

专题: 热传导及其相关交叉领域研究

## 低维材料中的声子相干热运输与安德森局域化\*

黄晓宇 倪宇翔†

(西南交通大学物理科学与技术学院, 成都 610031)

(2025 年 12 月 30 日收到; 2026 年 2 月 13 日收到修改稿)

固体中的热传导传统上以声子散射主导的扩散机制为基础进行描述. 然而, 随着材料结构特征尺寸不断减小, 热运输逐渐表现出明显的波动特征. 在这种尺度下, 多路径散射引发的相干干涉现象可能导致能量传播被显著抑制, 从而产生类似电子安德森局域化的声子局域化行为. 声子局域化不仅从基础物理角度揭示了热传导的波动本质, 也为通过结构无序调控热传导提供了新的途径. 本综述旨在系统总结低维材料中声子相干热运输及安德森局域化的物理机制、理论方法、材料体系表现及工程应用, 为低维材料及无序体系中的声子热运输研究提供一个整体的认识框架.

**关键词:** 声子相干热运输, 声子安德森局域化, 低维材料**DOI:** 10.7498/aps.75.20251791**CSTR:** 32037.14.aps.75.20251791

## 1 引言

随着微电子器件尺寸的不断缩小以及功率密度的持续提升, 热运输已成为限制器件性能与可靠性的关键因素之一<sup>[1-5]</sup>. 与此同时, 在能源转换领域, 热电材料被视为实现废热回收和提高能源利用效率的重要途径<sup>[6,7]</sup>, 而其效率提升在很大程度上依赖于对晶格热导率的有效调控<sup>[4,7-11]</sup>. 在此背景下, 充分理解材料中的声子输运过程是实现热功能材料和器件优化设计的基础.

声子作为晶格振动的能量子, 是半导体和绝缘体中热运输的主要载体. 传统晶格热输运理论通常基于玻尔兹曼输运方程<sup>[12]</sup>(Boltzmann transport equation, BTE), 在该框架下, 声子被视为粒子, 其输运主要由群速度、散射寿命以及平均自由程所决定. 这一经典图像在体材料中取得了广泛成功<sup>[5,13,14]</sup>. 然而, 随着微纳技术的不断发展, 当材料特征尺度降至与声子平均自由程、波长或相干长度

相当时, 声子的波动属性开始显现<sup>[15-17]</sup>, 经典的粒子输运描述逐渐失效.

在低维材料和纳米结构中, 良好的声子相位关联使得相干热输运成为影响热传导的重要因素, 并表现出很多区别于三维材料的特征, 例如更加明显的弹道输运<sup>[18-23]</sup>, 更加容易受到缺陷等因素影响而发生振动模态的局域化<sup>[20-23]</sup>. 尽管如此, 过去数十年中, 大多数调控晶格热导率的策略仍主要基于声子的非相干性质, 如界面与表面散射增强<sup>[24-26]</sup>、点缺陷引入<sup>[27-29]</sup>以及非简谐散射的强化<sup>[30,31]</sup>等. 这类方法往往依赖于散射强度的增大, 难以在保持材料其他物理性能不变的前提下实现对热运输的精细调控.

相比之下, 基于声子相干性的调控策略为热输运提供了一种以波动性质为核心的新途径, 但其实现条件更为苛刻. 纳米结构的特征尺寸需与室温下声子波长(约 1—10 nm)相当<sup>[32,33]</sup>, 同时界面和边界必须足够平滑以维持声子相位信息<sup>[16,19]</sup>, 这对材料制备和实验表征提出了极高要求. 需要指出的

\* 国家自然科学基金联合基金重点项目(批准号: U2330208)资助的课题.

† 通信作者. E-mail: yuxiang.ni@swjtu.edu.cn

是,实际界面普遍存在的原子级粗糙并不必然导致相干性完全丧失,界面粗糙度参数与声子波长之比  $\delta/\lambda$  有时被用于衡量界面的镜面反射程度,  $\delta/\lambda$  越小,界面的镜面反射越强,越利于声子相干性的保持<sup>[34]</sup>. 自超晶格和声子晶体等人工周期性结构被提出以来<sup>[15-17,32,35-38]</sup>,围绕能带折叠、迷你带隙形成以及群速度调制等来调控声子运输的研究持续发展. 作为一种典型的波动现象,安德森局域化源于无序体系中多重散射引起的相干干涉<sup>[39]</sup>,已在电子和光子体系中得到系统研究. 理论上,声子作为玻色子同样应当表现出类似的局域化行为. 近年来,越来越多的研究在一维和准一维体系<sup>[40,41]</sup>、质量无序掺杂<sup>[23,42]</sup>、非周期超晶格<sup>[43,44]</sup>、多孔纳米材料<sup>[21,22,45,46]</sup>以及复杂界面结构<sup>[47,48]</sup>中观察到声子安德森局域化的迹象,并发现其显著抑制热运输,从而导致晶格热导率大幅降低. 然而,与基于声子相干热运输的综述相比,针对声子安德森局域化及其与相干运输之间内在联系的系统性综述仍相对有限,其理论依据、数值判据以及适用条件等尚待进一步阐述.

基于此,本文以低维材料中的声子相干热运输与声子安德森局域化为核心,围绕超晶格结构与无序结构中声子波动行为的演化展开综述. 首先回顾声子相干运输的理论基础与典型物理图像,重点讨论相位保持条件以及周期性对声子谱的调制作用;随后,系统总结声子安德森局域化的研究进展,包括局域化判据、典型模型体系、与热导率异常衰减之间的关系以及工程应用等. 通过上述综述,本文旨在为理解和调控低维材料中的热运输提供一个以波动相干与局域化为主线的整体认识框架,同时为高效热功能材料和器件的结构设计提供理论参考.

## 2 热运输中的相干声子

### 2.1 声子相干性的物理内涵

在波动理论中,如果不同波在空间和/或时间上保持稳定的相位关系,则称其具有相干性. 晶体中的晶格振动本质上是以布洛赫波形式存在的集体激发,因此在其相干寿命内,声子的振动相位在空间上是严格关联的. 从微观角度看,声子在产生后的有限时间内天然具备相干性. 然而,在传统块材热运输研究中,体系特征尺寸通常远大于声子平

均自由程,声子在传播过程中会经历大量非弹性散射,导致相位信息迅速丧失. 在这一极限下,声子的波动特征可被忽略,热运输问题可简化为随机粒子气体的输运过程,并可由 BTE 在粒子图像下成功描述.

为定量描述声子的相干程度,光学相干理论中相干函数的概念已被 Latour 等<sup>[37,49]</sup>引入到声子体系中,用以表征声子在空间与时间上的相位关联性. 需要强调的是,与光学体系中可直接通过测量发射场来表征相干性不同,声子热运输过程中的相干性长期以来多依赖热导率的异常行为或频谱选择性输运特征等间接证据. 近年来超快光谱学和散射技术的发展使得相干声子的直接观测成为可能. 瞬态光栅<sup>[50]</sup>可直接激发特定波矢的相干声子,极紫外瞬态光栅<sup>[50]</sup>和硬 X 射线瞬态光栅<sup>[51]</sup>进一步将观测尺度推进到纳米级,覆盖声子输运从扩散向弹道转变的关键范围;飞秒泵浦-探测的相干声子光谱<sup>[52]</sup>可直接记录相干声子振荡信号,并可从中直接提取出波包相干时间与相干长度;超快 X 射线<sup>[51]</sup>、电子散射<sup>[53]</sup>则能够在时间和动量空间中解析声子相干振动,实时看到声子波包从产生、传播到衰减的全过程,以及能量如何在不同声子模式之间的重新分配;非弹性中子散射<sup>[54]</sup>的线宽测量则可提供声子寿命作为重要参照.

一般而言,当结构特征尺度与参与热运输的声子波长、相干长度或平均自由程处于同一量级,声子相干性才可能在宏观热运输中显现. 在纳米尺度体系中,声子在经历非弹性散射前可跨越多个结构单元,从而部分甚至整体保留其相位信息,为相干运输提供了必要条件. 需要指出的是,这些波动效应能否在热运输中显现,不仅取决于结构特征与周期性等几何因素,更受到非弹性散射强度的强烈制约.

除常规三声子非谐散射之外,近期研究表明四声子散射在部分低维材料或应变调控体系中会达到不可忽略、甚至占主导的强度<sup>[30,31,55-58]</sup>. 四声子过程会进一步增大声子线宽、缩短寿命,从而显著抑制相干热运输与安德森局域化等的产生,并重新分配不同声子模式的贡献. 在单层石墨烯中<sup>[30]</sup>,由于反射对称性对垂直声学模 (zone-axis Acoustic, ZA) 三声子散射选择定则的限制,四声子 (尤其 ZA) 过程可表现更强散射,导致在纳入四声子后 ZA 支对热运输的相对贡献显著降低. 此外,四声

子散射通过增强材料的内在非谐性,会显著削弱同位素散射对热导率的影响.在AlSb中<sup>[55]</sup>,考虑四声子后同位素效应从83.3%降至3.2%.一般而言,当体系具有特定的声子能带特征(如较大的声支-光学支带隙,声学支群聚或光学支平坦)<sup>[56]</sup>、特殊的结构对称性(如二维镜像反射对称性)<sup>[30,55]</sup>、强非简谐性与局部振动(如LiCu<sub>3</sub>TiQ<sub>4</sub>中<sup>[58]</sup> Cu原子相关的强四阶非谐局域振动),以及高温<sup>[55-57]</sup>或应变<sup>[55,57]</sup>等外部环境调控时,四声子散射更可能成为关键通道.因此,对具备以上特征的材料体系,在讨论声子波动行为时,应将四声子散射纳入统一框架以获得更真实的物理图像.

