

专题: 热传导及其相关交叉领域研究

## 芯片热设计模拟、测量技术及发展综述\*

周君年 周烽 岳圣瀛†

(西安交通大学, 机械结构强度与振动国家重点实验室, 西安 710049)

(2025 年 12 月 29 日收到; 2026 年 2 月 23 日收到修改稿)

随着集成电路技术向高功率密度、3D 集成电路及异构封装发展, 芯片的热管理问题已成为限制芯片性能、可靠性及寿命的关键瓶颈. 本文系统综述了芯片热设计中的数值模拟方法与实验测量技术, 重点分析了现有技术在多尺度、多物理场耦合、界面热阻测量及高热流密度冷却中的瓶颈. 首先介绍了宏观与器件级热模拟方法, 如等效热路模型、有限元法及计算流体力学, 并探讨了声子输运与分子动力学在微观尺度中的应用. 随后, 分析了红外热成像、热反射法、拉曼光谱和嵌入式传感器等实验手段的优势与挑战. 本文还探讨了当前技术的局限性, 包括计算量巨大、多尺度耦合不精确、实验设备昂贵以及冷却技术的物理极限. 最后, 提出了未来研究方向, 特别是 AI 加速的热模拟、嵌入式微通道液冷、两相流冷却、新型高导热材料及多物理场协同设计等前沿技术, 以推动芯片热管理技术向更高效、智能化方向发展.

关键词: 芯片热设计, 热模拟, 声子输运, 热管理

DOI: 10.7498/aps.75.20251780

CSTR: 32037.14.aps.75.20251780

## 1 引言

随着摩尔定律放缓、工艺技术日益向 3D 集成、片上系统 (system on chip, SoC) 和异构封装演进, 芯片的功率密度正以指数级速率攀升. 从传统二维器件迈向二维+、2.5D/3D 封装、Chiplet 架构以及异构集成, 器件封装结构愈加复杂、互连更为紧凑, 局部热点热流密度已突破  $1000 \text{ W/cm}^2$  级别, 热管理因此成为制约性能、可靠性与寿命提升的首要“瓶颈”. 例如, 在多层堆叠 3D 集成电路中, 由于热通道受限、散热路径减短、层间散热阻抗提升, 使得热设计难度剧增<sup>[1,2]</sup>.

从物理机理来看, 器件内部的高温导致热应力、热迁移、电迁移、负偏置温度不稳定性 (negative bias temperature instability, NBTI) 等失效机理加剧, 对器件可靠性构成严重挑战. 热应力会引发晶片内外材料因热膨胀系数差异而产生剪切、裂缝

或失配; 热迁移则可能使金属互连或穿硅通孔结构发生迁移或断裂; 电迁移、NBTI 等器件失效机制在高温下加速, 极端情况下更易造成晶体管或互连失效. 由此可见, 热设计不仅关乎散热能力, 更深刻地作用于器件电-电-热-力耦合、结构完整性及系统寿命.

过去基于经验或粗略经验模型的热设计方法在当前高密度、高功率芯片时代显然已无法满足需求. 精准的数值模拟与高分辨率实验验证成为热设计的必由之路: 模拟工具可用于预测温度场、热流通道、结构应力分布等; 实验手段则用于验证模型、测量热物性、校正边界条件与功率地图, 从而提高设计的可靠性与精度. 二者协同作用, 才能应对芯片封装结构多变、散热路径复杂、热-力耦合较强的新挑战.

鉴于此, 本文旨在系统地综述芯片热设计中数值模拟方法与实验测量手段的当前主流技术, 深入剖析其在高密度、3D 集成背景下所面临的技术瓶颈, 并在此基础上提出未来研究的前沿方向. 全篇

\* 国家自然科学基金 (批准号: GYKP022) 和西安交通大学人才计划 (批准号: LX6J0240001) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: [syyue@xjtu.edu.cn](mailto:syyue@xjtu.edu.cn)

结构安排如下: 第 2 节介绍芯片热设计的数值模拟方法与手段; 第 3 节阐述实验测量技术与模拟验证; 第 4 节重点分析当前技术瓶颈; 第 5 节展望未来可能的研究方向; 最后在结论中总结全文并强调热设计在未来芯片中的核心地位. 以期为从事芯片热管理、封装散热、数值模拟与热测量研究的学术界与产业界提供一个系统、前瞻且可操作的参考综述, 从宏观模拟方法到微观物理机制, 从实验验证手段到系统级散热设计, 助力下一代高功率、高密度芯片热管理技术的突破.

## 2 数值模拟

### 2.1 芯片级热模拟方法

在芯片级与封装级尺度中, 热传导仍主要遵循傅里叶定律, 其控制方程可表示为

$$\rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} = \nabla \cdot (k \nabla T) + Q(r, t), \quad (1)$$

其中  $Q$  来自功率地图, 是芯片级模拟的核心输入. 基于该方程, 等效热路模型成为体系结构级快速评估温度场的主要方法. 其通过将芯片材料层映射为热阻与热容的 RC 网络, 使求解过程类似于电路瞬态分析. HotSpot 模型即是此类方法的代表, 其可在极短时间内预测处理器或加速器的稳态与瞬态温度, 因此在早期的微架构设计、布局布线以及动态热管理策略优化中被广泛采用<sup>[3]</sup>. 然而, 随着 3D IC 与 Chiplet 快速发展, 热路径复杂度急剧增加, 简单的热阻-热容网络难以捕捉硅通孔 (through-silicon via, TSV) 密度、界面热阻 (thermal boundary resistance, TBR) 以及封装堆叠结构中的细微差异, 因此在工程分析中常需要更高精度的模拟方法进行校正.

有限元法 (finite element method, FEM) 与有限体积法 (finite volume method, FVM) 则是当前封装级模拟中最高精度工具. 通过对复杂封装结构进行网格离散, 它们能够精细解析各种尺度的几何结构、界面条件、材料非均匀性以及外部散热环境. 例如, 在高宽带内存 (high bandwidth memory, HBM) 叠层封装中, 基于 FEM 构建的热传导模型, 在假设材料热物性均匀、界面热阻已知且主要热扩散路径由芯片层间及 TSV 结构主导的条件下, 能准确预测层间热传导路径以及 TSV 周围的高热流密度区域. 将仿真得到的稳态表面温度分布与红外热成像实验结果进行对比, 在相同边界

条件与功耗输入下, 二者的最大相对偏差控制在 5% 以内, 验证了该 FEM 模型在 HBM 封装热分析中的适用性与准确性<sup>[4]</sup>. 不过, 当模型规模扩展到上亿网格, 尤其在进行全瞬态模拟时, 其计算时间可能达到数天甚至数周, 这是 FEM/FVM 在 3D IC 热设计中的典型瓶颈.

对于采用风冷、冷板液冷或浸没式冷却的系统, 热问题不仅涉及固体导热, 还涉及流体内部的对流换热. 此时需要求解 Navier-Stokes 方程与能量方程耦合的流体动力学模型:

$$\rho \left( \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} \right) = -\nabla p + \mu \nabla^2 \mathbf{u},$$

$$\rho C_p (\mathbf{u} \cdot \nabla T) = \nabla \cdot (k \nabla T), \quad (2)$$

其中,  $\rho$  表示流体的密度 ( $\text{kg}/\text{m}^3$ ),  $\mathbf{u}$  表示流体的速度矢量 ( $\text{m}/\text{s}$ ),  $p$  表示流体的压强 (Pa),  $\mu$  表示流体的动力黏度 ( $\text{Pa}\cdot\text{s}$ ),  $C_p$  是流体的定压比热容 ( $\text{J}/(\text{kg}\cdot\text{K})$ ),  $T$  表示流体的温度 (K).

CFD 模拟能够评估风冷散热器的空气流动分布、液冷微通道内部的湍流结构以及两相流沸腾换热特性等. 特别是在高热流密度的微通道液冷研究中, 通过体积流体法 (volume of fluid, VOF) 模型捕捉气液界面演化已成为典型手段, 用以预测临界热流密度、气泡生成与流动不稳定性<sup>[5]</sup>. 但由于微尺度流动的强烈非线性, 使得 CFD 模型通常需要大量实验数据进行标定.

### 2.2 器件级与微纳尺度热模拟

在实际半导体器件中, 热输运过程往往同时受到材料本征声子特性、界面热阻以及器件几何结构和工作条件的共同影响. 为解决原子尺度模拟方法难以直接应用于复杂器件结构的问题, 近年来有研究提出了面向器件级热管理的多尺度建模框架, 通过将第一性原理计算获得的声子热输运参数、界面热阻模型与连续介质热传导方程相结合, 实现了对功率器件和异质集成结构中温度分布与热点行为的定量预测. Xia 等<sup>[6]</sup>完成的相关工作已被用于分析宽禁带半导体器件中封装结构、界面工程及散热路径对器件热可靠性的影响, 为器件结构优化和热设计提供了重要的理论依据.

随着器件特征尺寸不断缩小、封装结构向三维与异构集成演进, 半导体内部的热输运行为逐渐偏离宏观连续介质假设, 呈现出明显的尺寸效应、界面效应与非平衡特征. 此时, 传统基于傅里叶定律

的经验模型难以准确刻画真实热输运过程,有必要从材料本征物理机制出发,引入多尺度数值模拟方法.当前,器件级与微纳尺度热模拟主要可分为3类:基于第一性原理的热输运计算、介观尺度的分子动力学 (molecular dynamics, MD) 模拟以及数据驱动的机器学习建模方法.

### 2.2.1 基于第一性原理的半导体热输运计算与声子物性模拟

在微纳尺度热输运问题中,理解材料本征的热输运机制至关重要.传统宏观热学模型往往忽略热载流子的量子力学性质,难以准确预测器件级复杂热行为.因此,基于密度泛函理论 (density functional theory, DFT) 的一系列第一性原理热输运计算方法得到了广泛应用.该类方法不依赖于经验参数,通过求解材料的电子结构和晶格动力学信息来获取热导率和声子输运特性,被证明能在纳米/微尺度材料和器件材料中提供可靠的物理预测.第一性原理方法通常从 DFT 计算中获得晶格常数、声子色散关系和原子间力常数,再将这些结果输入到声子玻尔兹曼输运方程 (phonon Boltzmann transport equation, PBTE) 框架下,对晶格热导率和频率依赖的声子输运行为进行求解,能够揭示声子散射和传输的微观机制<sup>[7,8]</sup>.

在这一体系中,声子 PBTE 是构建材料热导率模型的核心.其通过考虑声子群速度、声子寿命以及声子-声子散射过程等因素,实现对热载流子(主要是声子)在非平衡条件下的输运行为描述.与传统弹性理论相比, PBTE 方法能够将 DFT 提取的二阶和三阶力常数用于全迭代求解,从而避免简单的弛豫时间近似,提高预测精度.这类方法不依赖经验参数,通过求解材料的电子结构和晶格动力学信息来获得晶格热导率和声子输运特性,为器件级模型提供可靠的本征热物性参数输入.基于这一方法,许多研究对不同材料体系的热导率进行了系统计算,例如二维材料、超晶格以及复杂晶体结构等,这些研究表明声子输运受材料各向异性、非谐性以及声子-声子相互作用的重要影响<sup>[7,8]</sup>.

在器件尺度热管理背景下,第一性原理声子输运计算已被广泛用于分析半导体与二维材料体系的本征热导率及界面热阻.例如,在二维材料方面,相关研究表明,硼单层及石墨烯等材料的热输运行为主要受高频声子分支控制,这为利用低维材料进

行芯片散热界面工程提供了重要理论参考<sup>[9]</sup>.在过渡金属硫族化合物体系中,基于 DFT 与 PBTE 的研究揭示了纳米尺度尺寸效应和强非谐性对热导率的重要抑制作用,这一特性在功率器件和高集成度芯片中尤为关键<sup>[10]</sup>.

更进一步地,第一性原理热输运方法已被系统用于硅基与宽禁带半导体器件相关材料的研究,包括纳米结构中的尺寸依赖行为、异质结界面热阻以及二维材料作为热界面材料 (thermal interface material, TIM) 的潜力. Yang 等<sup>[11-18]</sup>学者在声子输运理论、界面热导调控及纳米尺度热管理方面开展了大量开创性工作,为芯片热设计提供了重要物理基础.此外,将第一性原理方法与高通量计算相结合,已成为筛选高/低热导材料并服务于电子器件热管理的重要发展方向,能够在大规模材料数据库中快速筛选适合器件热管理的高热导或低热导材料,为微电子和热电器件设计提供理论依据<sup>[19]</sup>.图 1 给出了高通量估算框架,基于弹性性能的高通量热导率估算流程主要包括 3 个环节:收集结构信息、通过微体积差分计算声子特性以及综合声子贡献估算晶格热导率,分别对应图 1 中的蓝、青、橙色部分<sup>[19]</sup>.

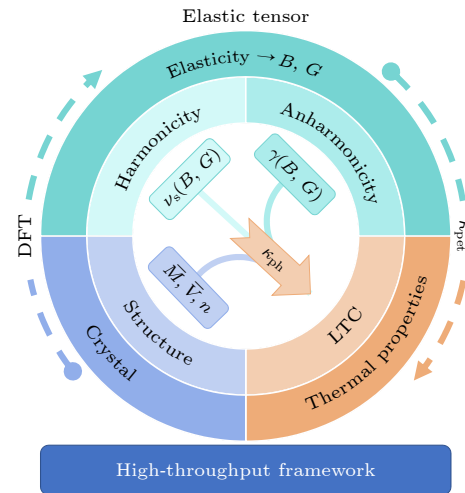


图 1 基于弹性性质计算的晶格热导率的高通量估算框架,蓝色部分用于收集基本结构信息,青色部分是计算弹性性质,即谐波和非谐波性质,橙色部分是用弹性性能计算结果对晶格热导系数的估算<sup>[19]</sup>

Fig. 1. A high-throughput estimation framework for lattice thermal conductivity based on elastic properties, the blue section is for collecting basic structural information, the cyan section involves the calculation of elastic properties, including both harmonic and anharmonic properties, the orange section is for estimating the lattice thermal conductivity using the results of elastic property calculations<sup>[19]</sup>.

近年来, 诸如 ShengBTE<sup>[20]</sup>, Phono3py<sup>[21,22]</sup> 以及 Alamode<sup>[23]</sup> 等程序被广泛用于第一性原理热输运研究. 其中, Alamode 通过灵活的力常数拟合与高效的 PBTE 求解框架, 能够处理复杂晶体结构与低对称体系, 在二维材料、拓扑材料及复杂半导体中表现出良好的适用性. 第一性原理方法在本质上揭示了材料热输运的微观起源, 为器件级热模型提供了可靠的本征热物性参数输入. 在基于第一性原理的热导率计算中, ShengBTE 提供了一个标准化解决方案. 其工作流程明确分离了不同计算阶段: 谐波力常数完全由外部程序 (支持 Phonopy<sup>[21,22]</sup> 或 Quantum Espresso 格式) 提供, 非谐波力常数通过内置的有限差分超胞脚本生成, 最后整合介电性质进行长程修正后计算热导率. 这种设计使研究人员能够灵活选择不同的 DFT 计算后端, 如图 2 所示的典型工作流程 (Phonopy+VASP<sup>[24]</sup> 组合) 已被多个研究组采用<sup>[20]</sup>. 在 Phonopy 与 Phono3py 代码中, 其核心算法实现如图 3 所示. 该方法以规则网格为基础, 将倒易原胞的平行六面体区域划分为多个形状一致的微区, 每个微区的形状由倒易基矢 ( $\mathbf{a}_m^*$ ,  $\mathbf{b}_m^*$ ,  $\mathbf{c}_m^*$ ) 定义. 第一性原理热输运计算不仅揭示了材料热导率的微观起源, 也为器件级热管理提供关键的本征热参数输入. 通过精确计算晶格热

导率和声子输运特性, 可以在器件级模型中预测热点形成、热流分布及材料界面的热阻效应. 这些方法能够将材料微观输运特性与纳米/微尺度器件的热行为联系起来, 为新型高/低热导材料的设计和器件散热优化提供理论指导.

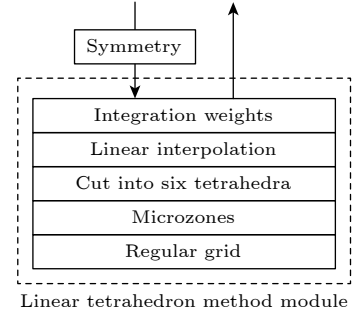


图 3 Phonopy 与 Phono3 py 代码中线性四面体方法的实现模块<sup>[21,22]</sup>

Fig. 3. The implementation module of the linear tetrahedral method in the Phonopy and Phono3 py codes<sup>[21,22]</sup>.

