

基于纳米点嵌入的界面导热性能优化*

邱钰珺 李亨宣 李亚涛 黄春朴
李卫华 张旭涛 刘英光†

(华北电力大学动力工程系, 保定 071003)

(2023年3月3日收到; 2023年3月19日收到修改稿)

调节界面热导 (ITC) 是纳米电子器件热管理的关键任务. 本文采用非平衡态分子动力学方法研究了在界面处嵌入锡 (Sn) 纳米点对硅锗 (Si/Ge) ITC 的影响. 研究发现, 在声子弹性和非弹性两种竞争机制下 ITC 随 Sn 纳米点的数量的增加先升后降, 在嵌入 4 个 Sn 纳米点时达到顶峰, ITC 是完美界面 (无纳米点嵌入) 时的 1.92 倍. 通过计算声子透射函数和态密度可以知道, ITC 增加的原因是声子的非弹性散射得到加强, 增强的非弹性声子散射为界面声子输运打开了新的通道. 随着纳米点数量增加到一定值时, 声子的弹性散射逐渐占据主导地位, ITC 开始降低.

关键词: 界面热导, 纳米点, 分子动力学模拟, 声子

PACS: 31.15.xv, 44.10.+i

DOI: 10.7498/aps.72.20230314

1 引言

半导体器件的散热已成为限制其寿命和可靠性的技术瓶颈之一^[1-4], 提高半导体器件的界面热导 ITC 是改善其散热性能的关键途径^[5,6]. 界面处的热传导可以通过改变界面粗糙度、原子无序性、以及结合键强度等来增强^[7-10]. 如 Jia 等^[11] 使用格林函数方法结合朗道公式, 研究了粗糙度对矩形和三角形两种界面接触形式的 Si/Ge 界面处声子透射率的影响. 结果表明, 随着粗糙度的增加, 两种界面的声子的透射率均增大, 热导率比完美界面时分别提高了 22.3% 和 11.1%. 本课题组使用非平衡态分子动力学 (NEMD) 方法, 研究了 Si/Ge 单界面和超晶格结构热导率受界面原子混合影响的规律^[12]. 结果表明, 由于声子的“桥接”机制, 单一界面和少周期数的超晶格的热导率受 2 层和 4 层界面原子混合影响而提高; 但是在多周期体系中, 由

于声子局域化效应, 原子混合界面结构与完美界面相比热导率较低. Han 等^[13] 通过第一性原理计算方法研究了多种合金元素对金刚石/铜界面性质的影响, 研究表明由于合金元素与碳原子键合增强的原因, 合金元素能提高金刚石/铜的界面结合, 从而提高了 ITC.

除此之外, 界面处植入纳米结构也是一种提高 ITC 的有效方法^[14,15]. 如 Lee 等^[16] 在 Al/Si 界面引入柱状线的纳米结构, 并通过时域热反射法测得其 ITC 相比完美界面提高了 88%, 这种增强主要是由于纳米结构增大了界面处的接触面积, 纳米结构的引入使高频声子的透射率增加. 在高温下, 这种纳米结构对热导的强化优势更为显著. Xu 等^[17] 在 Si/4 H-SiC 界面处引入纳米条纹结构, 运用 NEMD 研究发现: ITC 主要受声子界面散射和输运通道之间竞争机制的影响, 随着引入条纹结构面积的增大, 输运通道明显增多, ITC 不断增大. Ma 等^[18] 在 $\text{Cr}_{0.22}\text{Ni}_{0.78}/\text{MgO}$ 和 $\text{Cr}_{0.22}\text{Ni}_{0.78}/\text{Al}_2\text{O}_3$ 界面处

* 国家自然科学基金 (批准号: 52076080) 和河北省自然科学基金 (批准号: E2020502011) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: liuyingguang@ncepu.edu.cn

植入厚度大于 7.2 Å 的 Cu 纳米中间层, 结果显示植入 Cu 纳米中间层后, 两种材料的 ITC 相比其完美界面时分别提高了 3 倍和 2.4 倍. 研究指出热导提高的主要原因是非弹性声子散射得到了极大的加强, 使更多的声子能够穿透界面.