除上述由相位关联导致的波干涉之外,当声子间散射在一定尺度内足够频繁,并且N(normal)散射在动量交换中占据主导时,声子体系还可能进入一种类流体集体演化特征的输运极限,即声子流体动力学.在这种状态下,声子不再被视为相互独立的随机粒子;相反,各模式之间存在极强的非平衡相关性,使得体系可用统一的介观变量,如漂移速度,表征其集体运动,并可通过Guyer-Krumhansl方程等连续介质模型进行描述.其典型表征<sup>[59]</sup>包括第二声、泊肃叶流、非局部效应与热流旋度等.需要强调的是,该相干更多体现为声子模式之间动量或分布函数上的集体关联演化,与基于相位的波干涉,如超晶格中的相干输运、共振干涉,在物理起源上并不相同.近年来,该框架的适用范围也在从超低温环境逐步扩展至常温半导体.例如,McBennett等<sup>[60]</sup>提出了室温下面向硅纳米结构的统一流体动力学框架,将热传导表达为由几何构型决定的渗透率与随孔隙率演化的有效声子黏度之间的耦合,从而成功解释并预测了从纳米网格到金属点阵等多类纳米系统中显著低于块体的类流体热输运行为.综合来看,在不同尺度与不同散射结构下,相位干涉与流体动力学可能分别主导或发生交叉,因此在讨论相干声子调控策略时,有必要对两类机制加以区分.

## 2.2 超晶格中的声子相干热输运

纳米尺度的人工周期性结构为研究声子相干热输运提供了理想平台,其中以超晶格<sup>[15,18-20,37,61-63]</sup>为代表.在传统BTE框架下,声子被视为经典粒子,边界或界面仅作为散射事件的发生位置,其相位信息被完全忽略.然而,当结构周期长度接近声

子的平均自由程、相干长度或波长时,入射与反射晶格波之间的相干干涉不可忽略,单纯的粒子图像已无法完整描述体系内的热输运机制.

超晶格通常由两种或多种材料以纳米尺度周期交替堆叠而成,其周期长度可缩小至数埃.由周期长度定义的新元胞会导致布里渊区折叠,不同材料层之间的质量失配则可能引起声子禁闭效应和微小带隙的出现.这些现象已通过声波传输<sup>[64]</sup>、拉曼光谱<sup>[65]</sup>以及时域泵探测实验<sup>[66]</sup>得到系统观测.同时,界面处的原子混合会显著拓宽声子线宽<sup>[67]</sup>,反映出界面无序对声子寿命的强烈影响.

基于超晶格新单元胞的谐波模型预测,能带折叠与禁带开启将显著降低跨界面方向的声子群速度,从而抑制该方向上的热输运,而面内则基本不受影响<sup>[68,69]</sup>.然而,系统的实验结果显示,超晶格在两个正交输运方向上的热导率均随周期长度增大而显著提高,并在长周期极限下逐渐逼近体材料数值<sup>[70,71]</sup>,这一行为与仅考虑能带重构的波动模型的预测明显不符.为解释这一偏差,当假设声子在界面处发生非相干散射时,基于BTE的数值计算可以较好再现实验中热导率随周期长度增加而上升的趋势,但往往需要引入部分镜面散射假设<sup>[18,72]</sup>.这表明,在早期实验条件下,由于结构周期较大,相干效应难以主导热输运,观测到的热导率降低主要来源于界面漫散射与声子寿命缩短等非相干机制.

随着纳米制造技术的进步,当超晶格周期长度接近声子的本征非谐平均自由程时,反射声子波可在多个界面间保持相位关联并发生干涉,从而形成跨越多个周期的相干声子模态<sup>[35]</sup>.这些模态的传播行为类似于在等效均匀介质中的传播,界面不再充当传统意义上的散射中心.在短周期极限下,随着有效能带展平程度减弱,相干声子群速度增大,体系热导率随之回升.由此形成热导率随周期长度变化的非单调行为,清晰标志着声子相干输运与非相干输运之间的交叉区域<sup>[15,19,61,63,73-75]</sup>.

## 2.3 相干声子输运的理论实验进展

对声子输运的理论描述经历了从纯粒子模型、纯波动模型到混合模型的发展过程.早期基于BTE的非相干模型<sup>[18]</sup>,成功解释了GaAs/AlAs和Si/Ge超晶格中热导率随周期长度增大而升高的趋势.相对而言,基于超胞声子能带的纯波动模型则预测在周期长度较短的Si/Ge超晶格中<sup>[68,69]</sup>,

声子能隙的开启将显著抑制热输运。

为统一这两种极端图像, 有研究通过在声子波矢中引入虚部以表征相干性衰减 [73], 成功解释了实验中观察到的热导率非单调变化 [15]. 随后, 第一性原理结合 BTE 的方法系统分析了 Si/Ge 超晶格 [63,62] 中相干声子模态的群速度、热容、寿命及界面粗糙度效应, 但对界面散射的近似处理大大低估了其影响. 谐波格林函数方法 [61] 则为频谱分解的声子透射提供了精确描述. 与上述需预设声子相干或非相干行为的模型不同, 原子级非平衡格林函数 (nonequilibrium Green's function, NEGF) 通过大规模求解动力学方程可以自然地描述声子波动与频谱透射, 但通常不包含非谐声子散射而对高温退相干过程的描述受限, 且计算成本较高而多聚焦于弹道输运区域. 分子动力学模拟 (molecular

dynamics, MD) 通过原子级实空间轨迹, 自然包含了波动干涉与粒子散射效应, 成为研究纳米线 [76]、混合界面 [47,48]、周期性纳米多孔薄膜 [45,77,78]、超晶格 [15,19] 等结构中相干输运的重要工具, 并揭示了 [37] 热输运机制与声子相干长度、平均自由程及结构周期之间的定量关系, 但其经典势函数与经典统计在低温下 ( $T \ll T_D$ ,  $T_D$  是体系德拜温度) 存在明确适用边界, 需要在谱分解后进行量子热容修正以部分纠正统计误差或与含量子统计的输运框架 (如 NEGF, BTE 等) 进行交叉验证.

实验方面, 多项关键研究直接证实了声子相干输运的存在. 通过测量周期不变而总厚度变化的 GaAs/AlAs 超晶格热导率 [19] (图 1(a)–(c)), 发现低温下热导率随厚度线性增大, 而室温下该上升趋势趋于收敛. 这种线性依赖关系是声子跨越多个界

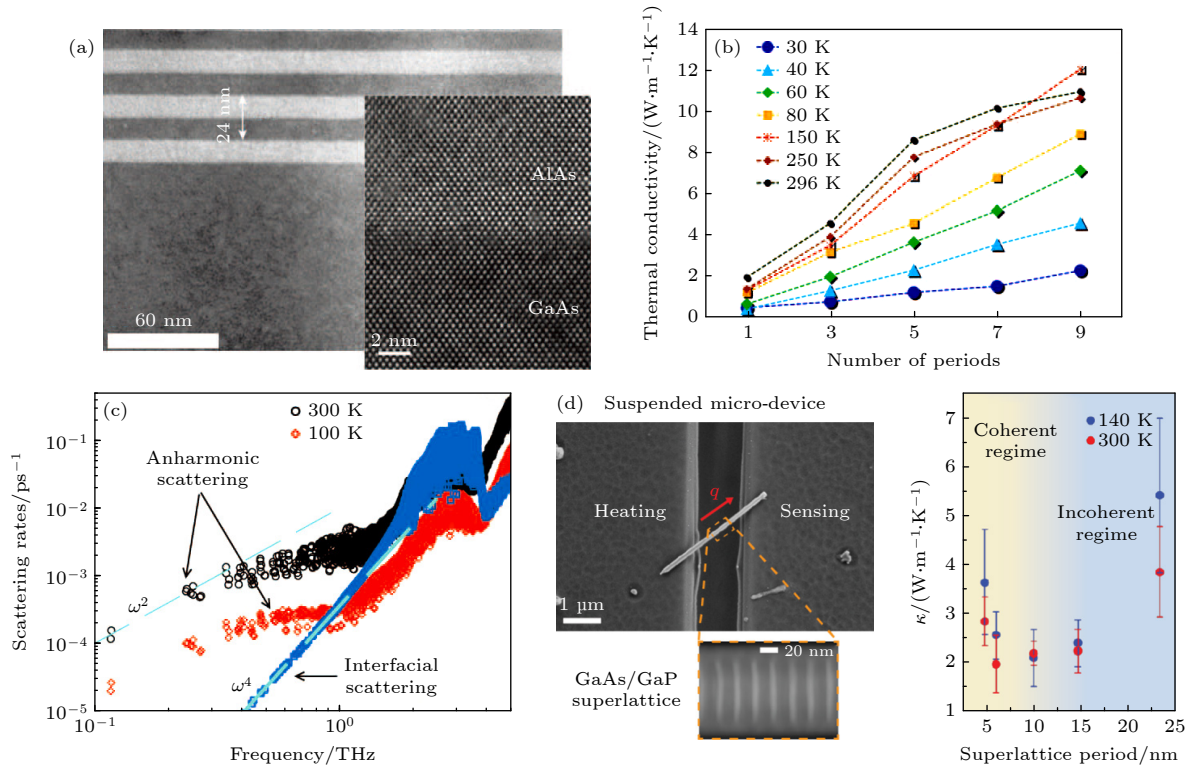


图 1 相干声子热输运的实验证据及频谱分解 (a) 含 3 个周期的 GaAs/AlAs 超晶格横截面透射电子显微镜图像 (transmission electron microscopy, TEM), 插图为单个界面的高分辨率透射电子显微镜图像 (high-resolution TEM, HRTEM); (b) 在不同温度下, 测量的周期厚度固定而周期数递增的 GaAs/AlAs 超晶格热导率变化; (c) GaAs/AlAs 超晶格中声子散射的第一性原理计算结果 [19]; (d) GaAs/GaP 超晶格纳米线热导率随周期长度的变化关系, 插图为热桥法测量热导率时的悬空微结构以及超晶格结构的 HRTEM 图 [81]