尽管第一性原理方法能够提供高可靠性和原子尺度的物理解释, 其计算成本随原子数快速增长, 难以直接应用于真实器件或封装结构. 因此, 该方法更多地承担着“提供材料本征参数与物理认知”的角色, 为后续介观与连续模型提供可靠输入.

### 2.2.2 介观尺度半导体热输运的 MD 模拟研究

在微纳尺度热输运模拟中, 经典 MD 方法凭借其能够在原子尺度精确描述原子运动的优势, 成为理解和预测复杂半导体材料热导率、TBR 及非平衡热流行为的重要手段. MD 模拟基于牛顿运动方程驱动体系原子随时间动态演化, 并通过构建合适的相互作用势函数来反映原子间作用力, 因此能够同时捕捉声子-声子散射、界面散射以及尺寸效应等对热输运的影响, 这些效应在传统连续介质模型中难以体现. MD 模拟的核心优势在于不依赖于宏观连续假设, 能够在系统尺度接近声子平均自由程的范围内揭示热流行为的基本机制, 对于纳米线、薄膜及异质界面等常见于现代器件结构的复杂半导体体系具有直接应用价值<sup>[25]</sup>. 结合高通量 MD 模拟的主动学习策略已被用于筛选高导热聚合物共混物, 并深入探究某些共混物热导率高于单一聚合物的内在机理, 具体的实现方式如图 4 所示<sup>[25]</sup>.

在具体实现上, MD 模拟常采用两类主要方法来计算热导率: 平衡态分子动力学 (equilibrium molecular dynamics, EMD) 和非平衡态分子动力学

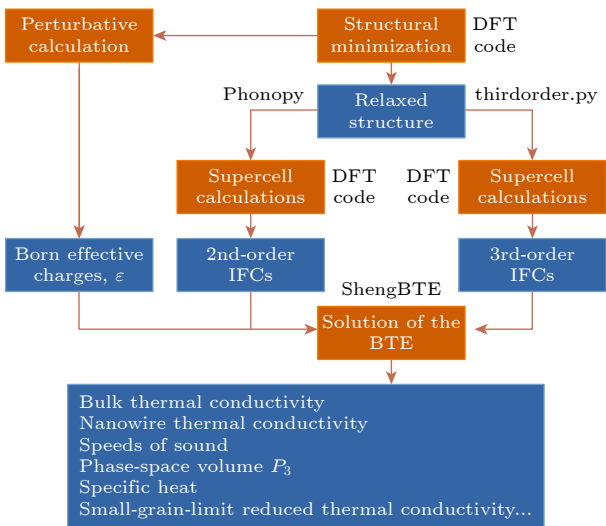


图 2 采用实空间超胞方法计算力常数的热导率计算工作流程, 橙色框代表计算步骤, 蓝色框表示各步骤的输出结果, 计算机程序以无框黑色文字标注<sup>[20]</sup>

Fig. 2. The workflow for calculating thermal conductivity by computing force constants using the real-space supercell method, orange boxes represent calculation steps, blue boxes indicate the output results of each step, and computer programs are marked in black text without frames<sup>[20]</sup>.

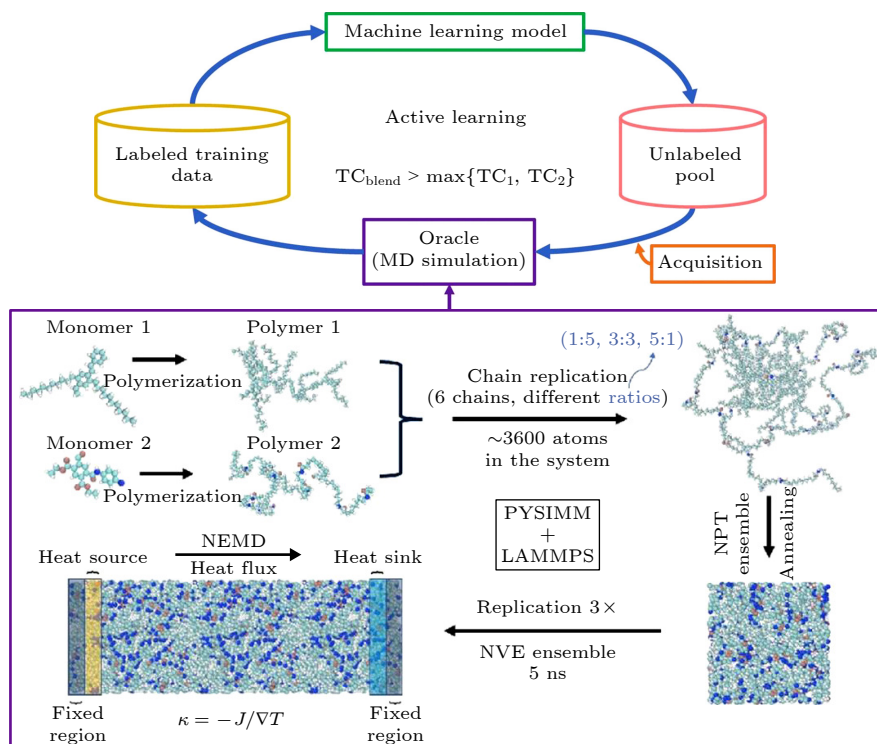

 图 4 基于高通量 MD 与主动学习策略的聚合物共混物高导热材料筛选框架示意图<sup>[25]</sup>

 Fig. 4. Schematic diagram of the screening framework for high thermal conductivity polymer blends based on high-throughput MD and active learning strategies<sup>[25]</sup>.

(non-equilibrium molecular dynamics, NEMD). EMD 方法基于 Green-Kubo 关系, 通过热流自相关函数的时间积分得到体系的热导率, 适用于热输运在热平衡涨落下的统计分析, 其优势在于不需要人为施加外部温度梯度, 避免了非线性传热效应的干扰, 并且在周期性边界条件下易于实现, 特别适用于描述体相材料的本征热导率. 然而, EMD 对统计采样要求较高, 需要长时间模拟才能保证热流关联函数的充分收敛, 同时在低维材料或强尺寸效应体系中, 其结果可能受到有限尺寸效应的影响. 相比之下, NEMD 方法则通过在体系两端施加热源与冷源建立稳态温度梯度, 并依据傅里叶定律直接计算热导率, 能够直观刻画非平衡传热过程, 尤其适用于研究尺寸效应及界面散射主导的输运问题, 其优点在于物理图像直观, 温度分布与热流可以直接观测, 尤其适合研究界面热阻、尺寸效应以及非均匀体系中的热输运行为. 但 NEMD 往往需要较大的体系尺寸以避免热源/冷源区域对温度场的非物理扰动, 并且在纳米尺度体系中可能受到非局域传热或弹道输运效应的影响, 从而导致由傅里叶定律提取的热导率存在系统性偏差.

在涉及 TBR 的定量预测时, MD 结果往往高

度依赖于所采用的经验势函数及其对跨界面键合、力常数与非谐相互作用的描述精度, 因此仍存在一定不确定性<sup>[26]</sup>. 近年来的研究指出, 若势函数未能准确再现实验或第一性原理计算得到的界面振动谱与键合特性, MD 可能会产生较大偏差, 与真实 TBR 数值存在差异, 这一问题在复杂异质结中尤为突出. Feng 等<sup>[27-29]</sup>通过系统比较 MD、原子格林函数与第一性原理方法, 强调了在界面热输运研究中引入更高精度原子尺度模型和多尺度计算框架的重要性.

尽管如此, MD 模拟在揭示半导体异质结构中声子跨界面散射与透射机制方面仍具有独特优势. 通过 NEMD 构造具有不同界面粗糙度、原子混合程度或化学键合方式的模型, 并统计热流与温度跃迁, 可以系统分析界面结构变化对 TBR 的影响趋势, 从而检验声学失配模型与漫散射失配模型等经典理论的适用范围.

这类原子尺度模拟不仅揭示声子在界面散射与透射过程中的物理机制, 还能为界面工程设计提供定性甚至半定量指导<sup>[25,30,31]</sup>. 例如, 在交替介质薄膜与超晶格结构的 MD 热输运模拟中, 研究表明界面密度增大或层厚减小时, 界面散射成为热流

的主要调控因素,从而有效抑制整体热导率,这一结果对于理解三维集成芯片内层间热阻贡献具有重要参考价值<sup>[32]</sup>.

此外,MD模拟被广泛应用于研究半导体材料的热输运特性,例如Si, GaN以及SiC等材料.针对高功率电子器件,如GaN高电子迁移率晶体管(high electron mobility transistors, HEMT),MD模拟能够系统分析晶体结构、缺陷以及界面对声子散射和热传输的影响,为近结热管理提供精确的数值框架<sup>[33]</sup>.研究表明,在无定形硅碳薄膜中,热导率随温度升高或体系尺寸变化而呈现明显的温度和尺寸依赖性,这主要源于声子平均自由程的变化;在硅纳米线和GaN纳米结构的比较研究中,不同MD热输运方法(如EMD与NEMD)在热导率和声子态密度谱的评估上存在差异,强调了采用多种模拟方法进行协同分析的重要性<sup>[34]</sup>.

尽管MD模拟在揭示微纳尺度热输运物理机理方面发挥了重要作用,其结果的准确性仍受限于所采用的经典势函数的准确性、体系尺度及边界条件等因素.因此,为提高MD模拟的预测能力,当前研究逐渐将MD与机器学习势函数、第一性原理参数结合,以期实现更高精度的大尺度热输运模拟,这一方向将在后续章节进一步讨论.

### 2.2.3 面向器件与结构优化的半导体热输运机器学习模拟方法

随着芯片结构复杂度和设计参数维度的持续提升,传统的热输运模拟方法在计算效率和精度之间面临难以调和的矛盾.近年来,机器学习驱动的势函数与高性能计算方法为MD模拟注入了新的活力,通过结合高精度势函数与高效计算框架,能够有效提高对复杂材料热输运性质预测的可靠性与可扩展性.在这类方法中,DeePMD<sup>[35-37]</sup>(deep potential molecular dynamics)和GPUMD<sup>[38]</sup>(graphics processing units molecular dynamics)是两个代表性技术路线,对半导体热输运的模拟研究产生了深远影响.

DeePMD方法通过深度神经网络从高质量第一性原理数据中学习原子间相互作用势,并将其作为机器学习势用于大规模MD仿真,有效桥接了传统经验势与第一性原理方法之间的精度与效率鸿沟. DeePMD-kit作为DeePMD方法的重要实现平台,其核心贡献在于支持从第一性原理数据

中高效训练高维神经网络势,并将所得势函数嵌入大规模分子动力学模拟,从而实现对多体相互作用与非谐声子效应的精细刻画.该类方法通常采用局域原子环境描述符,并在训练过程中联合拟合能量、力与应力张量,使声子谱、界面散射以及缺陷诱导的热阻等与热输运密切相关的物理量能够得到可靠预测<sup>[36]</sup>.其软件架构与工作流程示意如图5所示.

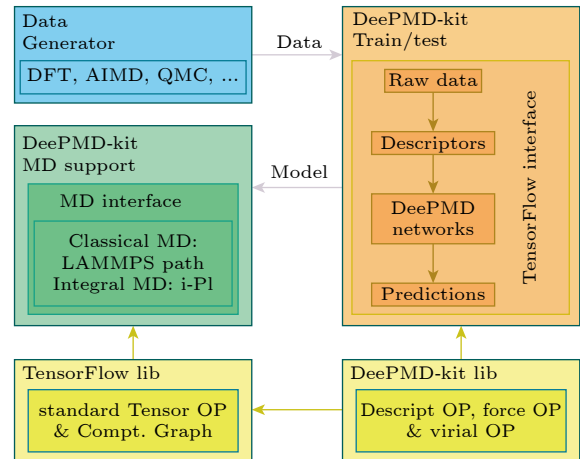


图5 DeePMD-kit架构示意图及工作流程<sup>[35-37]</sup>

Fig. 5. Architecture diagram and workflow of DeePMD-kit<sup>[35-37]</sup>.

GPUMD<sup>[38]</sup>则代表了将机器学习势与GPU加速计算深度融合的技术路线,其集成的神经演化势(neuroevolution potential, NEP)模型针对热流与应力张量计算进行了专门优化,使得在保持接近第一性原理精度的同时,可以在单GPU平台上开展百万原子尺度的热输运模拟研究.相关研究表明,该框架能够有效量化晶界、界面和结构无序对热导率与界面热阻的影响,并支持对不同声子模态输运贡献的分解分析.其完整的“训练-应用”工作流程如图6所示.

结合DeePMD与GPUMD的方法,研究者已经能够高效开展热输运性质的大规模MD模拟.例如,通过使用NEP机器学习势及GPUMD平台,已有研究成功实现了在桌面GPU上对百万原子规模的多晶石墨烯热输运行为进行近第一性原理精度的模拟,量化了晶界对热导率的影响,并解析了不同声子模式的输运贡献,为低维材料热管理问题提供了重要物理认识<sup>[39]</sup>.此外,基于GPUMD的综述也明确指出,机器学习势方法在热输运模拟中不仅提升了计算效率,也使得复杂材料中的非谐

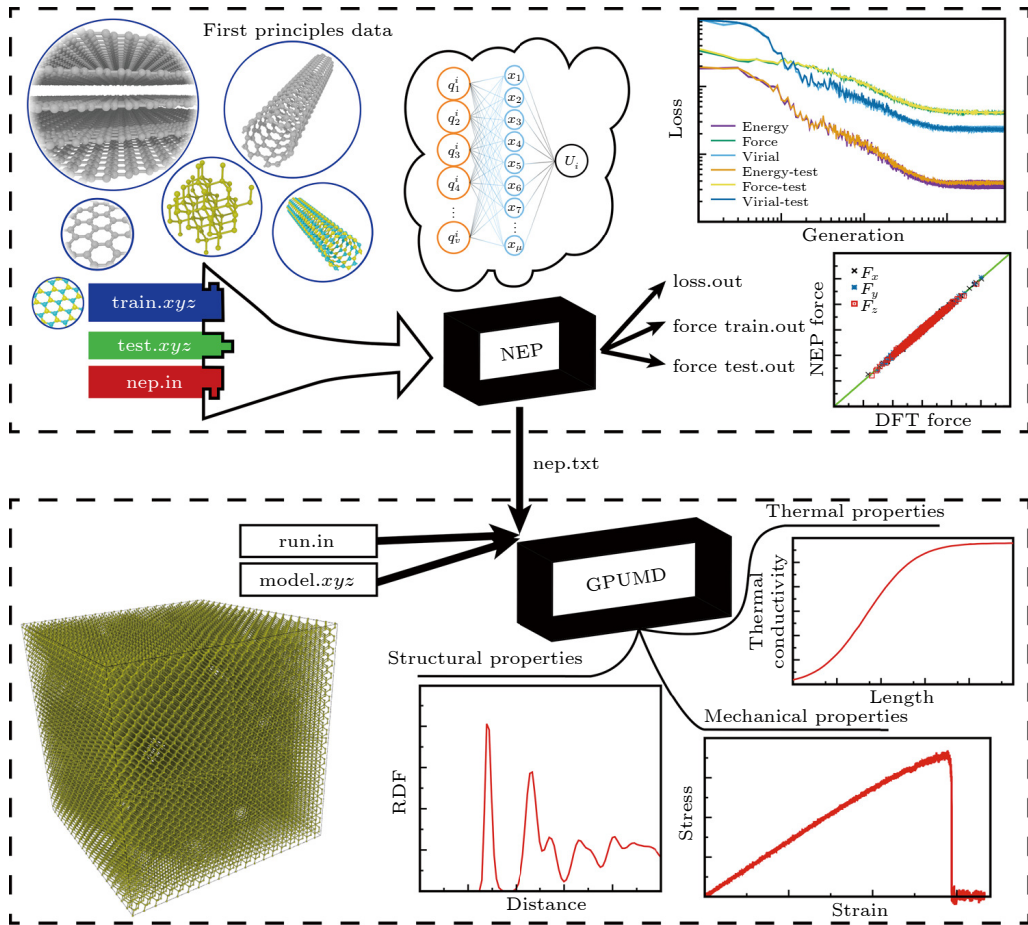


图 6 GPUMD 工作流程, GPUMD 软件包包含两个可执行程序 nep 与 gpumd, 分别由两个黑色方框表示, 其中 nep 程序用于训练 NEP 势函数模型, gpumd 程序则使用训练好的势函数进行原子尺度模拟<sup>[38]</sup>

Fig. 6. GPUMD workflow, the GPUMD software package consists of two executable programs of nep and gpumd, represented by two black boxes respectively, among them, the nep program is used to train the NEP potential function model; the gpumd program uses the trained potential function to conduct atomic-scale simulations<sup>[38]</sup>.

效应、空间无序及界面散射等物理现象能够在 MD 模拟框架下被准确捕捉<sup>[40]</sup>.