受以上启发, 本文提出一种在界面嵌入纳米颗粒来增强 ITC 的方法, 在建模分析和实验制备方面都更具良好的可操作性. 本研究将 Sn 纳米点嵌入到 Si/Ge 界面中, 采用 NEMD 方法对其导热性能进行了模拟分析, 同时计算了声子态密度、透射函数等相关参数, 进一步揭示了导热增强机理. 本文的研究能为电子器件的散热提供理论和设计指导.

2 模型与模拟方法

本文 NEMD 模拟计算热性质原理模型如图 1 所示, 构造了 2 种不同硅锗界面结构模型: 图 1(a) 完美界面结构; 图 1(b) 混合界面结构 (界面嵌入 Sn 纳米点结构, 其中 Sn 纳米点直径均为 1.5 nm). 在 X, Y 方向上施加周期性边界条件, 结构完全弛豫后在 Z 方向施加固定边界条件. 由于计算结果会受截面面积过小的影响出现较大误差^[19], 因此在本文中设定 XOY 截面积为 22 UC×18 UC (UC 为晶胞长度). 为了使热流方向产生温度梯度, 将恒温器布置在 Z 方向上, 并在最外侧设置绝热壁, 以防止与外界产生热量交换.

所有模拟过程均基于 LAMMPS 软件进行^[20], 时间步长采用 0.001 ps. 首先将温度设置为 0 K, 并应用能量最小化原理对体系进行优化, 其次在等温等压系综 (NPT) 内进行结构松弛, 再置于正则系综 (NVT) 内进行控温, 使用郎之万恒温器保持高温热源的温度为 320 K, 低温热汇的温度为

280 K, 温度差为 40 K. 最后, 置于微正则系综 (NVE) 内, 并根据体系内产生的温度梯度计算得到热流和热导率. NEMD 模拟得到的温度阶跃曲线如图 2 所示, 外推界面的线性温度曲线的差值, 估算出界面处的温度阶跃 ΔT . 界面热阻 R 是界面的温度阶跃 ΔT 与热流 J 的比值^[21]:

$$R = \Delta T / J_z. \quad (1)$$

据此计算出整体界面热导 G :

$$G = 1/R. \quad (2)$$

热流 J_z 的计算方法为^[22]

$$J_z = \frac{1}{A} \sum_{i \in \text{hotbath}} \frac{d}{dt} E_i(t), \quad (3)$$

其中 E 为能量; t 为模拟时间; A 为横截面积.

声子态密度 (phonon density of states, PDOS) 反映了系统在受到外界因素影响后, 内部振动模式发生的变化, 包含了很多重要的微观信息. 根据所有原子速度自关联函数 (velocity autocorrelation function, VACF) 的傅里叶变换^[23] 计算得到 PDOS:

$$\text{PDOS}(\omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-i\omega t} \text{VACF}(t), \quad (4)$$

其中速度自关联函数 (VACF) 由下式定义:

$$\text{VACF}(t) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \langle v_i(0) v_i(t) \rangle, \quad (5)$$

其中 N 为原子总数; $v_i(t)$ 为 t 时刻 i 原子的速度矢量; $v_i(0)$ 为原子的初速度; $\langle \rangle$ 为系综平均.

声子参与率 (phonon participation ratio, PPR) 是一个无量纲参数, 衡量了参与某一本征振动模式的原子比例. 当声子发生局域化后, 不再是所有原子都参与的行波模式, 声子参与率小于 1, 局域化越强, 声子参与率越小^[24,25], 其表述如下:

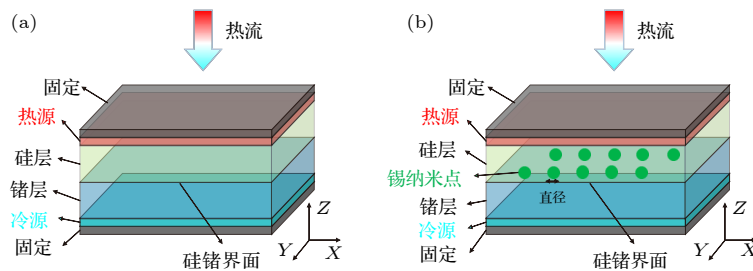


图 1 NEMD 模拟热传导示意图 (a) 完美界面结构; (b) 混合界面结构

Fig. 1. Schematic diagram of the setup of the NEMD simulation: (a) Perfect interface structure; (b) hybrid interface structure.

