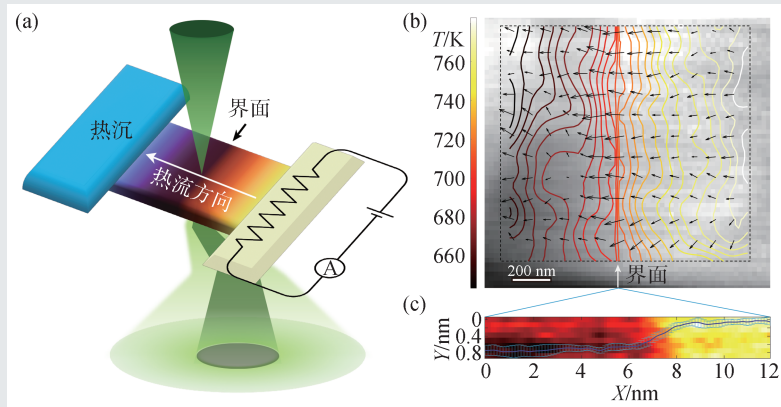


图3 声子输运可视化的显微技术 (a)实验设计示意图；(b)氮化铝—碳化硅界面附近微米尺度的等温线分布图(彩色线条)和温度梯度方向(黑色箭头)；(c)界面附近 12 nm 范围内的温度分布图

度梯度下,氮化铝—碳化硅界面仅在2 nm区域内(图3(c))即产生10—20 K的显著温度降,而相同温度变化量在氮化铝或碳化硅体材料中需跨越数十至数百纳米尺度,这表明该界面热阻强度约为体材料的30—70倍,证实了界面热阻在微纳半导体器件中引发局部热点效应的关键作用。

除此之外,为了探究不同界面模式对界面热阻的贡献,研究人员巧妙地设计了两个相反方向的热流,对比界面这个“闸”在相反热流下的不同行为。他们发现,位于70 meV左右的 α 模式与90 meV左右的 β 模式两支界面局域模式,在正反向热流下呈现出了典型的非对称布居。在正反向热流的能量获得信号中, β 模式强度更加明显,而反向热流下 α 模式的强度更明显。此外,氮化铝处于80 meV附近的光学声子模式展现出明显的非平衡现象,表现为其能量损失信号(对应声子产生)和能量获得信号(对应声子湮灭)在靠近界面的3 nm区域出现了相对差异,这也导致声子模态温度的非线性行为,其结果也可以与非平衡分子动力学模拟的结果对应。这一现象意味着正反向传热过程中倾向于借助不同的界面声子作为弥合声子失配的“立交桥”(图4),从而在施加两个方向的热流时,界面声子的布居数展现出非对称的分布方式。这一发现揭示了界面模式参与的非弹性声子输运动力学过程,为芯片界面工程和先进热管理材料等的研究提供了有价值的理论指导。

5 总结与展望

当前,这种基于电子显微镜的技术能够对包埋界面的温度分布进行纳米级映射,成功攻克了长期以来在微米尺度分析包埋界面附近温度的技术难题。依托纳米级分辨的温度场特征,研究人员可进一步获取局域热阻分布。不仅如此,通过对能量增益信号的亚纳米级分析,还能追踪激发态声子的动力学过程,从而揭示热传输背后的声子输运机制。除界面研究外,该方法还可通过同步开展结构表征与热测量,探究原子级结构缺陷的热输运性质。

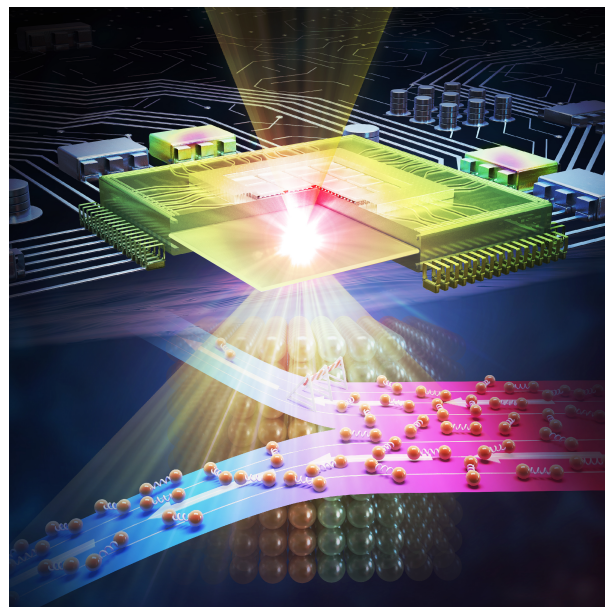


图4 界面一侧声子输运行为的概念图,可见声子倾向于选择某一个界面声子通道进行输运

不过,这种技术仍存在一定局限性。其一,目前无法量化界面热通量,也就是通过界面的热流的多少,因此难以确定绝对界面热阻值;其二,尽管近年来电子显微镜中的电子能量损失谱技术取得了显著进步,但受限于能量分辨率,其温度测量仍存在较大不确定性,尤其对于声子能量较低(低能量分辨率下无法分辨)的体系或在较低工作温度下(能量增益侧信号强度较弱),测量精度会进一步受限。

未来的发展目标在于进一步提升测量精度,以及将该方法拓展至其他体系,比如处于工作状态下的热电材料与实际电子芯片等。这些实验将对半导体界面热设计等领域的发展提供有价值的参考。