机器学习驱动的 MD 模拟还推动了多尺度热建模的发展路径. 一方面, 高精度机器学习势可从第一性原理数据中自动学习复杂势能曲面, 从而提高热输运参数的准确性; 另一方面, 高性能 MD 平台则利用 GPU 架构提供了大规模模拟的计算能力, 使得包含大量缺陷、界面及异质结构的半导体体系热行为成为可计算问题. 这种由“机器学习势+高性能 MD 软件”共同构建的模拟策略, 正逐步成为热输运研究与器件级热设计之间的关键桥梁, 在 3D 集成、异构封装以及热-力耦合等复杂条件下具有广泛的应用前景.

### 2.3 多物理场耦合模拟

随着器件尺寸缩小与工作频率提升, 热效应不再独立存在, 而是与电场、载流子迁移率、机械应

力等紧密耦合. 电-热耦合模型需要同时求解电势方程、载流子输运方程与热传导方程, 以捕捉 Joule 热、迁移率退化以及温度反向影响电性能等现象.

这种热-电耦合效应不仅决定器件的瞬态和稳态性能, 还直接影响其长期可靠性和寿命指标. 在器件可靠性评估中, 常用的寿命表征指标包括平均失效时间 (mean time to failure, MTTF), 以及由热效应加速的失效机制, 如金属互连中的电迁移 (electromigration, EM) 和栅介质相关的 NBTI 等. 这些失效机制均对结温高度敏感, 其劣化速率通常随温度呈指数增长. 例如在 GaN HEMT 中, 高功率密度脉冲会导致栅区温度快速升高, 从而引起载流子迁移率下降约 20%—30%, 不仅削弱器件的瞬态输出性能, 也会加速与温度相关的退化过程, 进而缩短器件的 MTTF<sup>[41]</sup>.

在半导体器件的实际工作过程中, 热输运行为往往与电输运过程及器件运行条件紧密耦合, 单一

热传导模型难以准确描述器件内部的温度分布和功率耗散特征. 针对这一问题, 近年来, Li 等<sup>[42]</sup> 系统发展了面向半导体器件的热-电耦合模拟方法, 将载流子输运、焦耳热产生与热扩散过程统一纳入多物理场建模框架中, 用于分析宽禁带半导体器件在高功率密度和复杂散热条件下的温升行为与热可靠性问题. 相关研究从器件结构设计、界面工程及散热系统协同优化等角度, 揭示了多物理场耦合效应对器件性能与稳定性的影响, 为高功率电子器件的热管理与系统级优化提供了重要指导.

热-力耦合模型则在封装级尤为重要. 由于硅、铜、封装环氧树脂等材料的热膨胀系数差异巨大, 温度梯度形成的热应力可能在 TSV 周围产生高达数百 MPa 的应力集中, 成为金属疲劳与互连可靠性的重要影响因素<sup>[43]</sup>. 因此, 多物理场耦合模拟已成为先进封装可靠性分析的必要工具.

## 2.4 AI 加速的热模拟新进展

随着芯片热问题复杂度增加, 基于深度学习的代理模型逐渐被引入热分析流程. 通过学习布局、材料参数与温度场之间的映射关系, 神经网络可以在保持较高精度的前提下, 将计算时间从数小时缩短至毫秒量级. 例如 Gabourie 等<sup>[44]</sup> 提出的基于 UNet 的等效热导率预测模型, 该工作指出其在复杂封装设计中展现出约 95% 精度, 是指模型在测试数据集上预测结果与高保真数值模拟结果之间的相对误差指标, 用于衡量等效热导率预测的准确性. 该模型在复杂封装结构的数据集上进行训练与测试, 并在相同测试基准下, 相较于传统数值热模拟方法实现了超过 3 个数量级的计算速度提升. 相关结果表明, 该方法在所考虑的结构参数范围内具有良好的预测性能<sup>[44]</sup>. AI 加速热模拟的出现, 使实时热分析与芯片运行时热预测成为可能, 为未来“智能热设计”奠定了基础.

在此基础上, 近年来研究者进一步将卷积神经网络 (convolutional neural networks, CNN)、图神经网络 (graph neural networks, GNN) 以及物理信息神经网络 (physics-informed neural networks, PINN) 等模型引入多尺度热传导问题中, 用以刻画复杂几何结构、非均匀材料分布以及多热源耦合条件下的温度演化行为<sup>[45-49]</sup>. 其中, GNN 通过将芯片布局与互连结构表示为拓扑图形式, 在处理不规则封装形貌与层级互连方面展现出较强的泛化能力<sup>[45,49]</sup>; 而 PINN 则通过在损失函数中显式嵌入热传导控制方程, 使网络预测结果在物理约束下保持一致性, 从而在减少训练样本数量的同时提升模型稳定性与可解释性<sup>[47,48]</sup>.

此外, 混合数据驱动-物理建模框架逐渐成为热点方向, 即利用有限元或有限体积法生成少量高保真样本作为监督信号, 再通过深度学习模型构建快速响应的热代理器 (thermal surrogate), 以支持大规模参数扫描与设计空间探索<sup>[50-52]</sup>. 这类方法特别适用于先进封装与异构集成场景, 例如 Chiplet 结构、2.5D/3D 堆叠芯片以及 TSV 互连体系中复杂的垂向导热问题, 可有效降低热设计阶段的计算成本.

值得注意的是, AI 模型在工程应用中的可靠性与泛化能力仍是当前研究的关键挑战<sup>[53]</sup>. 一方面, 模型性能高度依赖于训练数据分布, 当几何结构或材料参数超出样本覆盖范围时, 预测精度可能出现明显退化; 另一方面, 如何在保证推理速度优势的同时提供不确定性量化与误差评估机制, 也是推动其走向实际芯片设计流程的重要前提<sup>[54,55]</sup>. 因此, 近年来已有工作开始结合贝叶斯神经网络、集成学习以及主动学习策略, 对模型预测置信区间进行评估, 并通过自适应采样不断扩充训练数据集<sup>[56]</sup>. 为对比不同数值模拟方法及展示尺度与方法的映射关系分别列于表 1 和表 2.

表 1 芯片热管理中典型数值模拟方法的主要特点

Table 1. The main characteristics of typical numerical simulation methods in chip thermal management.

应用领域	代表方法	主要贡献	参考文献
宏观与芯片级热模拟	等效热路模型	将芯片及封装简化为热阻-热容网络, 分析整体温度分布与热响应	[3]
器件级热模拟	FEM	精细刻画器件内部温度场及材料非均匀性	[4]
热-流体耦合模拟	CFD	研究冷却介质流动与换热行为, 可分析高热流密度散热问题	[5]
微观热输运模拟	声子输运模型	描述非傅里叶热传导及尺寸效应, 可揭示微纳尺度热输运机理	[7,8]
原子尺度模拟	MD	研究 TBR 及原子级热传导行为, 物理机制清晰; 适合界面问题	[25]
智能加速模拟	AI 加速热模拟	基于数据驱动预测温度场与热响应, 计算速度快; 适合大参数空间	[44]

表 2 尺度-方法映射表  
Table 2. Scale-method mapping table.

尺度层级	长度尺度	时间尺度	代表方法	适用材料	主要输出	计算成本	典型误差来源
系统级	cm—mm	ms—s	等效热路RC	SoC, Chiplet初期评估	T、热点预测	极低	功率地图简化、边界条件粗略
封装级	mm— $\mu\text{m}$	ms—s	FEM/FVM	TSV、HBM堆叠封装	T场、热流、应力	中-高	网格不足、TBR未知
热-流耦合	cm— $\mu\text{m}$	ms—s	CFD(VOF两相)	微通道液冷、喷射冷却	换热系数、压降	极高	湍流模型、相变参数依赖实验
介观非傅里叶	mm—nm	ns— $\mu\text{s}$	声子BTE/PBTE	纳米薄膜、超晶格	$\kappa$ 谱、非平衡热流	高	散射机制假设、材料参数
原子尺度界面	nm— $\text{\AA}$	ps—ns	MD/NEMD	异质界面TBR、缺陷	TBR、声子散射	极高	势函数精度、有限尺寸效应
数据驱动代理	任意	实时预测	AI surrogate/ PINN	快速热预测与优化	温度场、功率反演	训练高/ 推理低	数据分布外泛化差

### 3 实验手段

与数值模拟相比,实验测量在芯片热设计中承担着参数标定、模型校正以及真实失效机理验证的重要任务.由于芯片内部的温度分布往往具有高热流密度、强瞬态性以及亚微米级尺度特征,因此实验技术必须兼具高空间分辨率、高时间分辨率与高精度材料参数获取能力.本节从温度场测量、TBR与热物性测试,以及模拟-实验联合验证3个方面进行综述.

#### 3.1 温度场测量技术

温度场测量技术主要分为红外热成像 (infrared thermography, IRT)、热反射法 (thermo-reflection, TR)、拉曼光谱测温法和嵌入传感技术.红外成像由于操作简单、视场较大,是封装级温度测量最常用的方法. IRT 基于材料辐射率与表面温度之间的对应关系,能够获得器件表面的二维温度分布图.但其空间分辨率通常受限于红外波长,难以分辨纳米器件或亚微米热点.此外,芯片金属互连层表面反射率高,需要通过黑体涂层校准辐射率才能获得可靠数据 [57]. 因此 IRT 多用于封装级散热器性能评估以及热对流实验验证.

TR 利用材料反射率随温度变化而改变的物理特性,通过探测被测对象表面反射光的强度或相位变化,反推表面温度分布及热扩散系数、热阻等热特性参数的光学测量技术,即:

$$\frac{\Delta R}{R} = C \Delta T, \quad (3)$$

其中  $\Delta R$  为反射率的变化量,  $R$  为参考温度下的反射率,常以  $\Delta R/R$  的形式与温度变化  $\Delta T$  建立线性关系,  $C$  为材料热反射系数 ( $\text{K}^{-1}$ ),典型量级通常

为  $10^{-5}$ — $10^{-4} \text{K}^{-1}$ ,在温度扰动较小的条件下,上述线性近似关系成立 [58]. TR 的空间分辨率通常取决于激光光斑尺寸,可达到微米量级,时间分辨率受激光脉冲宽度限制,可达到皮秒至纳秒量级 [59]. TR 可用于 CMOS 栅极、金属互连线、GaN HEMT 漏极区等关键位置的精准测温,是目前应用最广泛的亚微米温度成像技术之一.拉曼光谱测温法是一种基于拉曼散射效应的无接触、高空间分辨率测温技术,核心利用“材料拉曼峰的位置、强度、宽度随温度变化的规律”反推温度,尤其适用于微尺度、复杂结构的精准测温,其是通过激发被测对象产生拉曼散射,采集散射光的光谱信号,结合材料的温度-拉曼特性校准曲线,反推被测区域温度的光谱学技术,图 7 为微拉曼光谱的系统示意图 [60]. 在拉曼光谱测温方法中,拉曼位移与声子能级相关,因此温度升高会导致拉曼峰位红移,通过峰位-温度标定可实现  $1 \mu\text{m}$  级分辨率的温度测量.与 TR 相比,拉曼测温可以同时获取材料应力信息,因为热应力也会引起拉曼峰位变化.因此,在 3D IC 中,拉曼测温技术被用于同时测量 TSV 区域的温度与热应力分布,实现热-力耦合实验验证 [61]. 其限制在于信号弱、扫描时间长,不适合大面积、长时间测量.此外,拉曼光谱测量的温度与应力精度和准确度受到多种因素制约.一方面,拉曼峰位对温度和应力均具有敏感性,在实际测量中二者往往相互耦合,需要依赖材料参数标定和模型假设进行解耦,从而引入不确定性;另一方面,激光自加热效应、光谱分辨率及峰位拟合误差也会影响测温精度,尤其在微纳尺度和多材料集成结构中影响更大.因此,拉曼技术更适合用于局部区域的相对温度与应力分布表征,而在获取高精度绝对值及大尺度热场信息方面仍存在一定局限.对于嵌入式传感器技术,在先

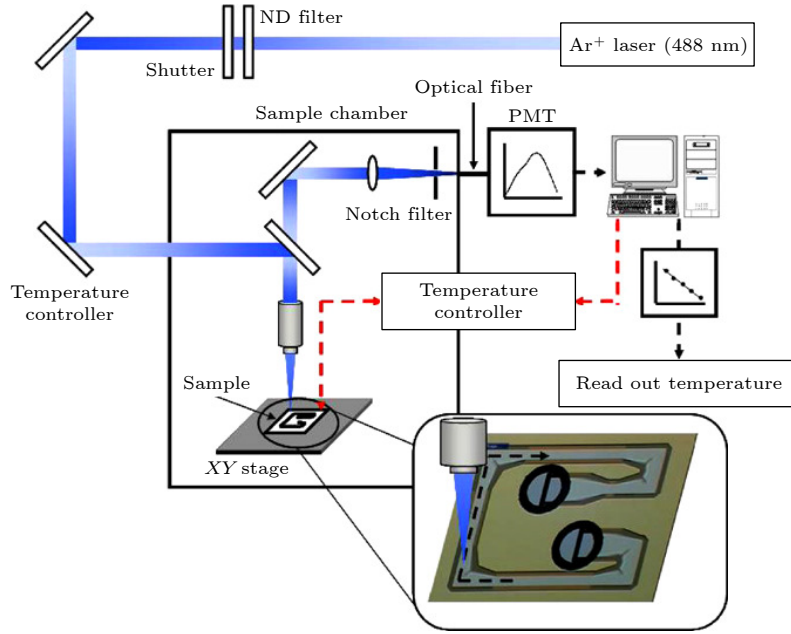


图 7 微拉曼光谱系统<sup>[60]</sup>

Fig. 7. Micro-Raman spectroscopy system<sup>[60]</sup>.

表 3 不同实验测温方法在芯片热管理研究中的特点对比

Table 3. Comparison of the characteristics of different experimental temperature measurement methods in the research of chip thermal management.

测量尺度	实验方法	主要贡献	参考文献
封装级/芯片表面	IRT	器件表面二维温度分布, 非接触测量; 操作简单; 视场范围大	[57]
微米尺度	TR	局部温度及瞬态热响应, 空间与时间分辨率高	[59]
微米/亚微米尺度	拉曼光谱测温	局部温度及热应力分布, 可同时获取温度与应力信息	[61]
器件内部/芯片级	嵌入式温度传感器	芯片内部实时温度, 可原位测量, 实时性高	[62]

进封装中, 嵌入式温度传感器 (如环形振荡器、热电堆或基于 TSV 的温度探针) 可直接测量芯片内部温度. 环形振荡器的频率与温度呈单调关系:

$$f(T) \propto \mu(T), \quad (4)$$

其中迁移率  $\mu(T)$  随温度升高而降低, 因此可用于高实时性温度监测. 嵌入式传感器能够实现片上分布式温度采样, 是验证数值模拟中功率地图、热扩散路径的重要手段<sup>[62]</sup>. 然而其布设会占用芯片面积, 并可能改变局部热扩散路径. 不同实验测温方法在芯片热管理研究中的特点对比见表 3.

### 3.2 热物性与 TBR 测量

材料热导率、薄膜热容及 TBR 是影响模拟精度的重要输入参数. 主要分为  $3\omega$  法, 时域热反射法 (time-domain thermoreflectance, TDTR), 频域热反射法 (frequency-domain thermoreflectance, FDTR) 以及微通道冷却实验平台.

#### 3.2.1 $3\omega$ 法

$3\omega$  法是一种通过交流电加热并测量样品表面温度响应来测量热物性的重要实验技术, 广泛应用于薄膜、纳米材料、微电子器件及半导体等领域. 该方法通过调节加热电流的调制频率 (即周期性加热信号的频率, 通常在 Hz—kHz 范围内), 实现对不同热扩散长度和时间尺度下热输运行行为的表征, 因此在微小结构和 TBR 测量中具有独特优势<sup>[63]</sup>. 在理论分析中,  $3\omega$  法通常基于半无限体或多层膜热扩散模型, 其适用性取决于热扩散长度与样品几何尺寸及调制频率之间的关系.