Fig. 1. Experimental evidence and spectral characteristics of coherent phonon heat transport: (a) Cross-sectional TEM image of a GaAs/AlAs superlattice with three periods, the inset shows a HRTEM image of a representative interface; (b) thermal conductivity of GaAs/AlAs superlattices measured at different temperatures as a function of the number of periods at fixed period thickness; (c) first-principles simulations of phonon scattering in GaAs/AlAs superlattices [19]; (d) thermal conductivity of GaAs/GaP superlattice nanowires as a function of period length, the inset shows the suspended microdevice used for thermal bridge measurements and an HRTEM image of the superlattice structure [81].

面弹道运输的直接证据,证实了存在平均自由程大于周期且不受界面散射影响的声子模式,即超晶格此时被视为均匀材料.另一项通过改变周期厚度的实验<sup>[79]</sup>观察到跨界面热导率随温度升高而下降,同时在短周期极限下随着周期厚度的减少热导率略有增大,这与用超胞处理超晶格相符<sup>[80]</sup>.此外,在GaAs/GaP<sup>[81]</sup>(图1(d))、Bi<sub>2</sub>Te<sub>3</sub>/Sb<sub>2</sub>Te<sub>3</sub><sup>[74]</sup>、GeTe/Bi<sub>2</sub>Te<sub>3</sub><sup>[75]</sup>和氧化物超晶格<sup>[15]</sup>的实验数据中均观察到热导率最小值,这是从相干到非相干声子传输机制间的交叉现象的典型特征.频谱分解的理论实验结果<sup>[19,63,82]</sup>进一步表明(图1(c)),低频声子由于波长远大于界面粗糙度,更易形成跨越多个周期的布洛赫模式,是实际热导率的主要贡献者;而中高频声子则主要受到界面混合和非谐散射的抑制,表现为非相干运输.这种明显的频率选择性输运行为,构成了超晶格中声子相干热运输的核心物理图像.在实验手段方面,近期工作通过提升扫描热测量的机械稳定性与热灵敏度,实现了在室温下对单分子结热运输中声子干涉特征的观测<sup>[83]</sup>,将相干相关热运输的可观测尺度推进至分子极限.

### 3 热运输中的声子安德森局域化

#### 3.1 声子安德森局域化的物理基础

声子相干热运输的一个极端情形是安德森局域化.随着体系结构尺度(特征尺寸 $l$ 及体系长度 $L$ )与声子特征尺度(波长 $\lambda$ 、平均自由程 $\Lambda$ 及相干长度 $\xi$ )之间相对关系的演变,声子热传导会经历从相干运输向安德森局域化的连续过渡(图2):当体系中非弹性散射较弱时,声子在结构特征尺度 $l$ 内仍能保持相位信息( $\xi \geq l$ ),输运表现为波动状的相干热运输;在此基础上若进一步增强弹性无序(如缺陷、边界等)使声子弹性平均自由程 $\Lambda$ 显著降低并逼近波长 $\lambda$ ,即进入Ioffe-Regel强散射区( $2\pi\Lambda/\lambda \leq 1$ ),则多重弹性散射为声子提供大量相干路径并导致干涉累积,当系统长度达到或超过局域化长度( $L \geq \xi_{loc}$ )时,声子热传导从相干转为指数衰减,进入安德森局域化.反之,若体系中非弹性散射较强(如非晶、合金或复杂晶体等),相位易被随机化( $\xi \leq l$ ),热传导更接近粒子状的扩散/尺寸效应,从而局域化特征被削弱或难以观测.从波动角度看,声子安德森局域化源于多路径散射之间的相干叠加,其本质不同于由非弹性散射主导的经

典弥散运输.“相位保持”( $\xi$ 与 $l$ )决定相干运输是否出现,“弹性散射”( $\Lambda$ 与 $\lambda$ )决定干涉能否发展到局域化极限,而“系统长度”( $L$ 与 $\xi_{loc}$ )则决定是否进入局域化区间.

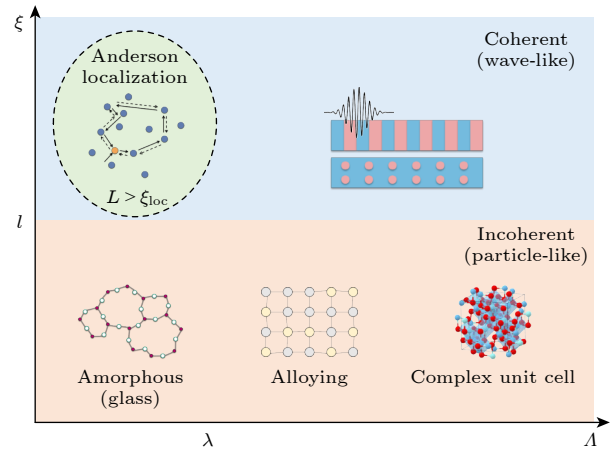


图2 声子相干热运输与安德森局域化热传导区间示意图.该区间由结构尺度(特征尺寸 $l$ 及体系长度 $L$ )与声子特征尺度(波长 $\lambda$ 、平均自由程 $\Lambda$ 及相干长度 $\xi$ )之间的相对关系演化进行划分

Fig. 2. Schematic heat conduction regimes of phonon coherent transport and Anderson localization, classified by the relative magnitudes of the structural length scales (characteristic size  $l$  and system length  $L$ ) and the phonon characteristic scales (wavelength  $\lambda$ , mean free path  $\Lambda$ , and coherence length  $\xi$ ).

由于声子的宽频带特性,且其相干性易受温度和非谐性散射破坏,满足Ioffe-Regel判据的条件相对苛刻,声子局域化的实验观测长期面临挑战.近年来,多种光谱与散射实验,如Raman<sup>[84,85]</sup>、泵浦-探针<sup>[86]</sup>、非弹性中子与X射线散射<sup>[87]</sup>等,已系统揭示无序诱导的振动模式展宽、频移以及局域化特征的增强.在GaAs/AlAs超晶格界面嵌入随机ErAs纳米点的实验中<sup>[88]</sup>进一步展示了典型的局域化热导率特征.室温下热导率随周期数增加趋于饱和,而在低温下热导率随周期数增加先升后降(图3(a)),表明声子局域化的发生对热导率产生了明显的抑制作用.在弥散散射有效消除了高频声子后,局域声子覆盖的频谱范围对热传导的贡献更为突出(图3(b)).

在理论层面,原子级建模为分析局域化提供了直接且系统的证据.基于NEGF<sup>[3]</sup>或MD<sup>[89,90]</sup>对声子透射谱的计算,普遍揭示了局域化模式的典型指数衰减特征: $T(\omega) \sim \exp(-L/\xi_{loc})$ ,其中 $L$ 是体系长度,并可由拟合提取频率相关的局域化长度