参考文献

- [1] Fourier J B J. *Théorie Analytique De La Chaleur*. Cambridge University Press, 2009
- [2] Poisson S D. *Théorie Mathématique De La Chaleur*. Paris: Bachelier, 1835
- [3] Smolan M S De. Xiv. The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science, 1898, 46 (279): 192
- [4] Kapitza P L. *Phys. Rev.*, 1941, 60(4): 354
- [5] Song Y S, Thoutam L R, Tayal S *et al.* *Handbook of Emerging*

Materials for Semiconductor Industry. Singapore: Springer Nature Singapore, 2024

- [6] Threads: Technologies for Heat Removal in Electronics at the device Scale | Darpa[Eb/OL]. 2025-08-06. <https://www.darpa.mil/Research/programs/threads-heat-removal>
- [7] 罗天麟, 丁亚飞, 韦宝杰 等. 物理学报, 2023, 72(23):91
- [8] Little W A. Canadian Journal of Physics, 1959, 37(3):334
- [9] Swartz E T, Pohl R O. Rev. Mod. Phys., 1989, 61(3):605
- [10] Young D A, Maris H J. Phys. Rev. B, 1989, 40(6):3685
- [11] Wang J S, Wang J, Zeng N. Phys. Rev. B, 2006, 74(3):033408
- [12] Maiti A, Mahan G D, Pantelides S T. Solid State Communications, 1997, 102(7):517
- [13] Lee J, Roy A K, Farmer B L. Phys. Rev. E, 2011, 83(5):056706
- [14] Gordiz K, Henry A. Journal of Applied Physics, 2016, 119(1):015101
- [15] Zhou Y, Zhang X, Hu M. Phys. Rev. B, 2015, 92(19):195204

- [16] Gabourie A J, Fan Z, Ala-Nissila T *et al.* Phys. Rev. B, 2021, 103(20):205421
- [17] Feng T, Zhong Y, Shi J *et al.* Phys. Rev. B, 2019, 99(4):045301
- [18] Schoenlein R W, Lin W Z, Fujimoto J G *et al.* Phys. Rev. Lett., 1987, 58(16):1680
- [19] Cahill D G. Review of Scientific Instruments, 2004, 75(12):5119
- [20] Schmidt A J, Cheaito R, Chiesa M. Review of Scientific Instruments, 2009, 80(9):094901
- [21] Shi L, Zhou J, Kim P *et al.* Journal of Applied Physics, 2009, 105(10):104306
- [22] Tang X, Xu S, Wang X. Plos One, 2013, 8(3):E58030
- [23] Krivanek O L, Lovejoy T C, Dellby N *et al.* Nature, 2014, 514(7521):209
- [24] Idrobo J C, Lupini A R, Feng T *et al.* Phys. Rev. Lett., 2018, 120(9):095901
- [25] Liu F, Mao R, Liu Z *et al.* Nature, 2025, 642(8069):941

悟理小言

普朗克的悲怆后半生

普朗克(Max Planck, 1858—1947)是量子力学的开创者,他的一生,尤其是后半生,可谓悲惨凄怆已极。

普朗克就读大学时,教授劝告他不要钻研物理学,因为“(古典)物理已经发展完成,死了!”幸而,他执意前行,大器晚成,于42岁时(1900年)提出了电磁波的破天荒量子化概念,不经意打开了潘多拉盒子,触动了量子力学的萌芽与诞生。

1909年,普朗克的首任太太死于(可能是)结核病;但这突然伤逝,只是接踵而来的一连串不幸家庭悲剧的开端。第一次世界大战期间,他的大儿子阵亡,次子曾被拘禁于法国(1914年),次女难产去世(1917年);两年后,长女也因难产死亡(值得庆幸的是两位孙女都存活长大)。

第二次世界大战期间,普朗克座落于柏林的宅



第被盟军炸毁,居所与书房灰飞湮灭(1944年)。同一年,次子因行刺希特勒失败被捕,普朗克奔走营救无果,于德国投降前三个多月(1945年1月底)遭处决。

爱因斯坦于1919年12月9日给玻恩的一封信中,写道:“普朗克的不幸深深打动了我。当我从罗斯托克回来后去拜访他时,我无法忍住眼泪。他的举止惊人的勇敢和得体,但人们可以看出他被悲伤吞噬了。”(范岱年译,《玻恩—爱因斯坦书信集:1916—1955》)

在悲惨而几近绝望中,支撑普朗克一路走下去的,或许是弹奏钢琴、欣赏音乐及广泛阅读。(许多位我们熟知其名的近代物理学家出身知识分子家庭,他们具备深厚艺术、文学和哲学涵养;当时柏林的时代背景及文化氛围,应也有抚慰之效。)然而,更坚定有力的支撑,应是来自当时欧洲的顶尖物理学家和数学家同侪们。他们群星闪烁,不但为解决当时观测到的,层出不穷的辐射(光子)与物质(原子、分子、晶体)作用的繁复多彩现象而殚精竭虑,不时相互讨论、合作、通信、切磋。他们还建立了家庭之间的友谊,往往频繁互相拜访,因而对彼此的家人也都熟识,并且互相关心、关切及鼓励。这些科学内外的文化因素与时代精神及人格特质,想必都是陪伴及扶持普朗克度过老年,直至九旬而仍能问学不辍的生命力泉源。

(台湾阳明交通大学 林志忠 供稿)