$3\omega$  法的核心原理是基于热扩散和电阻的关系, 如图 8 所示. 具体来说, 首先在样品表面通过微加工工艺制备一条金属电阻线 (通常使用金属如铝、铂或钼), 并通过该电阻线通入频率为  $\omega$  的交流电流. 根据焦耳定律, 电流通过电阻线时会产生热量, 这些热量使得电阻线局部温度发生变化, 进而引起电

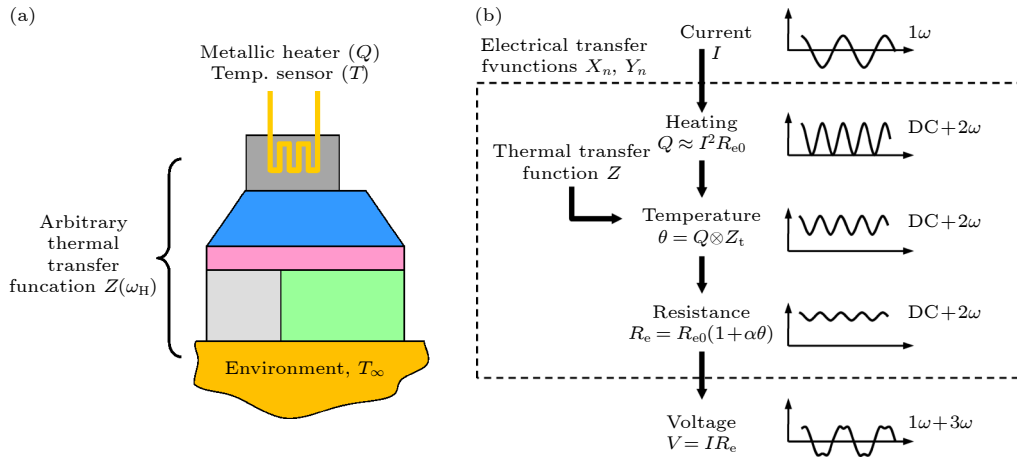

 图 8 (a)  $3\omega$  法测量传递函数的一个通用系统; (b) 正弦电流与电压以及热传递函数之间的关系<sup>[64]</sup>

Fig. 8. (a) A general system for measuring transfer functions using the  $3\omega$  method; (b) relationship between sinusoidal current and voltage, as well as the heat transfer function<sup>[64]</sup>.

阻的变化. 在分析中通常假设金属电阻线的长度远大于其宽度和厚度, 热量主要沿垂直于电阻线方向向样品内部传导, 侧向热扩散以及空气对流和辐射换热的影响可以忽略. 在该假设下, 样品的热输运过程可近似视为一维热扩散问题. 由于电阻是温度的函数, 这种温度变化会导致电压信号发生变化. 具体地, 电流通入时, 由于热量的积累, 电阻发生周期性的变化, 从而在电压信号中产生  $2\omega$  的频率成分. 温度响应  $\Delta T(t)$  和加热电流  $I(t)$  之间的关系可以通过热扩散方程来描述. 假设样品表面发生的温度变化是周期性的, 那么电流  $I(t)$  为正弦波形式为<sup>[63]</sup>

$$I(t) = I_0 \sin(\omega t), \quad (5)$$

其中,  $I_0$  是电流幅度,  $\omega$  是电流的频率. 由于电流通过电阻线产生热量, 样品表面温度会发生周期性的变化. 假设温度变化的主要频率成分为  $2\omega$ , 那么电阻的变化  $\Delta R(t)$  可以写为<sup>[63]</sup>

$$\Delta R(t) = \alpha \Delta T(t), \quad (6)$$

其中,  $\alpha$  是电阻的温度系数. 由于电流和电阻之间的关系, 电压信号会包含  $3\omega$  的频率成分. 通过测量电压信号的  $3\omega$  分量  $V_{3\omega}$ , 可以提取出材料的热物性信息. 在稳态或周期性加热条件下,  $V_{3\omega}$  通常可表示为一个复数形式<sup>[63]</sup>

$$V_{3\omega} = |V_{3\omega}| e^{i\phi_{3\omega}}, \quad (7)$$

其中,  $|V_{3\omega}|$  表示  $3\omega$  电压的幅值,  $\phi_{3\omega}$  表示其相位, 相位反映了温度响应相对于激励电流的相位滞后. 由于金属电阻随温度变化, 因此通过测量  $3\omega$  电压的幅值和相位, 可以反演样品的温度变化. 根据热

扩散方程, 温度响应与频率  $\omega$  的关系是通过热扩散率来描述的. 具体来说, 温度响应  $\Delta T_{2\omega}$  与频率  $\omega$  之间的关系可以通过下式表达<sup>[63]</sup>:

$$\Delta T_{2\omega} = (1/\sqrt{\omega}) \cdot \exp\left(-\sqrt{\omega/D}\right), \quad (8)$$

其中,  $D$  是热扩散率. 通过改变电流频率  $\omega$ , 并测量不同频率下的电压信号, 可以获得温度响应随频率的变化, 从而反演出材料的热扩散率和热导率. 对于薄膜或多层结构,  $3\omega$  法特别有效, 因为其能够有效地测量薄膜材料的热导率以及材料间的 TBR. TBR 对于微电子器件的热管理至关重要.  $3\omega$  法通过测量不同频率下的温度响应, 结合薄膜的几何结构, 为 TBR 的定量分析提供了一种常用的实验手段.

随着研究对象由连续薄膜向低维纳米结构延伸, 传统  $3\omega$  法在空间分辨率和样品适配性方面面临一定挑战. 为此, 研究人员发展了多种基于电学加热与温度传感的微纳结构热输运测量方案, 实现了对单根纳米线等低维体系热导率的高精度表征. 针对一维纳米结构 (如半导体纳米线) 的热输运特性, 研究人员发展了结合电子束局域加热与微纳热桥传感器的高空间分辨热导率测量方法. 在该方法中, 聚焦电子束作为高度局域化的热源作用于纳米线不同位置, 而悬空微桥结构中的高灵敏温度传感器用于精确测量温升响应, 从而实现沿单根纳米线方向的局域热导率分布测量. 该技术在纳米尺度上具有优异的空间分辨能力, 已被用于研究缺陷调控、离子辐照等因素对纳米线热输运行为的影响, 为理解低维结构中非均匀热输运提供了重要的实验手段<sup>[65]</sup>.

### 3.2.2 TDTR 和 FDTR

TDTR 和 FDTR 是近年来在微纳尺度热输运研究中被广泛采用的两类非接触式热物性表征技术. TDTR 方法最早由 Cahill<sup>[66]</sup> 系统性发展, 将飞秒泵浦-探测激光技术引入热学表征, 使得通过泵浦激发热通量并监测探测反射率随时间的变化成为可能, 从而能系统测量材料的热导率、热扩散率及界面热导等热物性参数. Cahill<sup>[66]</sup> 早期工作已将 TDTR 发展成一种常规的、具有高时间分辨能力的测量手段, 并展示了其在不同材料体系 (包括薄膜、超晶格和界面热阻评价) 中的广泛适用性. 两种方法均基于热反射效应, 即材料表面反射率随温度变化而发生微小改变, 通过光学手段对瞬态或稳态温度响应进行探测, 从而反演材料的热学参数, 如热导率、热扩散率以及界面热导等.

TDTR 通常采用飞秒或皮秒激光作为热激励源和探测源. 实验中, 调制后的泵浦光束周期性地加热样品表面, 使其产生瞬态温升; 探测光束在不同时间延迟下照射同一区域, 通过测量反射率变化来获取样品表面的时间分辨温度衰减曲线. 为增强热反射信号, 样品表面通常沉积一层金属换能层, 最常用 Al 的是铝薄膜, 该金属层既作为吸收激光能量的热源, 又作为温度敏感的光学探测层. 通过将实验获得的瞬态信号与热扩散理论模型进行拟合, 可以同时获得样品及界面的多种热物性参数. 如图 9(a) 中表示样品通常涂覆一层金属薄膜起到换能的作用, 而图 9(b) 中展示出 TDTR 通过测量泵浦脉冲和探测脉冲到达样品表面的时间延迟与热反射率响应之间的关系来工作, 其中泵浦光束在样品表面施加周期性的热通量, 而探测光束则通过反射率的变化检测相应的温度变化<sup>[67]</sup>.

社会上许多学者在 TDTR 方法的拓展中作出了重要贡献. 例如, Feser 和 Cahill<sup>[68]</sup> 发展了基于空间偏移或可变光斑尺寸的 TDTR 方案, 实现对材料各向异性导热行为的独立测量, 并扩展了 TDTR 在复杂热输运体系中的应用能力. Wilson 等<sup>[69]</sup> 的工作系统测定了不同金属换能层的热反射率和  $dR/dT$  值, 为选择换能层材料及优化实验设计提供了重要指导依据. 此外, Jiang 等<sup>[70]</sup> 提出的双调制频率 TDTR 方法通过组合高频与低频信号来提高薄膜热导率测量的准确性, 特别在高热导薄膜的热导率提取中, 有效提升了灵敏度和数据可靠性.

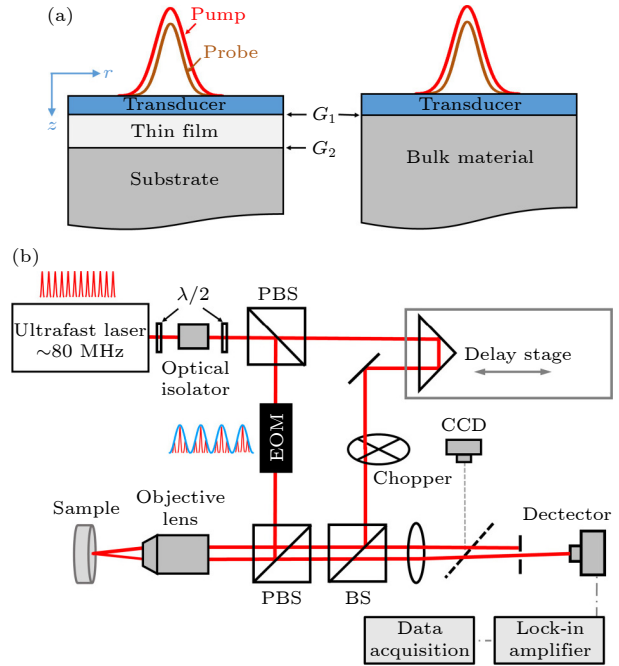


图 9 (a) TDTR 测量的薄膜和块体材料典型样品配置; (b) 典型瞬态热反射装置示意图<sup>[67]</sup>

Fig. 9. (a) Typical sample configuration for thin film and bulk material measured by TDTR; (b) schematic diagram of a typical transient thermal reflection device<sup>[67]</sup>.

TDTR 的主要优势在于其时间分辨率高, 能够直接探测皮秒至纳秒尺度的热输运过程, 因此特别适用于研究薄膜、超晶格以及 TBR 等问题. 此外, 通过改变激光光斑尺寸、调制频率或换能层厚度, TDTR 可在一定程度上调控热渗透深度, 实现对不同尺度热输运行为的选择性表征. 然而, TDTR 的实验系统相对复杂, 对光路稳定性、泵浦与探测光束的空间重合精度以及时间延迟线的机械稳定性要求较高, 这在一定程度上增加了实验系统的复杂性和调试难度, 同时数据反演过程对模型假设较为敏感, 不同参数之间可能存在较强的相关性<sup>[71]</sup>.

相比之下, FDTR 采用连续波激光作为热源, 通过对泵浦光进行正弦调制, 使样品表面产生周期性的温度振荡. 探测光同步测量反射率随调制频率变化的幅值和相位信息. FDTR 最早由 Schmidt 等<sup>[72]</sup> 系统发展成为一种测量热导率和热容的方法, 该工作详细描述了如何通过频率扫描获得材料热属性并建立了热扩散模型与实验响应之间的关系. 与 TDTR 不同, FDTR 不依赖时间延迟扫描, 而是通过改变调制频率来调控热扩散长度, 从而获取材料在不同热渗透深度下的响应特征. 实验数据通常以相位延迟或幅值衰减随频率变化的形式呈现,

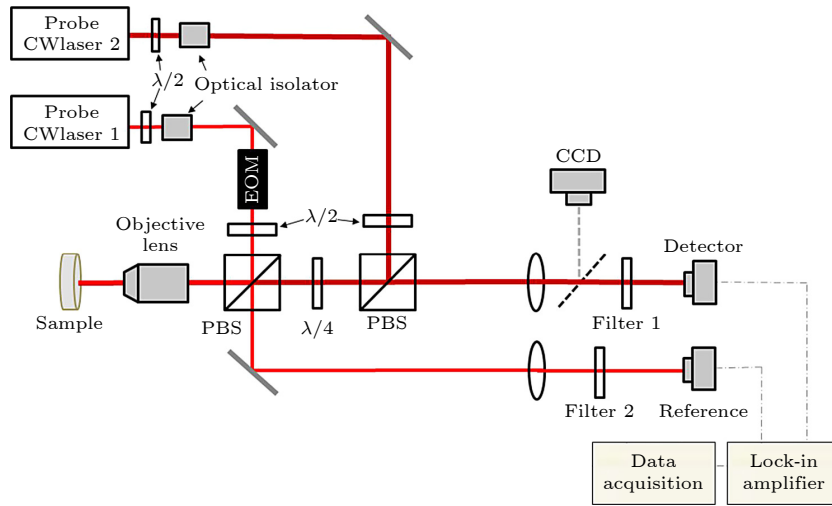


图 10 基于两种不同波长连续波激光器的 FDTR 系统<sup>[67]</sup>

Fig. 10. FDTR system based on two different wavelength continuous wave lasers<sup>[67]</sup>.

并通过频域热传导模型进行拟合分析. FDTR 的一个重要优点是实验实现相对简洁, 对激光脉冲宽度要求较低, 且在高频调制条件下具有较好的信噪比.

此外, 频率扫描方式使 FDTR 在区分体材料热导率与界面热导方面具有一定优势, 尤其适合研究低热导材料和多层结构体系, Regner 等<sup>[73]</sup> 基于 FDTR 平台进一步发展了宽带 FDTR(BB-FDTR) 技术, 通过扩展调制频率范围, 可实现热导累积函数等复杂热输运特性的测量, 这对于研究低热导材料、TBR 以及纳米结构体系具有明显优势. Yang 等<sup>[74]</sup> 提出了 FDTR 显微成像扩展, 使 FDTR 能够在多层结构中同时映射不同热参数, 表明 FDTR 不仅适合体材料和薄膜的热导率测量, 也能有效分离界面热导和厚度贡献. 然而, 由于其缺乏直接的时间分辨信息, FDTR 在研究超快热过程或强非平衡输运现象时存在一定局限. 图 10 为两种不同波长激光器的 FDTR 系统的示意图.

如图 11 所示, TDTR 与 FDTR 在实验实现和信号获取方式上存在明显差异, 但二者均基于热反射效应对材料表面温度响应进行探测<sup>[75]</sup>. TDTR 通过改变泵浦与探测脉冲之间的时间延迟, 直接获得样品在时域中的瞬态温度衰减过程, 从而具备较高的时间分辨率, 适用于研究超快热输运及 TBR 等问题. 相比之下, FDTR 采用连续波激光并对泵浦光进行正弦调制, 通过扫描调制频率获取反射信号的幅值与相位信息, 其测量结果反映的是样品在频域中的稳态或准稳态热响应. 频率调制方式使 FDTR 能够有效调控热渗透深度, 在区分薄膜与

基底贡献方面具有优势. 总体而言, TDTR 更侧重时间尺度上的热动力学过程, 而 FDTR 则通过频率调控实现空间尺度选择性, 两种方法在热物性表征中具有良好的互补性.

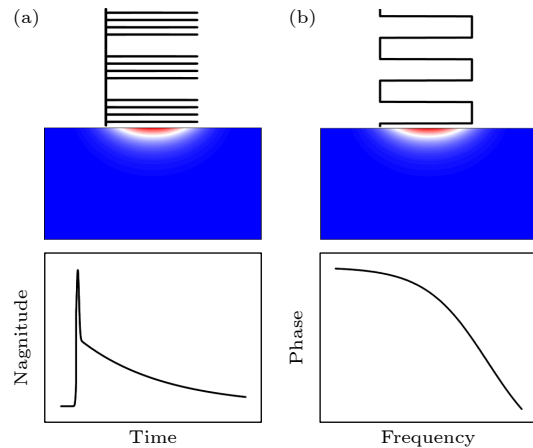


图 11 (a) TDTR 和 (b) FDTR 的特征激发及其相应响应<sup>[75]</sup>

Fig. 11. Characteristic excitations and corresponding responses for (a) TDTR and (b) FDTR<sup>[75]</sup>.

总体而言, TDTR 与 FDTR 在物理原理上具有高度一致性, 但在实验实现和数据分析策略上各具特点. TDTR 更强调时间分辨能力, 适用于超快和高时间精度测量; FDTR 则通过频率调控实现热尺度选择, 在稳态或准稳态条件下表现出良好的稳定性和灵敏度. 在实际研究中, 两种方法常被互补使用, 以提高热物性参数提取的可靠性和准确性. 随着实验技术和理论模型的不断发展, TDTR 与 FDTR 已成为微纳尺度热输运研究中不可或缺的重要工具.