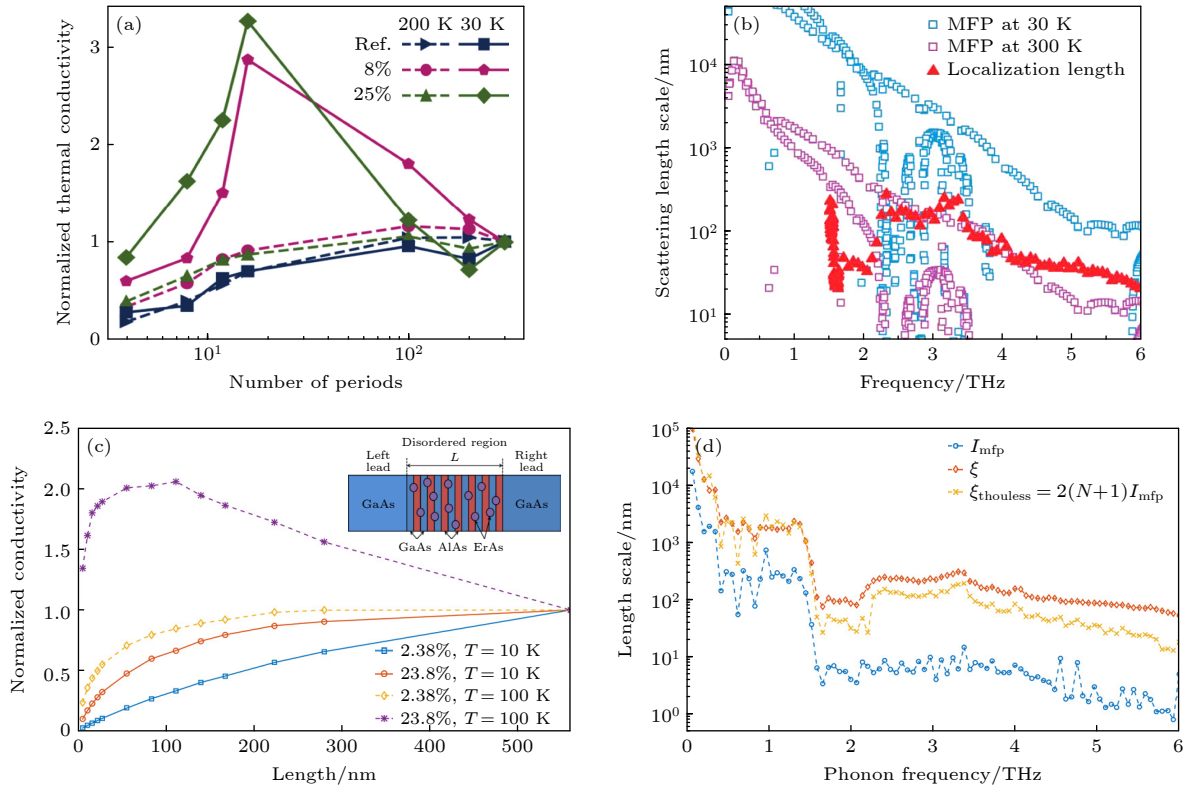


图 3 声子安德森局域化的实验与理论证据 (a) 界面处随机嵌入 ErAs 纳米点的 GaAs/AlAs 超晶格热导率实验结果<sup>[88]</sup>; (b) 计算得到的局域化长度与声子平均自由程的比较<sup>[88]</sup>; (c) 含 2.38% 和 23.8% ErAs 的 GaAs/AlAs 超晶格在 10 K 和 100 K 下, 由 NEGF 方法计算得到的归一化热导率随体系长度的变化关系, 插图为界面处引入 ErAs 纳米点的超晶格示意图<sup>[42]</sup>; (d) 含 23.8% ErAs 的 GaAs/AlAs 超晶格中声子平均自由程  $l_{mfp}$ , 局域化长度  $\xi$  和无序长度  $\xi_{thouless}$  的比较<sup>[42]</sup>

Fig. 3. Experimental and theoretical evidence of phonon Anderson localization: (a) Measured thermal conductivity of GaAs/AlAs superlattices with randomly embedded ErAs nanoparticles at the interfaces<sup>[88]</sup>; (b) comparison between the calculated localization length and the phonon mean free path<sup>[88]</sup>; (c) length-dependent normalized thermal conductivity of GaAs/AlAs superlattices containing 2.38% and 23.8% ErAs, calculated using NEGF method at 10 K and 100 K. The inset illustrates the superlattice structure with ErAs nanoparticles embedded at the interfaces<sup>[42]</sup>; (d) comparison of the phonon mean free path  $l_{mfp}$ , localization length  $\xi$ , and disorder length  $\xi_{thouless}$  scale in GaAs/AlAs superlattices with 23.8% ErAs<sup>[42]</sup>.

$\xi_{loc}(\omega)$ . NEGF 模拟结果显示<sup>[42]</sup>, 在超晶格界面处随机嵌入纳米点的结构中, 局域化长度可能远小于体系长度 (图 3(d)), 计算得到的热导率与实验测量数据趋势一致 (图 3(c)). 在 Si/Ge 非周期超晶格<sup>[44,43]</sup>、石墨烯声子晶体<sup>[21]</sup>、石墨烯-hBN 超晶格<sup>[91]</sup>、随机掺杂<sup>[23]</sup>或界面扩散<sup>[92]</sup>体系中也观察到不同频段的局域化声子模式, 并发现中高频及界面扰动更易诱发局域化. 此外, 波包动力学<sup>[22,47]</sup>分析可直观地显示声子在不有序区域形成被困的驻波模式, 其传播速度显著降低, 即产生了局域化声子模式. 声子参与率 (participation ration, PR) 和能量分布是振动模式空间局域化的另一定量分析指标. 一般来说, 局域模式呈现低 PR 值, 并在纳米孔<sup>[93]</sup>、边界<sup>[94]</sup>、颗粒<sup>[94]</sup>等强散射区域高度聚集. 结合上述结果, 声子的局域化判据包括 Ioffe-Regel 条件、低 PR 值、声子透射谱随体系长度的指数衰减, 局

域化长度  $\xi_{loc}$  与样品尺度的比较以及频率上的迁移边界识别等.

### 3.2 低维无序体系中的声子安德森局域化

自安德森在随机势中提出电子局域化以来, 其维度缩放理论已被 Abrahams 等<sup>[95]</sup>建立, 并预测在三维体系中的电子仅部分局域化, 而低维体系中的电子几乎可以完全局域化. 将该理论框架推广至声子体系后, 低维结构由于运输通道受限、相干散射路径高度约束, 被认为是更有利于观察声子安德森局域化的体系. Ma 等<sup>[91]</sup>(图 4(a))通过冻结石墨烯/六方氮化硼超晶格及无序多层膜中的面外原子运动, 发现严格二维体系中声子局域化显著强于三维情形. 在三维体系中, 弯曲模多表现为延展态, 且更强的非谐声子散射进一步削弱了相干干涉, 使大量声子模态呈现扩散而非局域化行为, 这也解释

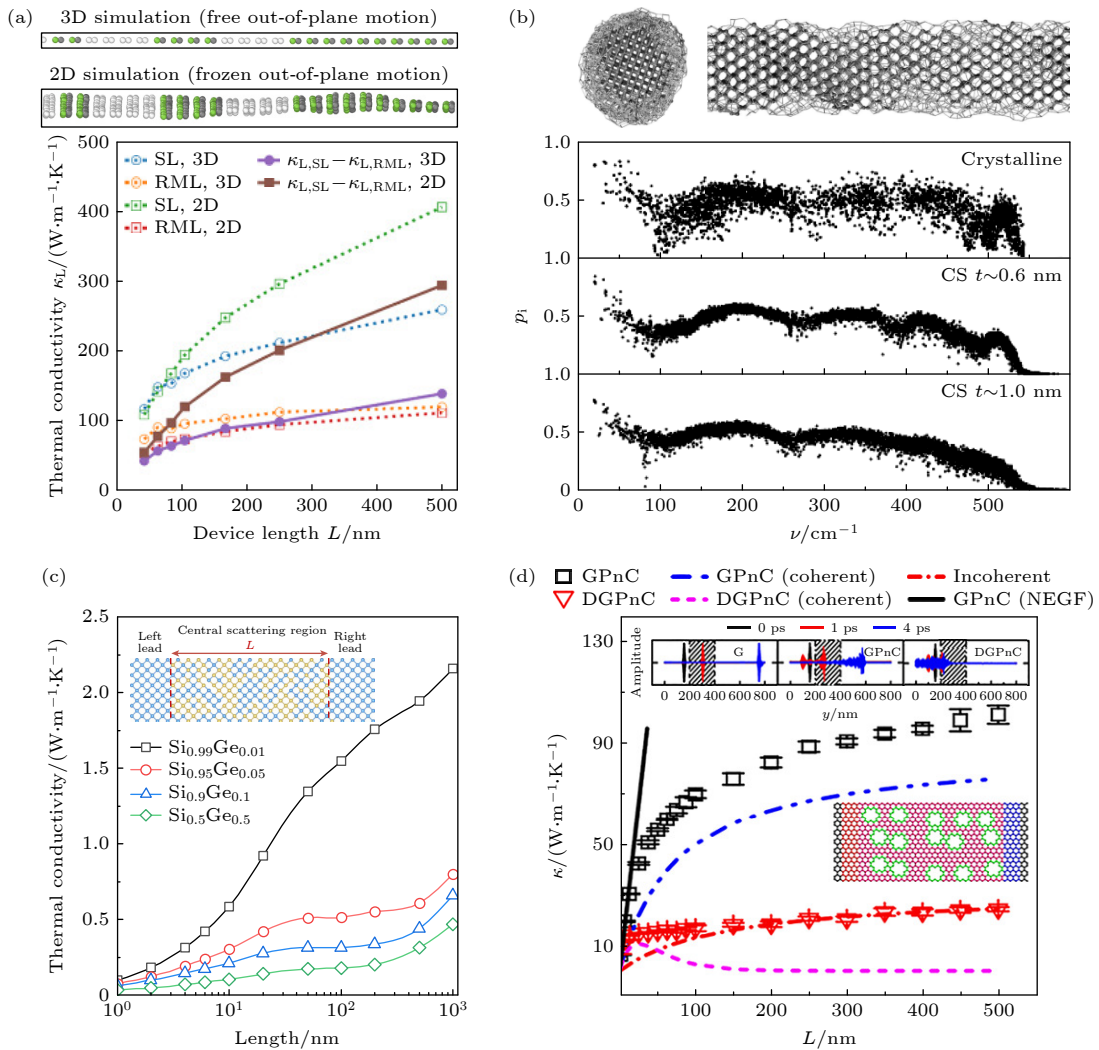
了在实际三维材料中直接观测强声子局域化的困难. 本节将围绕低维无序体系中的声子局域化行为展开, 总结不同维度与结构类型下的研究进展.

在低维体系中, 如超细纳米线<sup>[40]</sup>、纳米管<sup>[41]</sup>及超晶格<sup>[42,44,43]</sup>, 声子传播通道数目有限, 多重相干散射易于累积. 无论无序来源于表面形貌<sup>[40,96,97]</sup>、同位素掺杂<sup>[41]</sup>或合金化的质量无序<sup>[23]</sup>, 还是周期结构随机化<sup>[43]</sup>, 理论与仿真研究普遍发现, 在特定频段内声子透射谱随系统长度呈指数衰减, 表现出典型的安德森局域化特征. 然而, 需要强调的是, 局域化易于发生并不意味着其在热输运中必然占据主导.