除了基于光学泵浦-探测原理的 TDTR 和 FDTR 技术外,近年来,基于先进电子显微镜的谱学表征方法在纳米尺度热输运研究中展现出独特优势.扫描透射电子显微镜结合电子能量损失谱 (STEM-EELS) 技术,能够以亚纳米空间分辨率探测声子激发及局域能量分布,从而实现对异质材料界面附近温度场及界面热输运行为的直接表征.该方法突破了传统光学测量在空间分辨率上的限制,为揭示纳米结构界面处声子主导的能量传递机制提供了重要的实验依据,与 TDTR 等宏观平均测量技术形成了有力互补<sup>[76]</sup>.

### 3.2.3 微通道冷却实验平台

对于采用液冷方式的芯片散热结构,微通道冷却实验平台的核心目标在于定量表征流动与传热特性,包括通道压降、质量流量以及局部和平均换热系数等关键参数.其中,通道压降与流量特性反映了微尺度流动阻力及流动稳定性,是评估冷却系统能耗与可靠性的基础;换热系数及其随热流密度变化的规律则直接决定了微通道冷却方案在高热流密度条件下的散热能力.为实现上述参数的精确测量,实验系统通常集成微机电加工技术制备的微通道冷板,该冷板可在几何尺寸、通道形貌及表面状态等方面实现高度可控,从而为系统性研究提供可靠平台.在实验测试过程中,高精度压力传感器与质量流量计被用于实时监测流动参数,而布置于芯片模拟热源或冷板表面的高精度温度传感器(如薄膜热电阻或热电偶阵列)可用于获取温度分布及其动态变化.此外,高速摄像系统常被引入以可视化微通道内的两相流动形态和沸腾行为,包括气泡成核、生长、合并及脱离等过程,从而为揭示微尺度沸腾传热机理提供直观依据.通过将实验获得的压降、换热性能及流型演化结果与 CFD 数值模拟结果进行对比,可有效验证模型中两相流动与沸腾换热的物理假设,并提高对临界热流密度预测的准

确性与可靠性<sup>[77]</sup>.

此外,近年来在高热流密度芯片冷却方面,Wu 等<sup>[78]</sup>提出了嵌入式射流增强歧管微通道冷却结构,通过设计包含流形层、中间微射流层和锯齿形侧壁微通道层的复合微流控结构,实现了最高达 3000 W/cm<sup>2</sup> 级别的热通量冷却,同时保持较低的泵浦功率密度.该设计将微通道、歧管和喷射流相结合,可有效降低整体压降并提高局部传热系数,为高功率电子器件、高热流密度电力电子和射频器件的热管理提供了实验验证平台,与传统单通道或简单微通道结构相比具有更优异的热水力性能和能效表现.表 4 列出了热物性参数及 TBR 的实验测量方法及其特点对比.

### 3.3 模拟-实验联合验证

实验测量不仅提供数据,还用于模型校准与误差分析.典型研究表明,在 GaN HEMT、HBM-3D 堆叠、3D NAND 等结构中,通过将 TR 或拉曼结果与 FEM 温度场对比,可以有效识别功率地图误差、TBR 不确定性、寄生热通道等问题.例如,在 HB 结构中,实验测得热点温度往往比模拟高 10%—15%,主要源于封装 TIM 厚度与实际材料参数偏差.通过联合验证,可提升整体预测精度并优化散热结构设计.

## 4 技术瓶颈

在芯片热设计领域,尽管数值模拟和实验测量技术已取得重要进展,但随着功率密度持续提升、封装结构日益复杂,以及应用场景要求剧变,仍然存在多项瓶颈.与此同时,数值模拟、实验测量与模型校准之间逐步形成闭环协同关系,其基本流程如图 12 所示.在此基础上,本文将从模拟瓶颈、实验瓶颈与系统级瓶颈 3 个维度进行分析.

表 4 芯片热管理中热物性与 TBR 测量实验方法的特点比较

Table 4. Comparison of characteristics of thermal properties and TBR measurement experimental methods in chip thermal management.

测量尺度	实验方法	主要贡献	参考文献
薄膜/微米尺度	3 $\omega$ 法	薄膜热导率及 TBR, 适用于薄膜与微电子结构	[63]
纳米-微米尺度	TDTR	TBR 及热扩散系数, 适用于多种材料界面	[67]
纳米-微米尺度	FDTR	TBR 及热扩散系数具有较高的参数敏感性, 且其相位信号对实验噪声、信噪比及锁相放大器稳定性较为敏感, 需通过频率优化和不确定度分析加以控制	[75]
芯片级	微通道冷却实验平台	压降、流量及换热系数, 可直接验证液冷与两相流模型	[77]

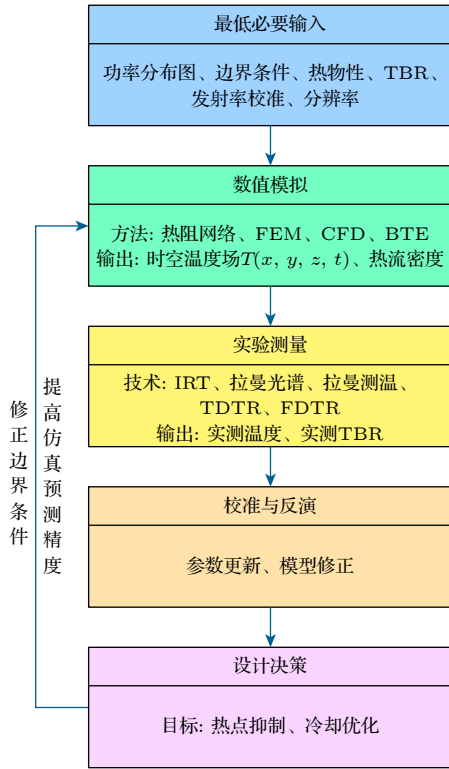


图 12 模拟-测量-校准闭环流程图

Fig. 12. Simulation-measurement-calibration closed-loop flow-chart.

### 4.1 模拟瓶颈

从模拟角度来看, 宏观-微观尺度热传导耦合、瞬态高热流密度场的求解、功率地图与材料参数的不确定性, 成为限制精准预测的关键因素. 其挑战主要分为 3 个方面. 首先, 当芯片封装采用 3D 堆叠、Chiplet 或嵌入式冷却结构时, 全芯片瞬态热模拟常需上亿至数亿格网, 结合热-流-力耦合模型, 其求解时间可从数小时延伸至数天甚至数周. 这不仅延长设计周期, 也使得“快速迭代”几乎不可能 [79]. 其次, 如图 13 所示, 当特征尺度接近声子平均自由程时会出现明显的非傅里叶效应, 图中总结了其传热机制与适用尺度区间, 宏观模拟与微观模型之间的尺度鸿沟依然难以有效桥接. 实际芯片中, 声子级别的非傅里叶传热、TBR 效应与封装级的大尺寸热扩散过程耦合, 传统模型难以兼顾, 导致温度场预测偏差较大. 已有综述指出, 尽管模拟库不断扩展, 但在真实动态负载环境中, 局部预测误差仍在 10%—20% 之间 [1,80]. 再者, 模拟的准确性高度依赖功率地图、材料热物性、TBR 等参数, 然而这些参数在实际封装中往往具有较大变动性.

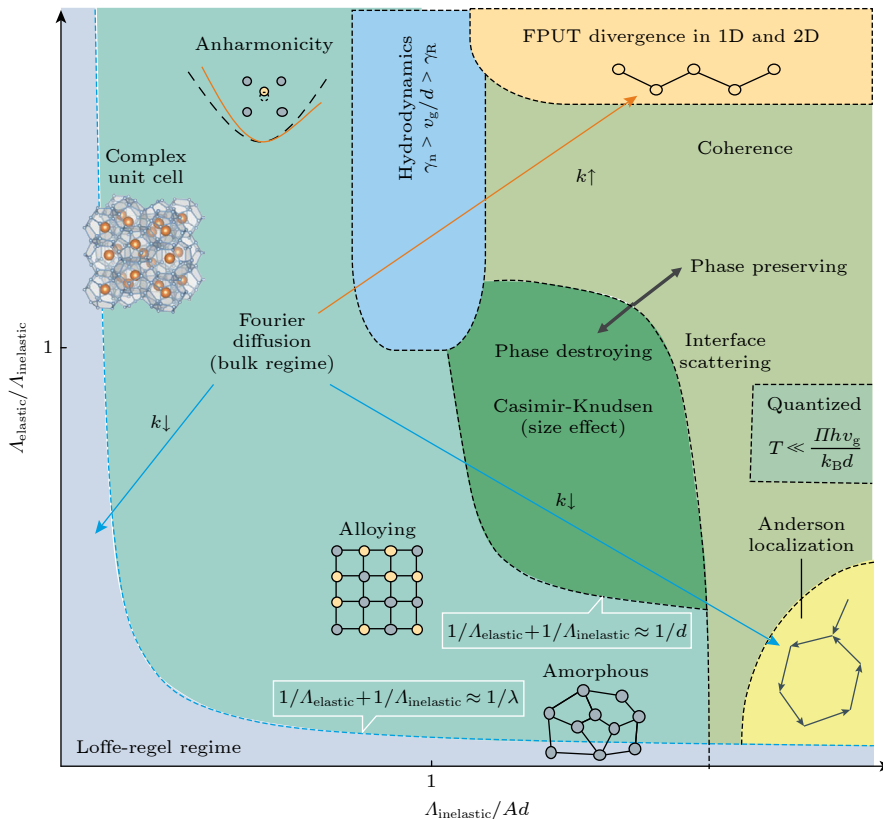


图 13 热传导模式概述 [81]

Fig. 13. Overview of heat conduction mode [81].

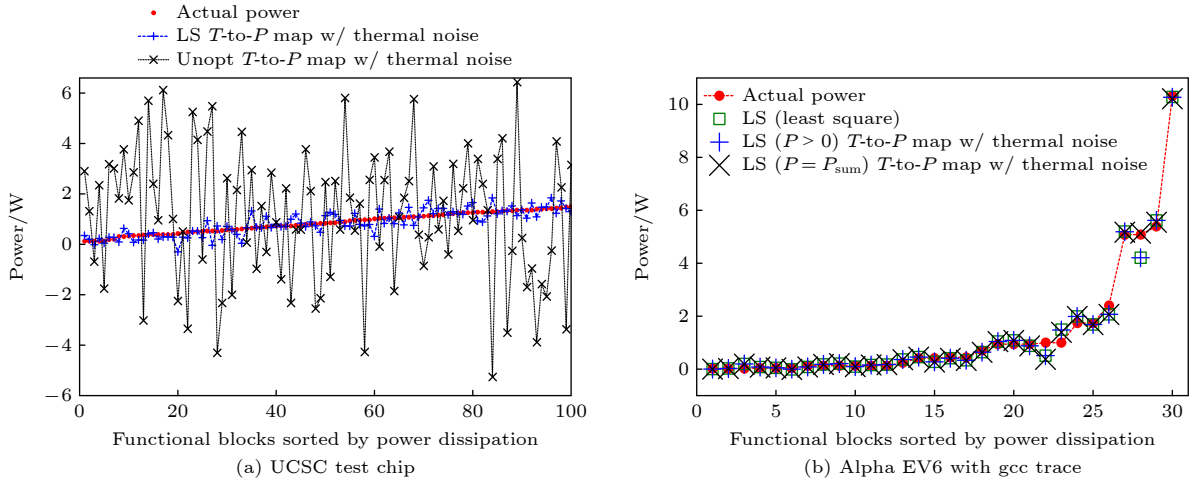


图 14 稳态反演映射<sup>[82]</sup>

Fig. 14. Steady-state inversion mapping<sup>[82]</sup>.

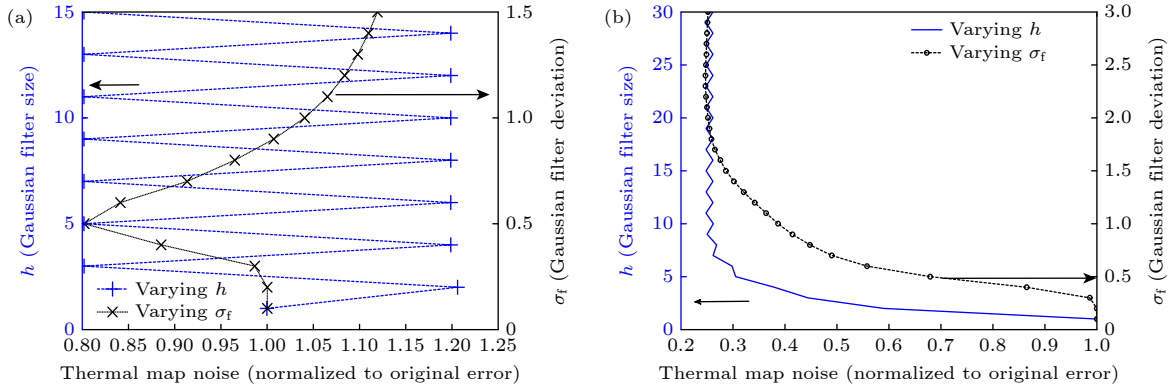


图 15 不同噪声下高斯滤波器参数影响<sup>[82]</sup> (a) 热噪声,  $\mu = 0, \sigma = 5\%$ ; (b) 热噪声,  $\mu = 0, \sigma = 25\%$

Fig. 15. The influence of Gaussian filter parameters under different noise conditions<sup>[82]</sup>: (a) Thermal noise,  $\mu = 0, \sigma = 5\%$ ; (b) thermal noise,  $\mu = 0, \sigma = 25\%$ .

例如, 热界面材料随着使用年限、温度循环、机械应力变化而性能退化. 这使得模拟输出结果的可信度受到制约. 业界报道热界面材料已成为“热路径”中不可忽视的瓶颈. 如图 14 和图 15 所示, 带热噪声时功率反演的误差更加明显, 且参数的选择越糟糕, 对误差的影响越大, 功率地图与界面参数的不确定性会被热问题放大, 导致反演或预测结果对噪声高度敏感. 由此可见, 在模拟技术层面, 要实现“数小时内预测全芯片瞬态温度场”的目标, 仍需克服上述三大挑战.

## 4.2 实验瓶颈

从实验测量的视角, 也存在多重制约因素: 空间/时间分辨率难以兼顾、高热流密度条件下实验可靠性差、TBR 测量成本与重复性问题突出. 对于热点尺度小于  $1 \mu\text{m}$ 、温度突变时间小于  $1 \mu\text{s}$  的场

景, 目前红外热成像、热反射法、拉曼光谱等技术难以在同一实验中同时达到极致空间与时间分辨率. 如图 16 所示, 比较了不同热测量方法可测量的长度尺度和可以达到的温度. 热反射技术在测量微纳米级特性 (如 TBR) 方面表现出色, 其可测温度范围主要受换能器材料稳定性、氧化及界面扩散等因素的影响, 而非技术原理本身的限制. 即使采用熔点较低的铝作为换能器, 在适当的实验条件下, 热反射测量仍可稳定工作至约  $300 \text{ }^\circ\text{C}$ , 该温度范围已覆盖大多数芯片及微电子器件的实际应用需求. 红外成像受限于波长而分辨率常在数微米级, 而拉曼方法虽可达微米级, 但扫描速度慢、不适合大面积实时监测. 在处理动态负载与热点快速变化时, 当前测温技术仍存在着一定的局限性<sup>[80]</sup>. 而当功率密度超过千瓦每平方厘米级别 (如 3D 堆叠高带宽存储器场景), 实验样本极易因热失控被

毁. 流体冷却、微通道沸腾实验亦存在液气界面不稳定、冷却液分配不均匀等问题, 从而影响测量重复性与可靠性<sup>[83]</sup>. 薄膜热导率、TBR 等关键热物性参数通常借助  $3\omega$ , TDTR 等技术获得. 尽管相关实验设备成本较高、对实验条件和操作规范要求较严, 但在合理的实验设计和不确定度控制下, 这些方法具有良好的重复性和可靠性, 已被广泛用于热运输模型的标定与验证<sup>[84]</sup>. 因此, 在实验平台建设与测量体系完善方面, 亟需更高分辨率、更高可靠性且成本可控的技术突破.

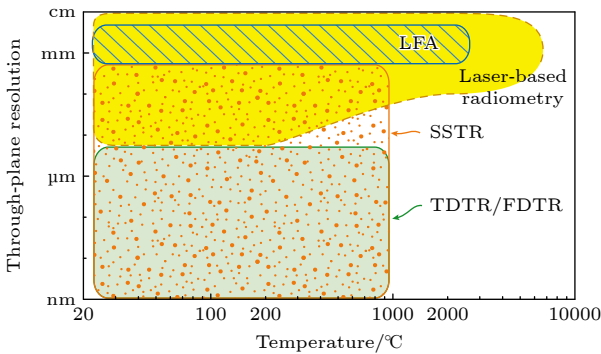


图 16 非接触热运输测量的状态图<sup>[85]</sup>

Fig. 16. State diagram of non-contact thermal transport measurement<sup>[85]</sup>.

### 4.3 系统级瓶颈

从系统级来看, 传统风冷/热管系统已接近其物理极限, 而新型冷却方案的工程化难度依然较大. 随着热流密度跨越千瓦每平方米, 依赖空气或热管的散热路径渐失效. 微通道液冷、浸没式冷却虽具备更高效热通道, 但其在封装、可靠性、维护、成本等方面尚未广泛进入量产环节<sup>[86]</sup>.

值得指出的是, 系统级冷却方案的选择不仅取决于其换热能力, 还受到压降与泵功消耗、长期运行可靠性以及可量产性的多重工程约束. 如已有超过 20% 的高性能计算系统开始部署直接液冷或浸没式冷却以应对功耗密度持续上升的趋势, 但与此同时, 液冷系统往往引入额外的泵功耗与维护复杂度, 需要在“温升控制-能效约束”之间权衡. 进一步地, 嵌入式微通道冷却在实验条件下已实现高达  $3000 \text{ W/cm}^2$  量级的热通量能力, 同时泵功密度约为  $0.9 \text{ W/cm}^2$ <sup>[78]</sup>, 但其压降、堵塞风险及封装协同制造难度仍是限制其规模化应用的关键因素<sup>[87]</sup>. 因此, 在芯片热设计模拟中, 冷却方案应被视为边界条件模型, 并将泵功、可靠性与封装兼容性作为

系统级优化约束纳入设计决策.

如图 17 所示, 嵌入式微通道冷却通过将微尺度液冷通道直接集成于芯片封装背面或中介层, 实现冷却液与热点区域的紧密接触, 极大缩短热路径并降低热阻. 这种集成结构是未来“冷却-封装-芯片协同优化”体系设计的关键支撑, 有望克服传统风冷/热管方案的物理极限. 热管理已不再是后设计阶段的附加选项, 而应在芯片架构、封装、系统冷却一体化时并行考虑. 但目前多数设计流程仍将热设计作为后续校正环节, 导致热路径被动、优化余地缩小. 业内评论称, “热管理已成为先进封装的决定性因素”. 综上, 系统级瓶颈要求从“冷却技术可行性”迈向“冷却-封装-芯片协同优化”新阶段.

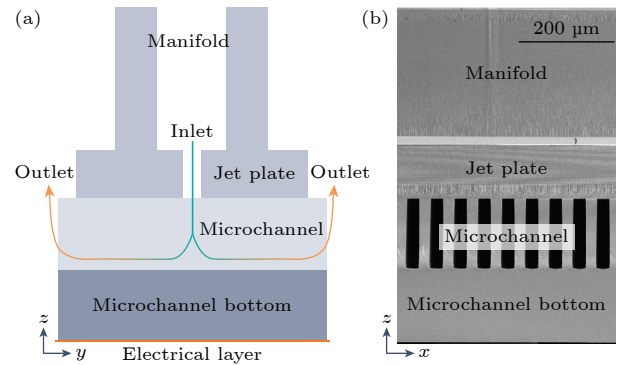


图 17 3D 嵌入式微通道示意图<sup>[88]</sup>

Fig. 17. 3D embedded microchannel diagram<sup>[88]</sup>.

## 5 潜在研究方向

随着芯片功率密度不断攀升、封装形态向 3D 异构集成快速演化, 传统的热管理框架已难以满足未来高性能计算、人工智能及 6G 通信等场景的苛刻需求. 为突破第 4 节所述的模拟、实验与系统三重瓶颈, 未来研究需从理论建模、散热材料、冷却结构, 以及设计范式革新等多方向协同推进.

### 5.1 新型模拟技术

未来的热模拟将从传统基于偏微分方程的“求解器逻辑”, 逐步向数据驱动的“预测器逻辑”过渡. 深度学习代理模型可通过学习大量 FEM, CFD 或 BTE 数据, 实现跨材料、跨几何结构的快速温度场生成, 图 18 描述了基于图神经网络的多尺度热建模. 已有研究证明, UNet、图神经网络等结构已可在保持约 95% 精度的情况下, 将计算速度提高

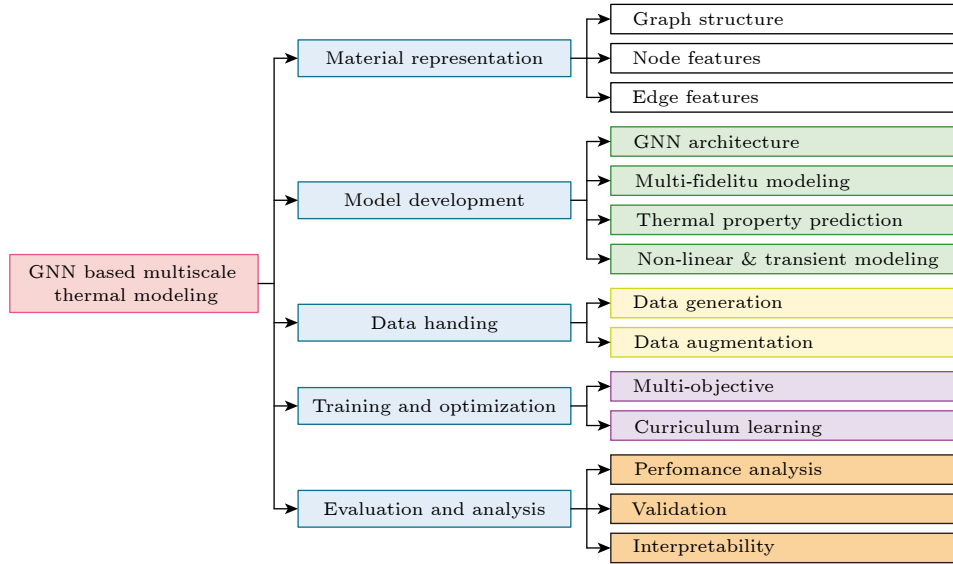


图 18 层级结构<sup>[90]</sup>

Fig. 18. Hierarchical structure<sup>[90]</sup>.

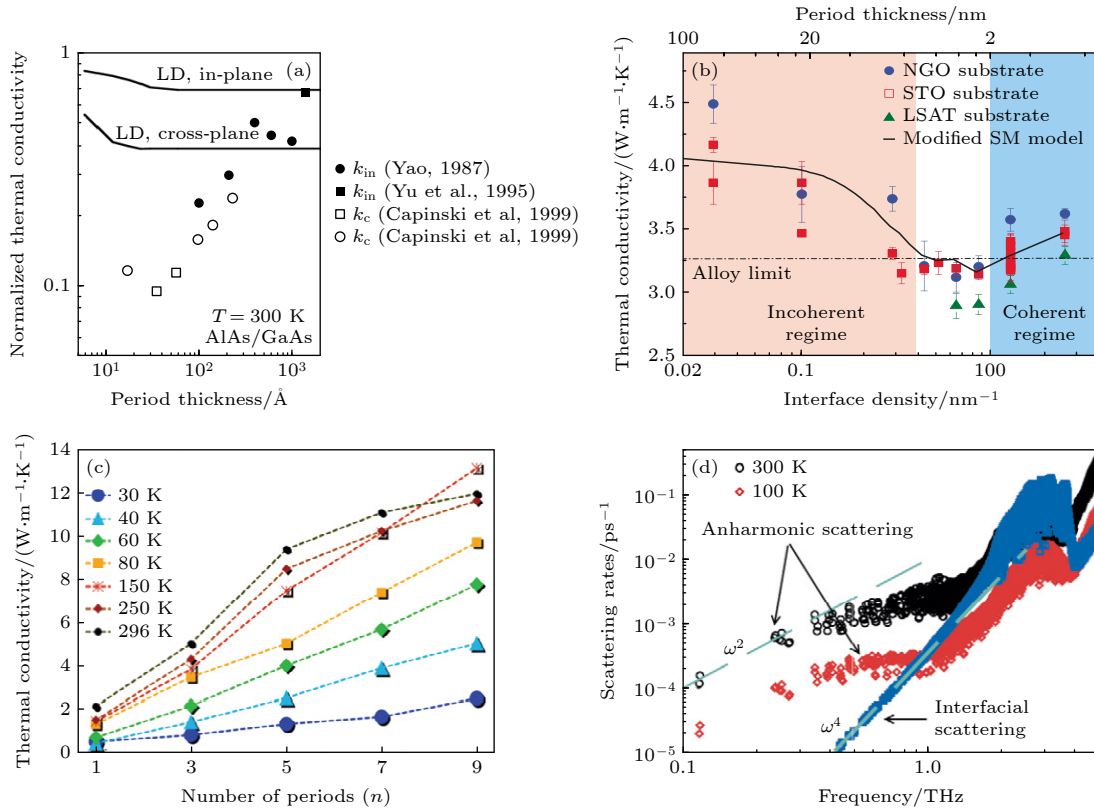


图 19 相干声子输运 (a) 晶格动力学模拟理想晶格热导率的过程 (考虑了声子色散变化, 包括群速度、限制和隧穿效应) 在垂直平面和水平方向上的结果 (实线)<sup>[91]</sup>; 这些模拟结果与实验数据 (方块和圆圈) 不符<sup>[92-94]</sup>; (b)  $\text{SrTiO}_3/\text{CaTiO}_3$  氧化物超晶格的热导率随界面密度变化; (c) 具有固定周期厚度单周期数增加的 GaAs/AlAs 超晶格的热导率; (d) GaAs/AlAs 超晶格中声子的第一性原理散射模拟<sup>[81]</sup>

Fig. 19. Coherent phonon transport: (a) The process of calculating the ideal lattice thermal conductivity through lattice dynamics simulation (group velocity, confinement and tunnelling effects included) in both the cross- plane and in- plane directions (solid lines)<sup>[91]</sup>; these simulations do not agree with experimental data (squares and circles)<sup>[92-94]</sup>; (b) the thermal conductivity of the  $\text{SrTiO}_3/\text{CaTiO}_3$  oxide superlattice varying with the interface density; (c) the thermal conductivity of the GaAs/AlAs superlattice with a fixed periodic thickness and an increase in the number of single periods; (d) the first-principles phonon scattering simulation in the GaAs/AlAs superlattice<sup>[81]</sup>.

$10^3$ — $10^4$  倍<sup>[88]</sup>. 这种“端到端热分析”能力, 将使芯片热设计首次具备实时性, 从而支持运行时动态温控与在线优化. 另一方面, 随着器件尺寸进一步逼近数十纳米, 声子相干、非局域导热等量子效应逐渐增强. 当前以弛豫时间近似为基础的 BTE 模型难以全面描述声子干涉与量子边界散射现象, 因此构建与第一性原理 (如 DFT, DFPT) 耦合的量子化热模拟框架, 将成为下一阶段的重要方向. 如 Chen<sup>[89]</sup> 提出的声子谱建模方法正在被进一步扩展, 用于预测超晶格、二维材料界面的相干热运输. 如图 19 所示, 展示了相干声子输运的试验结果. 此类高精度模型将为先进封装结构的最优设计提供物理基础.

## 5.2 先进冷却技术

散热方式方面, 从传统“芯片表面散热”向“芯片内部主动散热”的转变已成为趋势. 嵌入式微通道液冷通过直接在硅片内刻蚀微通道结构, 使冷却液体流道与芯片发热区之间的传热路径大幅减小. 在已有实验研究中, 通常以去离子水或介电冷却液作为冷却介质, 在可控流量和压降条件下, 对集成加热器的硅基测试芯片进行稳态或瞬态热测试. 结

果表明, 在特定微通道几何结构与泵功输入条件下, 该方案可在实验室环境中实现超过  $1 \text{ kW/cm}^2$  的等效散热能力. 相关研究同时报告了对应的压降范围、泵功需求以及芯片结构参数, 并通过重复实验验证了测量结果的可重复性<sup>[62]</sup>. 两相流冷却 (如微喷射蒸发) 也因其高汽化潜热而具备极高的换热效率, 被认为是未来高热流密度器件的关键技术<sup>[95]</sup>. 然而, 液冷组件与芯片的共设计、可靠性保障以及长期密封性问题仍需深入研究. 同时, 新型高导热材料 (如石墨烯、六方氮化硼、MXene 及其复合材料) 正不断突破热扩散极限. 例如六方氮化硼在面内方向可实现超过  $400 \text{ W/(m}\cdot\text{K)}$  的导热率, 使其成为 TIM、散热片以及界面填料的理想候选材料<sup>[96,97]</sup>.

已有研究人员对石墨烯与氮化硼材料进行了细致的研究. 如图 20 所示, 材料的结构与结果分析有效地解释了石墨烯材料如何提升散热性能. 为进一步理解石墨烯/氮化硼异质界面中声子输运特性的各向异性及其对热传导行为的影响, 已有研究从声子振动模式角度对该体系进行了分析, 对 75 nm 长的系统进行声子功率谱的分析, 绘制了声子分波态密度 (partial density of states, PDOS) 曲线. 图 21 为碳和氮化硼原子在前向和后向方向

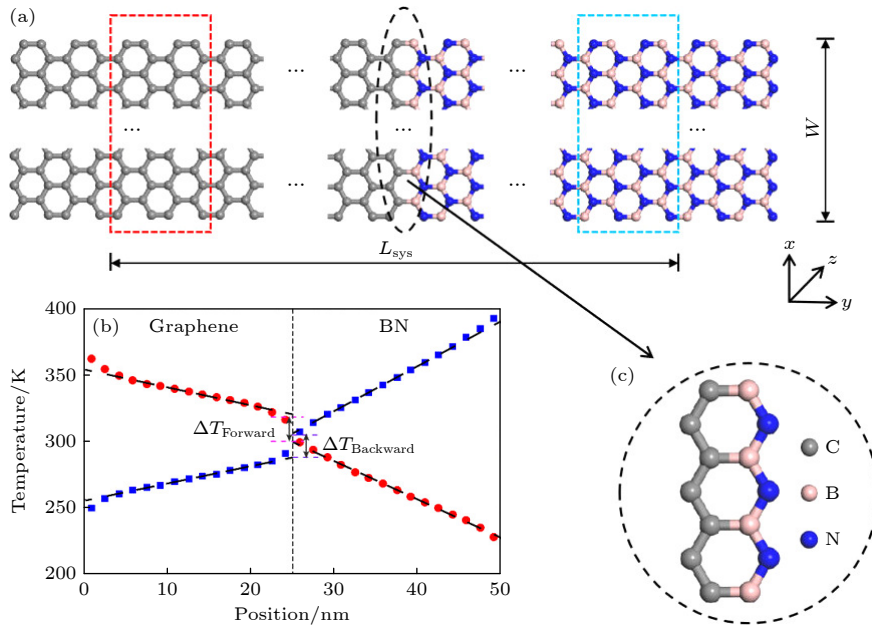


图 20 (a) 纳米片热二极管仿真系统, 该系统由以相同比例连接的石墨烯和 BN 构成, 红色和蓝色虚线分别表示加热区域和冷却区域, 热量从石墨烯流向 BN (正向) 或从 BN 流向石墨烯 (反向); (b) 50 nm 长系统稳态温度剖面, 红色数据点代表正向方向, 而蓝色数据点代表反向方向; (c) C—B—N 键形成界面<sup>[98]</sup>

Fig. 20. (a) Nanosheet thermal diode simulation system, it is formed by connecting the graphene and boron nitride (BN) in equal proportion, red and blue dashed lines represent heating area and cooling area, respectively, heat flows from graphene to BN (forward) or from BN to graphene (backward); (b) steady-state temperature profile of the 50 nm-long system, the red data points represent the forwards direction, while the blue ones represent the backwards direction; (c) interface of C—B—N bond formation<sup>[98]</sup>.