以表面无序纳米线为例<sup>[40]</sup>, 在体系直径小于 20 nm, 且低温条件下, 相干散射主导声子动力学, 部分频段内声子透射谱随长度指数衰减, 热输运明显偏离传统的弹道-扩散图像, 呈现出局域化主导的特征. 但在更接近实际条件的室温下, MD 与晶

格动力学联合研究表明<sup>[96]</sup>, 强局域态主要集中于高频区(图 4(b)), 而对热导率贡献占主导的低频与中频声子更多表现为寿命缩短与散射增强行为. 因此, 常规表面粗糙引起的热导率降低, 本质上仍主要源于传播声子的群速度降低, 而非低频声子的强安德森局域化. 类似的结论也适用于同位素掺杂的碳纳米管与氮化硼纳米管体系<sup>[41]</sup>, 质量无序诱导的局域化主要发生在高频模式区间, 而低频声子仍保持准弹道甚至超扩散输运特征. 由于低频与中频声子在热导率中占据主导权重, 有限浓度杂质无序在室温下难以通过局域化机制显著抑制整体热输运.

在更广泛的低维共价网络体系中, 这一趋势同样成立. 对一维金刚石纳米线及二维非晶石墨烯的完整模态分析显示<sup>[94]</sup>, 无序显著降低了高频模态的参与率, 并引入空间高度局域的振动态; 然而, 对热输运贡献最大的低频模态仍保持清晰的极化



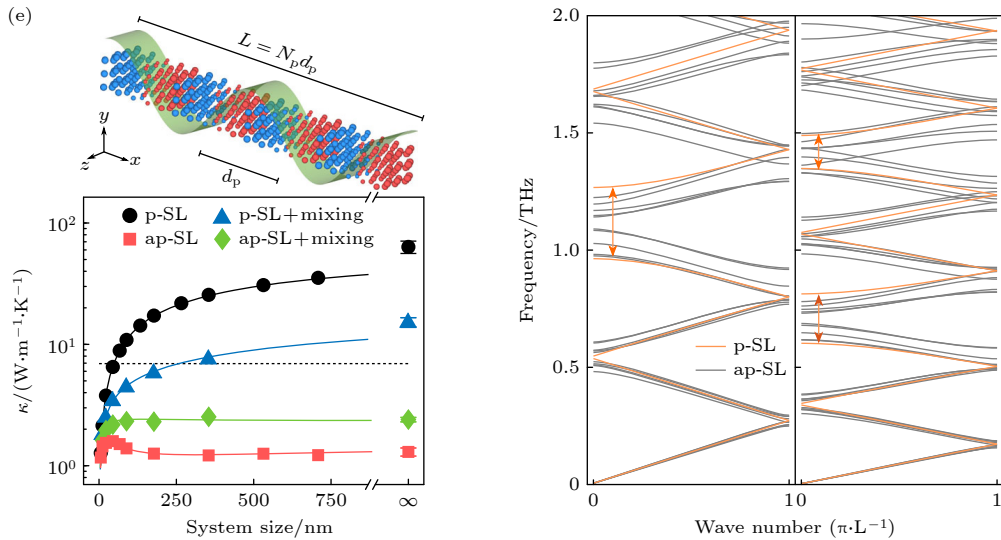


图 4 声子安德森局域化的理论计算进展 (a) MD 计算的不同维度下石墨烯/六方氮化硼超晶格 (superlattice, SL) 和随机多层结构 (random multilayers, RMLs) 热导率随体系长度的变化关系, 插图示意两种结构中的面外声子运动, 在严格二维 (two-dimensional, 2D) 体系中, 原子的面外振动被完全冻结, 而在三维 (three-dimensional, 3D) 体系中原子可自由运动<sup>[91]</sup>; (b) MD 计算的表面覆盖不同厚度非晶层的 Si 纳米线中声子振动模式参与率, 插图为直径约 3 nm、表面覆盖非晶层的纳米线示意图<sup>[96]</sup>; (c) NEGF 计算的不同 Ge 含量 SiGe 合金纳米线热导率随体系长度的变化关系, 插图为合金纳米线结构示意图<sup>[23]</sup>; (d) MD 计算的周期性 (graphene phononic crystals, GPNc) 和无序 (disordered GPNc, DGNc) 石墨烯声子晶体中, 总热导率在不同体系长度下分解为相干声子与非相干声子的贡献, 插图为无序石墨烯声子晶体示意图及声子波包分析<sup>[21]</sup>; (e) MD 计算的 Si/Ge 周期 (periodic SL, p-SL), 非周期 (aperiodic SL, ap-SL) 超晶格在有/无界面混合条件下热导率随体系长度的变化关系, 插图为 Si/Ge 超晶格示意图, 以及周期和非周期体系中纵向声学模式 (longitudinal acoustic, LA) 和横向声学模式 (transverse acoustic, TA) 的色散关系, 表明无序对声子谱结构及输运机制的显著调制作用<sup>[43]</sup>

Fig. 4. Theoretical and numerical advances in phonon Anderson localization: (a) Length-dependent thermal conductivity of graphene/hexagonal boron nitride SLs and RMLs in different dimensionalities, calculated using MD, The inset illustrates out-of-plane phonon motions, such vibrations are fully suppressed in strictly 2D systems but activated in 3D systems<sup>[91]</sup>; (b) participation ratios of phonon modes in Si nanowires with amorphous surface layers of varying thicknesses, obtained from MD simulations. The inset shows a schematic of a  $\sim 3$  nm diameter Si nanowire surrounded by an amorphous shell<sup>[96]</sup>; (c) thermal conductivity of SiGe alloy nanowires with different Ge concentrations as a function of system length, calculated using NEGF method, the inset depicts the alloy nanowire structure<sup>[23]</sup>; (d) decomposition of the total thermal conductivity into coherent and incoherent phonon contributions for GPNc and DGNc, obtained from MD simulations at different system lengths, the inset shows a schematic of the disordered graphene phononic crystal and phonon wave-packet analysis<sup>[21]</sup>; (e) length-dependent thermal conductivity of Si/Ge p-SL and ap-SL with and without interfacial mixing, calculated using MD simulations, insets show schematic illustrations of the Si/Ge superlattices and phonon dispersions of LA and TA modes in periodic and aperiodic systems, highlighting the strong modulation of phonon spectra and transport induced by disorder<sup>[43]</sup>.

方向与较强的空间延展性。值得注意的是, 低维无序体系中扩散模式对热导率的贡献通常较小, 这一点与三维非晶材料中由扩散模式主导热运输的情形形成鲜明对比。

此外, 局域化对热运输的影响还表现出复杂的尺度依赖行为。例如, 在  $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$  合金纳米线<sup>[23]</sup> 中 (图 4(c)), 随着 Ge 含量增大, 中高频声子的输运受到显著抑制。在体系长度小于 50 nm 时, 由弹道运输主导的热导率随长度增大而增大; 而在 50—200 nm 范围内, 局域化导致的热导率下降与弹道贡献相互抵消, 使热导率曲线出现平台特征。类似地, 在短周期 GaAs/AlAs 超晶格中<sup>[42]</sup> (图 3(c)), 通过在界面随机引入 ErAs 纳米点, 可在低温下观测

到热导率随长度的非单调变化: 当体系长度超过局域化开始抑制热运输, 热导率反而随长度增大而下降。该效应在室温下会因强非谐散射破坏相干性而显著减弱。

除上述不可控的随机无序的低维体系外, 声子晶体, 如超晶格等, 为研究声子相干运输与局域化提供了高度可控的平台。在理想周期结构中, 能带折叠与带隙打开通过降低群速度抑制热运输, 但这一机制对结构无序极为敏感。早期研究普遍认为<sup>[98]</sup>, 无序会破坏能带结构、关闭带隙, 从而削弱相干调控并导致热导率回升, 尤其在低温条件下表现明显。

然而, 后续研究表明, 当无序强度足够大时, 人工周期结构中的无序并非仅仅“破坏相干”, 而是

可在特定频段内诱导安德森局域化. 在 Si/Ge 超晶格<sup>[43]</sup>中(图 4(e)), 通过随机改变周期长度等参数可在保持界面数目的情况下引入强无序, 在不额外引入非相干散射的前提下, 实现从弹道输运向局域化输运的转变. 谱分析显示, 无序可使原有能带分裂为大量窄带, 有效布里渊区边界处群速度显著降低, 局域态在空间上呈现高度非均匀分布. 此类局域化源于相干干涉的累积, 而非传统意义上的界面粗糙或杂质散射. 在二维声子晶体<sup>[21,22]</sup>中(图 4(d)), 通过随机化孔阵列位置也可逐步抑制原本对热输运贡献显著的相干声子通道, 其贡献随系统长度迅速衰减, 而非相干声子的输运则基本不受周期性破坏的影响. 这一结果清楚表明, 周期无序主要通过抑制相干声子输运来降低热导率.