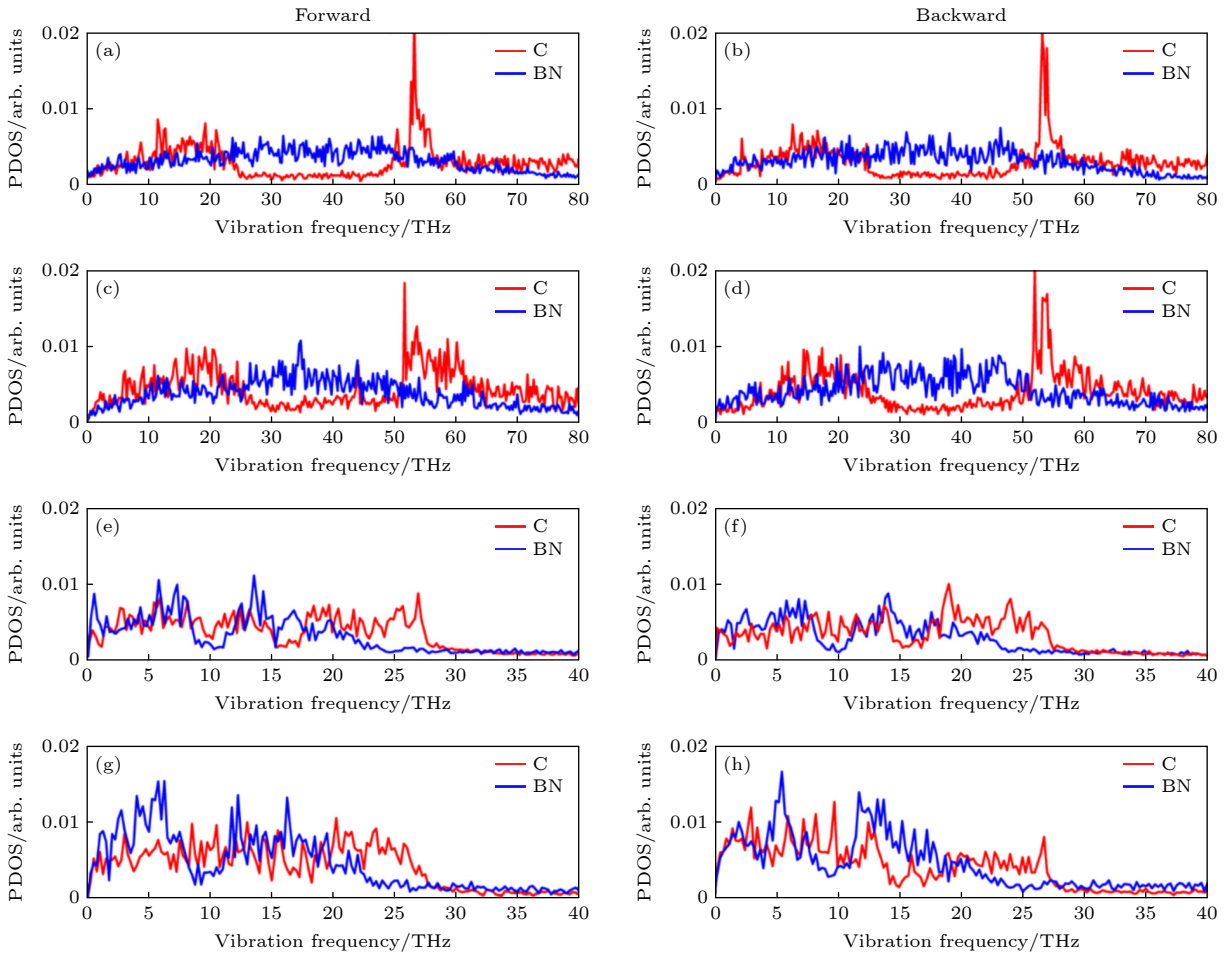


图 21 碳和氮化硼原子在前向和后向方向的 PDOS 曲线<sup>[98]</sup> (a), (b) 中间区域的面内方向; (c), (d) 界面处的面内方向; (e), (f) 中间区域的面外方向; (g), (h) 界面处的面外方向

Fig. 21. PDOS curves of carbon and boron nitride atoms in the forward and backward directions<sup>[98]</sup>: (a), (b) In-plane direction of the middle region; (c), (d) in-plane direction at the interface; (e), (f) out-of-plane direction of the middle region; (g), (h) out-of-plane direction at the interface.

的 PDOS 曲线, 声子功率谱与 PDOS 分析表明, 面内方向上不同原子位置的振动模式在正反向传热过程中基本一致, 说明面内声子对方向相关热运输的贡献有限. 相比之下, 界面区域面外声子振动模式在不同传热方向上表现出明显差异, 反映出界面处声子耦合与失配特征对热运输行为具有重要影响. 上述结果表明, 石墨烯/氮化硼异质界面处声子振动模式在不同传热方向上的不匹配会影响界面热传导行为, 并在特定尺度下表现为方向相关的热运输特征. 这一现象本质上反映了界面声子耦合机制在热传导调控中的重要作用<sup>[98]</sup>. 未来的材料研究将围绕界面工程、取向调控和缺陷调控展开, 以提高其在封装体系中的可集成性与长期稳定性.

从工程角度看, 该研究强调了界面声子工程在二维材料热管理中的潜在价值. 尽管热整流本身并非芯片散热的直接目标, 但界面处面外声子模式的

调控为降低界面热阻、优化各向异性热扩散路径提供了物理依据, 对石墨烯及相关二维材料在芯片级散热与封装应用中的结构设计具有启示意义.

### 5.3 多物理场协同优化

长期以来, 热设计往往被放置在后期校正阶段, 导致芯片架构与散热方案存在天然脱节. 未来, 热管理将系统性地融入早期设计阶段, 从晶体管、电路、布局布线到封装冷却均需实现“热意识”协同. 例如, 通过温度敏感区域的布局优化、减少热点耦合、调控 TSV 密度及位置等, 都可有效降低芯片的整体热阻. 此外, 通过优化电-热-力多场耦合关系, 还可提升互连线与焊点的热可靠性. 许多研究指出, 通过热与电性能的协同优化, 不仅可将芯片寿命提升 20%—30%, 还可有效缓解动态热管理策略所引起的频率降级<sup>[41,99]</sup>.

## 5.4 高时空分辨率实验与片上传感器网络

在实验表征方面,未来测量技术将朝着“高空间分辨率、可集成化以及低功耗”的方向持续发展.一方面,基于飞秒激光的超快泵浦-探测技术结合同步辐射等先进光谱手段,有望将时间分辨率提升至皮秒甚至亚皮秒量级,并将空间分辨率推进至百纳米尺度,从而实现器件内部瞬态热输运过程的直接观测.另一方面,基于电子显微镜的高空间分辨实验技术近年来展现出独特优势,例如结合STEM-EELS的声子谱与能量分布测量方法,可在纳米甚至亚纳米尺度上表征界面附近的局域热输运行为,为理解复杂杂质结构中的界面热阻与非均匀热扩散提供了新的实验途径.

此外,随着微纳加工与传感技术的进步,可集成的片上传感器阵列和分布式温度传感网络逐步实现对器件运行状态下温度场的原位、实时监测.这类实验数据不仅能够用于验证多尺度热输运模型,还可为基于人工智能的热预测与优化算法提供持续更新的在线数据支撑,从而构建“测量-模拟-控制”相结合的闭环热管理体系,为高功率密度芯片和先进封装结构的热可靠性设计提供新的解决思路.

## 5.5 沸腾散热技术

近年来,基于相变传热机理的沸腾散热技术因其超高传热系数和潜在的极限热流密度承载能力,被认为是应对未来超高功率芯片热管理需求的重要候选方案之一<sup>[100-103]</sup>.相较于单相液冷或传统空气冷却方式,沸腾过程中液-汽相变所释放的潜热可显著降低器件结温,并在单位面积内实现数量级提升的散热能力,因而在高性能计算芯片、功率电子器件以及三维集成封装中逐渐受到关注.

在芯片尺度应用中,研究者围绕表面工程与沸腾强化机制开展了大量探索工作.通过在加热表面构筑微纳结构、多孔涂层或仿生润湿梯度,可有效调控气泡成核行为、促进液体补给并延迟干涸现象,从而提升临界热流密度并降低界面热阻<sup>[101,102,104]</sup>.同时,将沸腾过程与微通道冷却结构相结合,也被认为是适配芯片高集成封装的重要方向,其在有限空间内兼顾高换热能力与系统紧凑性的潜力尤为突出.

另一方面,随着先进封装技术向芯粒化和3D堆叠演进,局部热点密集分布、界面层增多以及热-

流-力-电多物理场耦合效应显著增强,使得沸腾散热在实际系统中的应用仍面临诸多挑战<sup>[105,106]</sup>.例如,气泡动力学在微尺度受限空间内的演化规律尚缺乏统一理论描述;多层封装结构中界面热阻对沸腾稳定性的影响仍有待定量评估;长期运行条件下表面微结构的可靠性、污染与退化问题亦成为制约工程化应用的重要因素<sup>[107,108]</sup>.

从未来研究方向来看,沸腾散热技术的发展亟需与多尺度建模和智能优化设计深度融合<sup>[104,109]</sup>.一方面,应加强对微纳尺度气泡成核、相界面传热以及流动不稳定性的基础理论研究,并与高分辨实验手段相结合,以构建可用于器件级预测的物理模型<sup>[110]</sup>;另一方面,结合机器学习方法进行表面结构反演设计、冷却通道拓扑优化及运行工况调控,有望突破传统经验驱动的设计范式<sup>[111,112]</sup>.此外,将沸腾散热与先进热界面材料、嵌入式冷却结构以及系统级热管理架构协同考虑,也将成为面向下一代高功率芯片的重要研究趋势.

## 6 总结

随着集成电路技术持续向高功率密度、3D封装与异构集成演进,芯片热设计已成为影响器件性能、可靠性和寿命的核心瓶颈.本文系统综述了芯片热管理领域的主要数值模拟方法及实验测量技术,分析了从宏观封装到纳米界面的多尺度热输运机理,归纳了当前在计算规模、多物理场耦合、TBR测量以及高热流密度冷却方案中的关键挑战.面向未来,AI加速的多尺度建模、量子化热输运模拟、嵌入式冷却结构、新型高导热材料及多物理场协同设计将共同推动芯片热管理从经验驱动走向智能化与预测驱动.总体而言,模拟-实验深度融合以及架构-封装-散热协同优化,将构成下一代高性能电子系统热管理的必由路径.

感谢天津国家超级计算中心、天河新一代超级计算机以及曙光智能计算西安中心提供的计算平台.

## 参考文献

- [1] Li Z Y, Luo H L, Jiang Y G, Liu H C, Xu L, Cao K Y, Wu H J, Gao P, Liu H 2024 *Appl. Therm. Eng.* **251** 123612
- [2] Wang Z Q, Dong R, Ye R H, Singh S S K, Wu S F, Chen C X 2024 *Int. J. Heat Mass Transfer* **235** 126212
- [3] Wei H, Ghosh S, Velusamy S, Sankaranarayanan K,

- Skadron K, Stan M R 2006 *IEEE Trans. VLSI Syst.* **14** 501
- [4] Zhu L J, Chang K, Petranovic D, Sinha S, Yu Y S, Lim S K 2020 *International Symposium on Physical Design* Taipei, China, September 20–23, 2020 p39
- [5] Barber J, Sefiane K, Brutin D, Tadrif L 2009 *Appl. Therm. Eng.* **29** 1299
- [6] Xia Y L, Sheng Y F, Jia R, Xu J X, Bao H 2025 *APL Electron. Device* **1** 036115
- [7] Péraud J P M, Hadjiconstantinou N G 2011 *Phys. Rev. B* **84** 205331
- [8] Lindsay L 2016 *Nanoscale Microscale Thermophys. Eng.* **20** 67
- [9] Xiao H P, Cao W, Ouyang T, Guo S M, He C Y, Zhong J X 2017 *Sci. Rep.* **7** 45986
- [10] Wang Z L, Chen G F, Zhang X L, Tang D W 2021 *Phys. Chem. Chem. Phys.* **23** 1627
- [11] Yang L, Yang B S, Li B W 2023 *Phys. Rev. B* **108** 165303
- [12] Wei B, Luo W, Du J, Ding Y, Guo Y, Zhu G, Zhu Y, Li B 2024 *SusMat* **4** e239
- [13] Ma Z H, Zhao D, She C, Yang Y, Yang R 2021 *Mater. Today Phys.* **20** 100465
- [14] Zhao D L, Qian X, Gu X K, Jajja S A, Yang R G 2016 *J. Electron. Packag.* **138** 040802
- [15] Gu X K, Yang R 2014 *Appl. Phys. Lett.* **105** 131903
- [16] Gu X K, Wei Y J, Yin X B, Li B W, Yang R G 2018 *Rev. Mod. Phys.* **90** 041002
- [17] Liu T H, Zhou J W, Xu Q, Qian X, Song B, Yang R G 2022 *Mater. Today Phys.* **22** 100598
- [18] Hu S, Zhao C Y, Gu X K 2024 *Int. J. Therm. Sci.* **196** 108725
- [19] Yan S S, Wang Y, Tao F, Ren J 2022 *J. Phys. Chem. A* **126** 8771
- [20] Li W, Carrete J, A. Katcho N, Mingo N 2014 *Comput. Phys. Commun.* **185** 1747
- [21] Togo A 2023 *J. Phys. Soc. Jpn.* **92** 1
- [22] Togo A, Chaput L, Tadano T, Tanaka I 2023 *J. Phys. : Condens. Matter* **35** 353001
- [23] Tadano T, Gohda Y, Tsuneyuki S 2014 *J. Phys. : Condens. Matter* **26** 225402
- [24] Kresse G, Furthmüller J 1996 *Phys. Rev. B* **54** 11169
- [25] Kim J, Liu Y H, Luo T F, Tian Z T 2025 *ASME J. Heat Mass Transfer* **147** 030801
- [26] Chu Y C, Shi J J, Miao K, Zhong Y, Sarangapani P, Fisher T S, Klimeck G, Ruan X L, Kubis T 2019 *Appl. Phys. Lett.* **115** 231601
- [27] Feng T L, Zhong Y, Shi J J, Ruan X L 2019 *Phys. Rev. B* **99** 045301
- [28] Lindsay L, Hua C, Ruan X L, Lee S 2018 *Mater. Today Phys.* **7** 106
- [29] Polanco C A, Lindsay L 2019 *Phys. Rev. B* **99** 075202
- [30] Dong H K, Fan Z Y, Qian P, Su Y J 2022 *Physica E* **144** 115410
- [31] Córcoles A D, Chow J M, Gambetta J M, Rigetti C, Rozen J R, Keefe G A, Beth Rothwell M, Ketchen M B, Steffen M 2011 *Appl. Phys. Lett.* **99** 181906
- [32] Chen L, Kumari N, Chen S T, Hou Y 2017 *RSC Adv.* **7** 26194
- [33] Bao W, Wang Z, Tang D 2022 *Int. J. Heat Mass Transfer* **183** 122090
- [34] Soleimani A, Araghi H, Zabihi Z, Alibakhshi A 2018 *Comput. Mater. Sci.* **142** 346
- [35] Zeng J Z, Zhang D, Lu D H, Mo P H, Li Z Y, Chen Y X, Rynik M, Huang L A, Li Z Y, Shi S C, Wang Y Z, Ye H T, Tuo P, Yang J B, Ding Y, Li Y F, Tisi D, Zeng Q Y, Bao H, Xia Y, Huang J M, Muraoka K, Wang Y B, Chang J H, Yuan F B, Bore S L, Cai C, Lin Y N, Wang B, Xu J Y, Zhu J X, Luo C X, Zhang Y Z, Goodall R E A, Liang W S, Singh A K, Yao S K, Zhang J C, Wentzcovitch R, Han J Q, Liu J, Jia W L, York D M, E W, Car R, Zhang L F, Wang H 2023 *J. Chem. Phys.* **159** 054801
- [36] Zeng J Z, Zhang D, Peng A Y, et al. 2025 *J. Chem. Theory Comput.* **21** 4375
- [37] Wang H, Zhang L F, Han J Q, E W 2018 *Comput. Phys. Commun.* **228** 178
- [38] Fan Z Y, Wang Y Z, Ying P H, Song K K, Wang J J, Wang Y, Zeng Z Z, Xu K, Lindgren E, Rahm J M, Gabourie A J, Liu J H, Dong H K, Wu J Y, Chen Y, Zhong Z, Sun J, Erhart P, Su Y J, Ala-Nissila T 2022 *J. Chem. Phys.* **157** 114801
- [39] Zhou X Y, Liu Y Q, Tang B R, Wang J Y, Dong H K, Xiu X M, Chen S D, Fan Z Y 2025 *J. Appl. Phys.* **137** 014305
- [40] Dong H K, Shi Y B, Ying P H, Xu K, Liang T, Wang Y Z, Zeng Z Z, Wu X, Zhou W J, Xiong S Y, Chen S D, Fan Z Y 2024 *J. Appl. Phys.* **135** 161101
- [41] Li C Y, Zhang T C, Bao H G, Cheng A Q, Chen D J, Wang C F, Ding D Z, Werner D H 2025 *IEEE Trans. Microwave Theory Tech.* **73** 812
- [42] Li Q S, Liu F, Hu S, Song H F, Yang S S, Jiang H L, Wang T, Koh Y K, Zhao C Y, Kang F Y, Wu J Q, Gu X K, Sun B, Wang X Q 2022 *Nat. Commun.* **13** 4901
- [43] Zhou H, Zhu H L, Cui T, Pan D Z, Zhou D, Zeng X 2018 *IEEE Trans. VLSI Syst.* **26** 1312
- [44] Gabourie A J, Polanco C A, McClellan C J, Su H, Malakoutian M, Çağil K, Chowdhury S, Donadio D, Pop E 2024 *IEEE International Electron Devices Meeting* San Francisco, USA, December 7–11, 2024 p1
- [45] Peng J Z, Aubry N, Li Y B, Mei M, Chen Z H, Wu W T 2023 *Int. J. Heat Mass Transfer* **216** 124593
- [46] Zhao X Y, Gong Z Q, Zhang Y Y, Yao W, Chen X Q 2023 *Eng. Appl. Artif. Intell.* **117** 105516
- [47] Manavi S, Becker T, Fattahi E 2023 *Int. Commun. Heat Mass Transfer* **142** 106662
- [48] Cai S Z, Wang Z C, Wang S F, Perdikaris P, Karniadakis G E 2021 *J. Heat Transfer* **143** 125089
- [49] Sanchis-Alepuz H, Stipsitz M 2022 *IEEE Design Methodologies Conference* Bath, United Kingdom, September 1–2, 2022 p1
- [50] Lu X Y, Wang Y 2024 *Proc. Combust. Inst.* **40** 105282
- [51] Meethal R E, Kodakkal A, Khalil M, Ghantasala A, Obst B, Bletzinger K U, Wüchner R 2023 *Adv. Model. Simul. Eng. Sci.* **10** 6
- [52] Mejail M 2025 *Int. Acad. J. Innov. Res.* **12** 43
- [53] Reiser P, Aguilar J E, Guthke A, Bürkner P C 2025 *Stat. Comput.* **35** 66
- [54] Westermann P, Evins R 2021 *Energy AI* **3** 100039
- [55] Nemani V, Biggio L, Huan X, Hu Z, Fink O, Tran A, Wang Y, Zhang X, Hu C 2023 *Mech. Syst. Signal Process.* **205** 110796
- [56] Li Y F, Xiang Y Y, Shi L J, Pan B S 2024 *J. Zhejiang Univ. Sci. A* **25** 922
- [57] Fedorets A A, Dombrovsky L A, Smirnov A M 2015 *Infrared Phys. Technol.* **69** 238
- [58] Cahill D G, Goodson K, Majumdar A 2001 *J. Heat Transfer* **124** 223
- [59] Thorne S A, Ippolito S B, Ünlü M S, Goldberg B B 2002 *MRS Online Proc. Libr.* **738** 129