除上述由无序引入的多重相干散射诱导的安德森局域化之外, 低维纳米结构中还存在一类以声子共振诱导的局域化现象. 通过在传统的硅薄膜表面引入周期性的纳米柱<sup>[99]</sup>, 其产生的振动共振会与薄膜内部的声子色散发生杂化耦合, 从而使相关频段的色散扁平化、群速度显著降低. 类似的现象也可在核壳结构纳米线中出现<sup>[100]</sup>, 横向与纵向声子模式之间的模式耦合导致纵向声子发生局域化, 从而显著降低材料的热导率.

总体而言, 低维体系中声子安德森局域化在特定频段内是清晰可见的, 但其是否主导热输运高度依赖于无序对主导声子模式的作用方式、体系长度与温度条件. 在实际器件尺度与室温环境下, 对热导率贡献最大的声子往往具有较长的局域长度, 其输运行为仍表现为准弹道或散射受限扩散. 因而, 在低维材料中, 声子局域化更适合作为一种有条件、频谱选择性的输运调控机制, 而非普适有效的热导率抑制手段.

### 3.3 声子安德森局域化在声子工程中的应用

在声子工程领域, 尽管声子安德森局域化通常不构成晶格热输运的普适主导机制, 但其对声子频谱和空间分布的显著影响, 使其在声子工程中具有重要应用价值.

在热电材料中, 基于界面或质量无序诱导的局域模被广泛用于降低晶格热导率并同时尽量保持电输运性能. 超短周期超晶格中的实验与理论研究<sup>[10]</sup>表明, 低频声子可在界面处发生相干反向散射并呈现准局域化行为, 从而显著削弱热输运能

力. 需要指出的是, 无序结构在抑制声子输运的同时也可能通过改变电子散射与能带结构影响电导率<sup>[101-103]</sup>与塞贝克系数<sup>[103,104]</sup>. 基于经典声子玻璃-电子晶体思想<sup>[105]</sup>, 可通过在基体中嵌入与晶格高度匹配的纳米晶体<sup>[101]</sup>、在笼状化合物中填充原子<sup>[105]</sup>或引入共振能级以调控电子态密度<sup>[104,106]</sup>等策略, 在降低晶格热导率的同时尽可能维持电荷载流子迁移率并提升热电优值. 在热整流与非对称热输运器件中, 通过在结构两端引入不同的无序强度、质量分布或几何梯度, 可使某一方向更易进入局域态而反向保留更多传播模, 从而为热二极管与热开关提供物理基础. 在低维结构热管理中, 几何诱导的局域化可形成有效的热流抑制区域; 例如在具有几何收缩或突变的体系中<sup>[11]</sup>, 声子在局部区域传播受限并表现出“颈缩效应”, 从而产生明显的热流屏障. 在功能异质界面中, 通过引入扩散界面、随机掺杂层或成分梯度结构, 可诱导中高频声子局域化并被限制在界面附近, 显著降低跨界面热导率, 该现象已在多种体系中得到验证<sup>[47,48]</sup>. 进一步地, 在声子器件与功能结构中, 局域化可用于构建“声子势阱”; 例如声子晶体中强几何扰动可诱导高密度局域模, 使能量在内部边界或孔洞附近聚集<sup>[93]</sup>并实现频率通道的选择性调控.

然而, 面向集成电路热管理与热整流器件等实际应用, 局域化所需的结构特征与工作环境在制备与集成上面临显著挑战. 首先, 局域化对结构无序强度与声子相干长度高度敏感, 往往依赖分子束外延<sup>[88]</sup>等原子级精度工艺. 尽管在超晶格界面随机引入纳米点<sup>[88]</sup>等结构中已观察到局域化现象, 但在工业规模下实现对无序形貌(密度、尺寸分布、均匀性)的可重复控制仍较困难, 且制备过程中不可避免的界面粗糙、互扩散与合金化等<sup>[107]</sup>都会削弱局域化效应. 因此, 发展低成本、可扩展且可重复的制造路线, 是局域化走向工程应用的首要问题.

其次, 将局域化设计引入现有集成电路架构时, 必须考虑体系的综合平衡. 例如三维堆叠中引入金属泡沫结构<sup>[108]</sup>虽然可能有利于散热, 但也可能导致电路短路或严重破坏信号完整性. 同时, 纳米器件的热输运常由界面热阻与热界面材料主导<sup>[107]</sup>, 界面原子混合<sup>[108]</sup>可能重塑透射谱并掩盖层内局域化贡献. 异质堆叠的热膨胀失配<sup>[109]</sup>会在热循环下诱发封装翘曲、分层与界面疲劳裂纹, 而部分高效局域化结构(如刚性超晶格)机械柔顺性

不足<sup>[108]</sup>,更易在复杂三维集成与柔性电子应用中发生损伤.最后,热整流器件中接触、界面热阻与其他热扩散路径等会显著削弱热整流比,高温与电热耦合增强的非弹性散射亦会破坏局域化并导致性能随温度、功耗及工艺波动而漂移<sup>[110]</sup>.

总体而言,声子局域化在声子工程中更适合作为与无序工程、界面设计、尺寸效应及几何调控协同作用的频谱选择性调控手段.其优势在于提供一种基于波动干涉的热传导调控途径,使材料在不必依赖大量非相干散射中心的前提下实现对特定频段或空间区域的精细调控.如何实现可批量制造的“可控无序/可控界面”,并在体系中进一步放大局域化效应带来的影响,是其走向实际应用的核心挑战与未来方向.

## 4 总结与展望

本文聚焦低维材料中声子相干热传输与安德森局域化这一核心议题,系统梳理了纳米尺度下从经典粒子输运向波动主导输运演化的物理图像,重点归纳了超晶格结构与无序体系中相干干涉对热输运行为的关键影响.综合超晶格、声子晶体及低维无序体系的大量理论、仿真与实验研究可知:当结构特征尺度与声子的波长、相干长度或平均自由程处于同一数量级时,声子的相位关联性不再可忽略,相干输运可能成为决定热导率的关键因素.

在人工周期结构体系中,相干声子输运呈现为界面间多重反射诱导的布洛赫型传播,其典型特征是热导率随周期长度呈现非单调变化趋势,反映了相干输运与非相干散射之间的竞争关系,并已在各类实验观测与仿真计算中得到验证.频谱分解研究进一步表明,低频声子由于长波长特性而更易跨越多个周期单元并维持相位关联,是相干热输运的重要载体;而中高频声子则更易受界面混合与非谐散射的抑制,表现非相干输运特征.这种显著的频率选择性是理解超晶格热输运机制的核心.

当周期性结构被无序打破且弹性散射占据主导地位时,相干输运的极限情形即为安德森局域化.本文系统梳理了低维无序体系中声子局域化的物理判据、数值表征及实验进展.现有研究普遍认为,低维体系由于传播通道受限、相干散射路径更易累积,局域化更可能在特定频段内显现.更为关键的是,局域化能否在整体热输运中产生显著影

响,并不取决于其是否存在,而高度依赖于局域态与主导热导率声子频段之间的谱重叠程度.因此,从应用角度看,声子安德森局域化并非普适的热传导抑制机制,更适合作为一种具备频谱选择性、受特定条件约束的调控手段.

尽管近年来在理论建模、原子级模拟与实验表征方面取得进展,声子相干输运与安德森局域化的研究仍面临若干关键挑战.其一,相干干涉与非弹性散射之间的定量竞争关系尚未完全厘清,限制了宏观热导率预测精度的进一步提升;其二,在实验层面,实现并稳定观测室温下对热输运具有实质贡献的局域化现象,仍对材料制备质量、结构精准设计及先进表征手段提出极高要求;其三,从无序工程角度看,结构参数的高度敏感性与庞大的设计空间使得仅依靠经验与穷举难以在可承受成本内逼近“更强局域化”的结构极限.近年来,自 Carrete 等<sup>[111]</sup>率先将机器学习算法引入热输运研究以来,材料信息学与机器学习驱动的结构搜索与优化已被广泛用于声子无序工程中.已有多项工作以“最大化安德森局域化”为目标对非周期纳米声子晶体进行反向设计<sup>[112-114]</sup>,结合不同机器学习策略<sup>[115]</sup>与热输运计算方法,实现了相较周期结构更低的热导率.同时,机器学习势函数<sup>[116]</sup>为分子动力学提供了较经验势更准确的原子力与能量描述,从而提升复杂无序结构热输运模拟的可靠性.总体而言,机器学习并不改变相干输运与局域化的基本物理机制,而是作为一种高效工具,显著加速了面向特定目标的无序结构探索.

综上,低维材料中声子相干热输运与安德森局域化仍值得进一步深入探究,以推动纳米尺度热输运基础理论的发展,并为低热导材料及声子功能器件的设计提供重要理论基础.