- [60] Kim S H, Noh J, Jeon M K, Kim K W, Lee L P, Woo S I 2006 *J. Micromech. Microeng.* **16** 526
- [61] Zhang Y C, Ding C X, Feng R, Bi K X, Geng W P, Chou X J 2024 *Measurement* **226** 114125
- [62] Li X, Li Z, Zhou W, Duan Z M 2020 *IEEE Trans. VLSI Syst.* **28** 2328
- [63] Cahill D G 1990 *Rev. Sci. Instrum.* **61** 802
- [64] Dames C 2013 *Annu. Rev. Heat Transfer* **16** 7
- [65] Zhao Y S, Liu D, Chen J, et al. 2017 *Nat. Commun.* **8** 15919
- [66] Cahill D G 2018 *MRS Bull.* **43** 782
- [67] Jiang P Q, Qian X, Yang R G 2018 *J. Appl. Phys.* **124** 161103
- [68] Feser J P, Cahill D G 2012 *Rev. Sci. Instrum.* **83** 104901
- [69] Wilson R B, Apgar B A, Martin L W, Cahill D G 2012 *Opt. Express* **20** 28829
- [70] Jiang P Q, Huang B, Koh Y K 2016 *Rev. Sci. Instrum.* **87** 075101
- [71] Atulasimha J, Akhras G, Flatau A B 2008 *J. Appl. Phys.* **103** 07B336
- [72] Schmidt A J, Cheaito R, Chiesa M 2009 *Rev. Sci. Instrum.* **80** 094901
- [73] Regner K T, Sellan D P, Su Z, Amon C H, McGaughey A J H, Malen J A 2013 *Nat. Commun.* **4** 1640
- [74] Yang J, Maragliano C, Schmidt A J 2013 *Rev. Sci. Instrum.* **84** 104904
- [75] Olson D H, Braum J L, Hopkins P E 2019 *J. Appl. Phys.* **126** 150901
- [76] Mao R L, He P Y, Liu F C, Shi R C, Du J L, Gao P 2025 *ACS Nano* **19** 20269
- [77] Xu Q, Liu W Z, Li W S, Yao T, Chu X N, Guo L J 2019 *Int. J. Heat Mass Transfer* **145** 118779
- [78] Wu Z H, Xiao W, He H Y, Wang W, Song B 2025 *Nat. Electron.* **8** 810
- [79] Islam S, Abdel-Motaleb I 2020 *IEEE International Conference on Electro Information Technology* Chicago, USA, July 31–August 1, 2020 p233
- [80] Dhupal A R, Kulkarni A P, Ambhore N H 2023 *J. Eng. Appl. Sci.* **70** 140
- [81] Chen G 2021 *Nat. Rev. Phys.* **3** 555
- [82] Qi Z Y, Meyer B H, Huang W, Ribando R J, Skadron K, Stan M R 2010 *IEEE International Conference on Computer Design* Amsterdam, Netherlands, October 3–6, 2010 p384
- [83] Ao C, Xu B, Wang X, Chen Z Q 2025 *J. Energy Storage* **135** 118312
- [84] Kim M, Kim J, Park W, Kang J S 2025 *Microelectron. Reliab.* **170** 115782
- [85] Pfeifer T W, Schonfeld H B, Scott E A, Aller H T, Gaskins J T, Olson D H, Braum J L, Graham S, Hopkins P E 2025 *Annu. Rev. Mater. Res.* **55** 37
- [86] Zhang C B, Wang H J, Huang Y P, Zhang L L, Chen Y P 2025 *Renew. Sustain. Energy Rev.* **208** 114989
- [87] Rangarajan S, Schifres S N, Sannakia B 2023 *Engineering* **26** 185
- [88] Yu X, Shiau S-E, Ai X, Zeng Z, Zhang Z 2023 *60th ACM/IEEE Design Automation Conference (DAC)* San Francisco, CA, USA, July 09–13, 2023 pp1–6
- [89] Chen G 2005 *Nanoscale Energy Transport and Conversion: A Parallel Treatment of Electrons, Molecules, Phonons, and Photons* (Oxford: Oxford University Press) pp1–531
- [90] Sarada Devi C H, Sahaaya Arul Mary S A, Karthikeyan N, Varalakshmi S, Talasila V, Rama Naidu G 2024 *Therm. Sci. Eng. Prog.* **55** 102983
- [91] Chen B Y G 2001 *Microscale Thermophys. Eng.* **5** 107
- [92] Yu X Y, Chen G, Verma A, Smith J S 1995 *Appl. Phys. Lett.* **67** 3554
- [93] Yao T 1987 *Appl. Phys. Lett.* **51** 1798
- [94] Capinski W S, Maris H J, Ruf T, Cardona M, Ploog K, Katzer D S 1999 *Phys. Rev. B* **59** 8105
- [95] Zhou J H, Zhou F, Zhao Q, Lu M X, Li Q, Chen X M 2025 *Int. Commun. Heat Mass Transfer* **161** 108555
- [96] Cai Q R, Scullion D, Gan W, Falin A, Zhang S Y, Watanabe K, Taniguchi T, Chen Y, Santos E J G, Li L H 2019 *Sci. Adv.* **5** eaav0129
- [97] Kim J J, Brown A D, Bakis C E, Smith E C 2021 *Compos. Sci. Technol.* **207** 108712
- [98] Sun H B, Jiang Y L, Hua R J, Huang R H, Shi L, Dong Y, Liang S X, Ni J, Zhang C, Dong R Y, Song Y R 2022 *Nanomaterials* **12** 4057
- [99] Baghini M S, Parvizi R, Walton F, Heidari H 2024 *IEEE Trans. Electron Devices* **71** 4203
- [100] Ding T, Chen X X, Li Z Y, Liu H C, Zhu C Y, Zhao T, Li Z, Zhang Y N, Yang J A, Zhang H N, Hou L Y 2025 *Renew. Sustain. Energy Rev.* **215** 115615
- [101] Al-Nagdy A A, Khalaf-Allah R A, Mohamed S M, Saeed E, Abdelaziz G B 2025 *J. Therm. Anal. Calorim.* **150** 20481
- [102] Fan S M, Duan F 2020 *Int. J. Heat Mass Transfer* **150** 119324
- [103] Deng D X, Zeng L, Sun W 2021 *Int. J. Heat Mass Transfer* **175** 121332
- [104] Li P K, Zou Q F, Liu X L, Yang R G 2024 *Natl. Sci. Rev.* **11** nwae090
- [105] Chen Y N, Zhao D Y, Liu F, Gao J, Zhu H 2023 *Microelectron. J.* **139** 105882
- [106] Salvi S S, Jain A 2021 *IEEE Trans. Compon. Packag. Manuf. Technol.* **11** 802
- [107] Guo Y L, Wang S 2025 *Int. Commun. Heat Mass Transfer* **162** 108592
- [108] Chen H X, Sun Y, Li L H, Wang X D 2020 *Int. J. Heat Mass Transfer* **163** 120502
- [109] Chakraborty B, Gallo M, Marengo M, De Coninck J, Casciola C M, Miche N, Georgoulas A 2024 *Int. J. Thermofluids* **22** 100683
- [110] Hu Y, Gao H T, Yan Y Y 2025 *J. Ind. Eng. Chem.* **143** 123
- [111] Kuberan V, Gedupudi S 2025 *Int. J. Heat Mass Transfer* **249** 127163
- [112] Wang J J, Kaneko A, Shen B 2026 *Appl. Therm. Eng.* **283** 129000

SPECIAL TOPIC—Heat conduction and its related interdisciplinary areas

# A review of simulation, measurement techniques, and development in chip thermal design\*

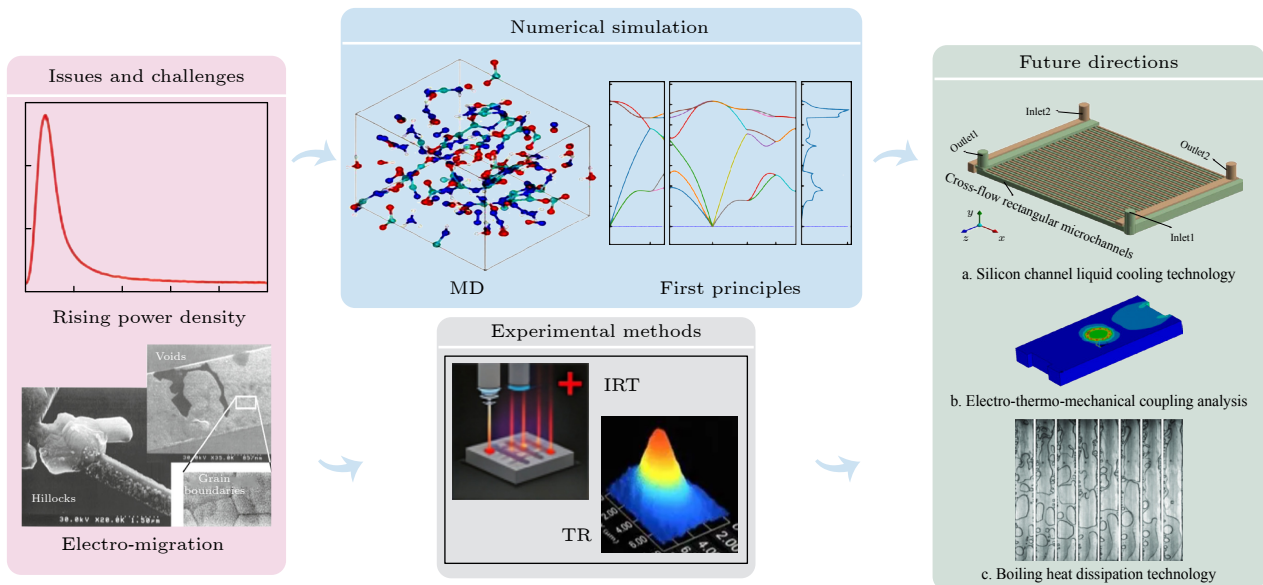
ZHOU Junnian    ZHOU Feng    YUE Shengying<sup>†</sup>

(State Key Laboratory for Strength and Vibration of Mechanical Structure, Xi'an Jiaotong University, Xi'an 710049, China)

( Received 29 December 2025; revised manuscript received 23 February 2026 )

## Abstract

Driven by the rapid evolution of integrated circuits toward higher power density, 2.5D/3D integration, chiplet-based architectures, and heterogeneous packaging, thermal management has emerged as a primary constraint on performance, reliability, and lifetime. This review provides a structured synthesis of the state of the art in chip thermal design by i) organizing numerical models across length scales, ii) summarizing experimental temperature and thermophysical-property characterization methods, and iii) critically analyzing the major bottlenecks that limit predictive accuracy under extreme heat-flux conditions. On the modeling side, we compare fast architecture-level approaches (equivalent RC thermal networks) with high-fidelity package- and system-level solvers (finite-element/finite-volume methods and conjugate heat-transfer CFD), and extend the discussion to micro-/nanoscale heat transport where non-Fourier effects become important, including phonon Boltzmann transport formulations and molecular dynamics for interfacial thermal boundary resistance. On the measurement side, we summarize the operating principles, spatiotemporal resolution, and applicability of infrared thermography, thermoreflectance microscopy, Raman thermometry, and embedded on-chip sensors, and highlight how these techniques are used to calibrate power maps, boundary conditions, and interface parameters for simulation–experiment closed-loop validation. Based on the literature, we identify recurring challenges: the prohibitive cost of full-chip transient multi-physics simulation, uncertainties in material



\* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. GYKP022) and the Young Talent Program of Xi'an Jiaotong University, China (Grant No. LX6J0240001).

<sup>†</sup> Corresponding author. E-mail: [syyue@xjtu.edu.cn](mailto:syyue@xjtu.edu.cn)

properties and interfaces, limited simultaneous spatial and temporal resolution in experiments, and the approaching physical and practical limits of conventional air/heat-pipe cooling. Finally, we discuss emerging directions that can address these gaps, including AI-accelerated surrogate modeling and physics-informed learning for rapid thermal prediction, embedded microchannel and two-phase cooling for ultra-high heat flux, advanced high-thermal-conductivity interface/packaging materials, and multi-physics co-design that couples device, package, and cooling-system optimization.

**Keywords:** chip thermal design, thermal simulation, phonon Boltzmann transport, thermal management

**DOI:** [10.7498/aps.75.20251780](https://doi.org/10.7498/aps.75.20251780)

**CSTR:** [32037.14.aps.75.20251780](https://cstr.cn/32037.14.aps.75.20251780)



## 芯片热设计模拟、测量技术及发展综述

周君年 周烽 岳圣瀛

### A review of simulation, measurement techniques, and development in chip thermal design

ZHOU Junnian ZHOU Feng YUE Shengying

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 75, 070806 (2026) DOI: 10.7498/aps.75.20251780

CSTR: 32037.14.aps.75.20251780

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.75.20251780>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn>

## 您可能感兴趣的其他文章

### Articles you may be interested in

金刚石/碳纳米管异质界面热导及声子热输运特性

Interface thermal conductance and phonon thermal transport characteristics of diamond/carbon nanotube interface

物理学报. 2024, 73(13): 138102 <https://doi.org/10.7498/aps.73.20240323>

低维微纳尺度体系声子热传导和热调控: 来自芯片散热的非平衡统计物理问题

Phononic thermal conduction and thermal regulation in low-dimensional micro-nano scale systems: Nonequilibrium statistical physics problems from chip heat dissipation

物理学报. 2023, 72(23): 234401 <https://doi.org/10.7498/aps.72.20231546>

Au-TiO<sub>2</sub>光电极界面声子热输运特性的分子动力学模拟

Molecular dynamics simulation of thermal transport properties of phonons at interface of Au-TiO<sub>2</sub> photoelectrode

物理学报. 2024, 73(10): 103105 <https://doi.org/10.7498/aps.73.20240026>

等离激元金属-半导体复合电极的界面声子热输运特性

Interfacial phonon thermal transport properties of plasmonic-metal-semiconductor composite electrodes

物理学报. 2025, 74(19): 193101 <https://doi.org/10.7498/aps.74.20250683>

类石墨烯氮化碳结构(C<sub>3</sub>N)热传导机理研究

Thermal conduction mechanism of graphene-like carbon nitride structure (C<sub>3</sub>N)

物理学报. 2023, 72(1): 013102 <https://doi.org/10.7498/aps.72.20221441>

纳米尺度热物理中的声子弱耦合问题

Phonon weak couplings in nanoscale thermophysics

物理学报. 2022, 71(8): 086302 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20220036>