## 参考文献

- [1] Cahill D G, Ford W K, Goodson K E, Mahan G D, Majumdar A, Maris H J, Merlin R, Phillpot S R 2003 *J. Appl. Phys.* **93** 793
- [2] Luo T F, Chen G 2013 *Phys. Chem. Chem. Phys.* **15** 3389
- [3] Bao H, Chen J, Gu X K, Cao B Y 2018 *ES Energy Environ.* **1** 16
- [4] Zhang Z W, Ouyang Y L, Cheng Y, Chen J, Li N B, Zhang G 2020 *Phys. Rep.* **860** 1
- [5] Chen G 2021 *Nat. Rev. Phys.* **3** 555
- [6] Majumdar A 2004 *Science* **303** 777
- [7] Dresselhaus M S, Chen G, Tang M Y, Yang R G, Lee H, Wang D Z, Ren Z F, Fleurbaey J P, Gogna P 2007 *Adv.*

- Mater.* **19** 1043
- [8] Hochbaum A I, Chen R, Delgado R D, Liang W, Garnett E C, Najarian M, Majumdar A, Yang P 2008 *Nature* **451** 163
- [9] Poudel B, Hao Q, Ma Y, Lan Y, Minnich A, Yu B, Yan X, Wang D, Muto A, Vashace D, Chen X, Liu J, Dresselhaus M S, Chen G, Ren Z 2008 *Science* **320** 634
- [10] Venkatasubramanian R, Siivola E, Colpitts T, O'Quinn B 2001 *Nature* **413** 597
- [11] Tang J, Wang H T, Lee D H, Fardy M, Huo Z, Russell T P, Yang P 2010 *Nano Lett.* **10** 4279
- [12] Peierls R E 1929 *JA Barth*
- [13] Li W, Carrete J, Katcho A N, Mingo N 2014 *Comput. Phys. Commun.* **185** 1747
- [14] Togo A 2023 *J. Phys. Soc. Jpn.* **92** 012001
- [15] Ravichandran J, Yadav A K, Cheaito R, Rossen P B, Soukiassian A, Suresha S J, Duda J C, Foley B M, Lee C H, Zhu Y, Lichtenberger A W, Moore J E, Muller D A, Schlom D G, Hopkins P E, Majumdar A, Ramesh R, Zurbuchen M A 2014 *Nat. Mater.* **13** 168
- [16] Xie G F, Ding D, Zhang G 2018 *Adv. Phys. X* **3** 1480417
- [17] Nomura M, Shiomi J, Shiga T, Anufriev R 2018 *Jpn. J. Appl. Phys.* **57** 080101
- [18] Chen G 1998 *Phys. Rev. B* **57** 14958
- [19] Luckyanova M N, Garg J, Esfarjani K, Jandl A, Bulsara M T, Schmidt A J, Minnich A J, Chen S, Dresselhaus M S, Ren Z, Fitzgerald E A, Chen G 2012 *Science* **338** 936
- [20] Wang Y, Huang H X, Ruan X L 2014 *Phys. Rev. B* **90** 165406
- [21] Hu S Q, Zhang Z W, Jiang P F, Chen J, Volz S, Nomura M, Li B W 2018 *J. Phys. Chem. Lett.* **9** 3959
- [22] Hu S Q, Zhang Z W, Jiang P F, Ren W J, Yu C Q, Shiomi J, Chen J 2019 *Nanoscale* **11** 11839
- [23] Zhang W, Guo Y Y, Xiong S Y, Yi H L 2023 *Phys. Rev. B* **108** 125436
- [24] Volz S G, Chen G 2000 *Phys. Rev. B* **61** 2651
- [25] Oyake T, Feng L, Shiga T, Isogawa M, Nakamura Y, Shiomi J 2018 *Phys. Rev. Lett.* **120** 045901
- [26] Shao C, Rong Q Y, Hu M, Bao H 2017 *J. Appl. Phys.* **122** 155104
- [27] Ohnishi M, Shiga T, Shiomi J 2017 *Phys. Rev. B* **95** 155405
- [28] Hu S Q, Chen J, Yang N, Li B W 2017 *Carbon* **116** 139
- [29] Wei H, Hu Y, Bao H 2023 *Commun. Mater.* **4** 3
- [30] Feng T L, Ruan X L 2018 *Phys. Rev. B* **97** 045202
- [31] Feng T L, Lindsay L, Ruan X L 2017 *Phys. Rev. B* **96** 161201
- [32] Volz S, Shiomi J, Nomura M, Miyazaki K 2016 *JTST* **11** JTST0001
- [33] Ohnishi M, Shiomi J 2019 *APL Mater.* **7** 013102
- [34] Ziman J M 2001 *Electrons and Phonons: The Theory of Transport Phenomena in Solids* (Oxford: Oxford University Press)
- [35] Maldovan M 2015 *Nat. Mater.* **14** 667
- [36] Han D, Yang X H, Du M, Xin G M, Zhang J C, Wang X Y, Cheng L 2021 *Nanoscale* **13** 7176
- [37] Latour B, Volz S, Chalopin Y 2014 *Phys. Rev. B* **90** 014307
- [38] Xiong S Y, Latour B, Ni Y X, Volz S, Chalopin Y 2015 *Phys. Rev. B* **91** 224307
- [39] Anderson P W 1958 *Phys. Rev.* **109** 1492
- [40] Murphy P G, Moore J E 2007 *Phys. Rev. B* **76** 155313
- [41] Savić I, Mingo N, Stewart D A 2008 *Phys. Rev. Lett.* **101** 165502
- [42] Mendoza J, Chen G 2016 *Nano Lett.* **16** 7616
- [43] Juntunen T, Vänskä O, Tittonen I 2019 *Phys. Rev. Lett.* **122** 105901
- [44] Hu R J, Tian Z T 2021 *Phys. Rev. B* **103** 045304
- [45] Yang L, Chen J, Yang N, Li B W 2015 *Int. J. Heat Mass Tran.* **91** 428
- [46] Wei H, Hu Y, Bao H, Ruan X L 2022 *Carbon* **197** 18
- [47] Zhang H G, Han H X, Xiong S Y, Wang H Y, Volz S, Ni Y X 2017 *Appl. Phys. Lett.* **111** 121907
- [48] Zhang H G, Xiong S Y, Wang H Y, Volz S, Ni Y X 2019 *EPL* **125** 46001
- [49] Latour B, Chalopin Y 2017 *Phys. Rev. B* **95** 214310
- [50] Foglia L, Mincigrucci R, Maznev A A, Baldi G, Capotondi F, Caporaletti F, Comin R, De Angelis D, Duncan R A, Fainozzi D, Kurdi G, Li J, Martinelli A, Masciovecchio C, Monaco G, Milloch A, Nelson K A, Occhialini C A, Pancaldi M, Pedersoli E, Pelli-Cresi J S, Simoncig A, Travasso F, Wehinger B, Zanatta M, Bencivenga F 2023 *Photoacoustics* **29** 100453
- [51] Ferrari E, Ueda H, Fainozzi D, Osaka T, Bencivenga F, Burian M, Carrara P, Vila-Comamala J, Cucini R, David C, Gessini A, Gerber S, Goloborodko A, Hrabec A, Inoue I, Inubushi Y, Diniz Leroy L M, Mincigrucci R, Paris E, Pedrini B, Roesner B, Rouxel J R, Serrat C, Scagnoli V, Tono K, Yabashi M, Yamada J, Yamamoto K, Zdora M C, Beye M, Masciovecchio C, Chergui M, Staub U, Svetina C 2025 *Commun. Phys.* **8** 257
- [52] Hase M, Fons P, Mitrofanov K, Kolobov A V, Tominaga J 2015 *Nat. Commun.* **6** 8367
- [53] Mo M, Tamm A, Metsanurk E, Chen Z, Wang L, Frost M, Hartley N J, Ji F, Pandolfi S, Reid A H, Sun P, Shen X, Wang Y, Wang X, Glenzer S, Correa A A 2024 *Sci. Adv.* **10** eadk9051
- [54] Xiao E D, Ma H, Bryan M S, Fu L W, Mann J M, Winn B, Abernathy D L, Hermann R P, Khanolkar A R, Dennett C A, Hurley D H, Manley M E, Marianetti C A 2022 *Phys. Rev. B* **106** 144310
- [55] Wei L L, Jin X, Zhou Z Z, Yang X L, Wang G Y, Zhou X Y 2024 *Phys. Rev. B* **110** 045406
- [56] Yang X L, Feng T L, Li J, Ruan X L 2019 *Phys. Rev. B* **100** 245203
- [57] Jia P Z, Deng L Q, Chen X K, Xie Z X, Chen K Q 2025 *Appl. Phys. Lett.* **127** 102103
- [58] Chen X K, Zhu J, Qi M, Jia P Z, Xie Z X 2025 *Phys. Rev. Appl.* **23** 034085
- [59] Beardo A, Tur-Prats J, Camacho J, Alvarez F X 2026 *Thermo-X 2* 202513
- [60] McBennett B, Beardo A, Nelson E E, Abad B, Frazer T D, Adak A, Esashi Y, Li B W, Kapteyn H C, Murnane M M, Knobloch J L 2023 *Nano Lett.* **23** 2129
- [61] Tian Z T, Esfarjani K, Chen G 2014 *Phys. Rev. B* **89** 235307
- [62] Garg J, Bonini N, Marzari N 2011 *Nano Lett.* **11** 5135
- [63] Garg J, Chen G 2013 *Phys. Rev. B* **87** 140302
- [64] Narayanamurti V, Störmer H L, Chin M A, Gossard A C, Wiegmann W 1979 *Phys. Rev. Lett.* **43** 2012
- [65] Colvard C, Merlin R, Klein M V, Gossard A C 1980 *Phys. Rev. Lett.* **45** 298
- [66] Yamamoto A, Mishina T, Masumoto Y, Nakayama M 1994 *Phys. Rev. Lett.* **73** 740
- [67] Colvard C, Gant T A, Klein M V, Merlin R, Fischer R, Morkoc H, Gossard A C 1985 *Phys. Rev. B* **31** 2080
- [68] Hyltdgaard P, Mahan G D 1997 *Phys. Rev. B* **56** 10754
- [69] Tamura S ichiro, Tanaka Y, Maris H J 1999 *Phys. Rev. B* **60** 2627
- [70] Yao T 1987 *Appl. Phys. Lett.* **51** 1798

- [71] Lee S M, Cahill D G, Venkatasubramanian R 1997 *Appl. Phys. Lett.* **70** 2957
- [72] Chen G 1997 *J. Heat Transfer* **119** 220
- [73] Simkin M V 2000 *Phys. Rev. Lett.* **84** 927
- [74] Venkatasubramanian R 2000 *Phys. Rev. B* **61** 3091
- [75] Tong H, Lan F, Liu Y J, Zhou L J, Wang X J, He Q, Wang K Z, Miao X S 2017 *J. Phys. D: Appl. Phys.* **50** 355102
- [76] Wingert M C, Chen Z C Y, Dechaumphai E, Moon J, Kim J H, Xiang J, Chen R 2011 *Nano Lett.* **11** 5507
- [77] Zen N, Puurtinen T A, Isotalo T J, Chaudhuri S, Maasilta I J 2014 *Nat. Commun.* **5** 3435
- [78] Jain A, Yu Y J, McGaughey A J H 2013 *Phys. Rev. B* **87** 195301
- [79] Capinski W S 1999 *Phys. Rev. B* **59** 8105
- [80] Yang B, Chen G 2003 *Phys. Rev. B* **67** 195311
- [81] Arya C, Trautvetter J, Sojo-Gordillo J M, Kaur Y, Zannier V, Nigro A, Beltram F, Albrigi T, Ruiz-Caridad A, Sorba L, Rurali R, Zardo I 2025 *ACS Nano* **19** 42013
- [82] Cheaito R, Polanco C A, Addamane S, Zhang J, Ghosh A W, Balakrishnan G, Hopkins P E 2018 *Phys. Rev. B* **97** 085306
- [83] Yelishala S C, Zhu Y, Martinez P M, Chen H, Habibi M, Prampolini G, Cuevas J C, Zhang W, Vilhena J G, Cui L 2025 *Nat. Mater.* **24** 1258
- [84] Hofmann M, Hsieh Y P, Liang C T, Chen Y F 2013 *J. Raman Spectrosc.* **44** 81
- [85] Howie R T, Magdau I B, Goncharov A F, Ackland G J, Gregoryanz E 2014 *Phys. Rev. Lett.* **113** 175501
- [86] Döring F, Eberl C, Schlenkrich S, Schlenkrich F, Hoffmann S, Liese T, Krebs H U, Pisana S, Santos T, Schuhmann H 2015 *Appl. Phys. A* **119** 11
- [87] Manley M E, Hellman O, Shulumba N, May A F, Stonaha P J, Lynn J W, Garlea V O, Alatas A, Hermann R P, Budai J D 2019 *Nat. Commun.* **10** 1928
- [88] Luckyanova M N, Mendoza J, Lu H, Song B, Huang S, Zhou J, Li M, Dong Y, Zhou H, Garlow J, Wu L, Kirby B J, Grutter A J, Puzos A A, Zhu Y, Dresselhaus M S, Gossard A, Chen G 2018 *Sci. Adv.* **4** eaat9460
- [89] Säskilähti K, Oksanen J, Tulkki J, Volz S 2014 *Phys. Rev. B* **90** 134312
- [90] Säskilähti K, Oksanen J, Volz S, Tulkki J 2015 *Phys. Rev. B* **91** 115426
- [91] Ma T F, Lin C T, Wang Y 2020 *2D Mater.* **7** 035029
- [92] Ni Y X, Zhang H G, Hu S, Wang H Y, Volz S, Xiong S Y 2019 *Int. J. Heat Mass Tran.* **144** 118608
- [93] Yang L, Yang N, Li B W 2014 *Nano Lett.* **14** 1734
- [94] Zhu T S, Ertekin E 2016 *Nano Lett.* **16** 4763
- [95] Abrahams E, Anderson P W, Licciardello D C, Ramakrishnan T V 1979 *Phys. Rev. Lett.* **42** 673
- [96] Donadio D, Galli G 2009 *Phys. Rev. Lett.* **102** 195901
- [97] Donadio D, Galli G 2010 *Nano Lett.* **10** 847
- [98] Maire J, Anufriev R, Yanagisawa R, Ramiere A, Volz S, Nomura M 2017 *Sci. Adv.* **3** e1700027
- [99] Davis B L, Hussein M I 2014 *Phys. Rev. Lett.* **112** 055505
- [100] Chen J, Zhang G, Li B W 2011 *J. Chem. Phys.* **135** 104508
- [101] Biswas K, He J, Zhang Q, Wang G, Uher C, Dravid V P, Kanatzidis M G 2011 *Nat. Chem.* **3** 160
- [102] Ko D K, Kang Y, Murray C B 2011 *Nano Lett.* **11** 2841
- [103] Martin J, Wang L, Chen L, Nolas G S 2009 *Phys. Rev. B* **79** 115311
- [104] Bahk J H, Bian Z, Shakouri A 2013 *Phys. Rev. B* **87** 075204
- [105] Takabatake T, Suekuni K, Nakayama T, Kaneshita E 2014 *Rev. Mod. Phys.* **86** 669
- [106] Heremans J P, Jovovic V, Toberer E S, Saramat A, Kurosaki K, Charoenphakdee A, Yamanaka S, Snyder G J 2008 *Science* **321** 554
- [107] Xu Z Y, Mao R L, Gao P 2026 *Adv. Funct. Mater.* e26614
- [108] Moore A L, Shi L 2014 *Mater. Today* **17** 163
- [109] Virmani D, Chatterjee B 2025 *Eng* **6** 373
- [110] Qian X, Zhou J W, Chen G 2021 *Nat. Mater.* **20** 1188
- [111] Carrete J, Li W, Mingo N, Wang S, Curtarolo S 2014 *Phys. Rev. X* **4** 011019
- [112] Huang X Y, Volz S, Nomura M, Ni Y X 2025 *Phys. Rev. B* **111** 174203
- [113] Chakraborty P, Liu Y, Ma T, Guo X, Cao L, Hu R, Wang Y 2020 *ACS Appl. Mater. Interfaces* **12** 8795
- [114] Roy Chowdhury P, Reynolds C, Garrett A, Feng T L, Adiga S P, Ruan X L 2020 *Nano Energy* **69** 104428
- [115] Zhu C L, Bamidele E A, Shen X Y, Zhu G M, Li B W 2024 *Chem. Rev.* **124** 4258
- [116] Behler J 2016 *J. Chem. Phys.* **145** 170901

SPECIAL TOPIC—Heat conduction and its related interdisciplinary areas

# Coherent phonon transport and Anderson localization in low-dimensional materials<sup>\*</sup>

HUANG Xiaoyu NI Yuxiang<sup>†</sup>*(School of Physical Science and Technology, Southwest Jiaotong University, Chengdu 610031, China)*

( Received 30 December 2025; revised manuscript received 13 February 2026 )

## Abstract

Phonon heat transport in low-dimensional materials departs from the classical Boltzmann picture when structural length scales approach phonon wavelengths, coherence lengths, or mean free paths. In this regime, enhanced phase correlation enables wave-based phenomena, notably coherent transport in periodic architectures and Anderson localization in disordered media. This review summarizes recent progress in understanding these effects and their impact on thermal conductivity.

We first discuss coherent phonon transport in artificial periodic systems, including superlattices and phononic crystals. Experiments and simulations commonly report non-monotonic thermal conductivity versus period length, reflecting the interplay between coherent interference and incoherent scattering. Spectral analyses further indicate that coherent transport is dominated by low-frequency phonons, while higher frequency modes are strongly suppressed by anharmonicity.

We then examine phonon Anderson localization in low-dimensional disordered materials. Localization emerges when the localization length becomes shorter than relevant transport lengths. Its impact to thermal conductivity depends critically on spectral overlap with heat-carrying phonons, making localization a selective rather than universal mechanism for thermal suppression.

Finally, we outline open challenges, including quantifying the competition between interference and inelastic scattering, and realizing experimentally observable localization effects at room temperature. Overall, this review provides a wave-based framework for phonon transport in low-dimensional materials and offers guidance for phonon engineering via coherence and disorder.

**Keywords:** phonon coherent transport, phonon Anderson localization, low-dimensional materials**DOI:** [10.7498/aps.75.20251791](https://doi.org/10.7498/aps.75.20251791)**CSTR:** [32037.14.aps.75.20251791](https://cstr.cn/32037.14.aps.75.20251791)

---

<sup>\*</sup> Project supported by the National Natural Science Foundation of China Joint Fund Key Project (Grant No. U2330208).

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

低维材料中的声子相干热输运与安德森局域化

黄晓宇 倪宇翔

**Coherent phonon transport and Anderson localization in low-dimensional materials**

HUANG Xiaoyu NI Yuxiang

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 75, 070708 (2026) DOI: 10.7498/aps.75.20251791

CSTR: 32037.14.aps.75.20251791

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.75.20251791>

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

低维材料极化激元及其耦合特性

Polaritons in low-dimensional materials and their coupling characteristics

物理学报. 2022, 71(12): 127104 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20220272>

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>

表面原子操纵与物性调控研究进展

Research progress of surface atomic manipulation and physical property regulation of low-dimensional structures

物理学报. 2022, 71(12): 128102 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20220405>

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>

一维合成维度水基声子晶体

One-dimensional synthetic waterborne phononic crystals

物理学报. 2024, 73(10): 104301 <https://doi.org/10.7498/aps.73.20240298>

低维材料中的电荷密度波

Charge density waves in low-dimensional material

物理学报. 2022, 71(12): 127103 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20220052>