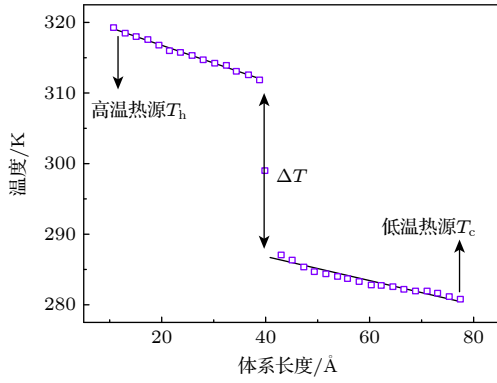


图 2 轴向温度分布

Fig. 2. Temperature profile in the z -direction of the simulated system.

$$\text{PPR}(\omega) = \frac{1}{N} \frac{\left(\sum_i \text{PDOS}_i(\omega) \right)^2}{\sum_i \text{PDOS}_i(\omega)^4}, \quad (6)$$

其中 $\text{PDOS}_i(\omega)$ 的表示频率为 ω 的第 i 个原子的 PDOS.

通过跟踪原子之间的力-速度相关性, 计算出不同频率的声子透射函数 [26–29]:

$$\alpha_{A-B}(\omega) = \frac{2}{\kappa_B \Delta T M \Delta t_s} \text{Re} \sum_{i \in A} \langle \mathbf{F}_i(\omega) \cdot \mathbf{v}_i(\omega)^* \rangle, \quad (7)$$

其中 κ_B 为玻尔兹曼常数; ΔT 为界面温度差; M 为采样数; Δt_s 为采样间隔; $\mathbf{v}_i(\omega)$ 为原子 i 的傅里叶变换速度; $\mathbf{F}_i(\omega)$ 为原子 i 从 B 侧施加的总作用力.

根据朗道公式, 可以得到不同频率范围内声子弹性和非弹性散射对应的 ITC:

$$G_{|\omega_1}^{\omega_2} = \frac{1}{2\pi A} \sum \int \frac{\partial f(\omega, T)}{\partial T} \hbar \omega \alpha_{A \rightarrow B}(\omega) d\omega, \quad (8)$$

其中 A 为横截面面积; ω 为声子频率; f 为玻色-爱因斯坦分布函数; T 为温度; \hbar 为约简普朗克常数; α 为声子透射函数.

3 结果与讨论

3.1 纳米点插入对 ITC 的影响

为了研究嵌入 Sn 纳米点对 ITC 的影响, 分析了 ITC 随纳米点数量增加的变化规律, 如图 3 所示. 从图 3 中可以看出, 随着嵌入纳米点数量的增加, ITC 呈现出先升高后降低的趋势, 且均大于完美界面时的 ITC. 当嵌入 4 个纳米点时, ITC 达到了最大值. 最大值的出现表明至少有两种竞争机制支配着这里的声子输运: 声子输运的弹性过程和非

弹性过程. 为了验证这一点, 并阐明其潜在的物理机制, 本文分别计算了完美界面和嵌入 2 个 Sn 纳米点混合界面的声子的透射函数, 如图 4 所示. 从图 4 中可以看出, 在整个频率范围内, 混合界面的透射函数几乎都要比完美界面的透射函数大. 在 9.28 THz 以后, 完美界面的透射函数呈下降趋势, 而混合界面的透射函数呈上升状态, 并在 11.3 THz 左右形成一个新的峰值, 这是 Sn 纳米点促进声子热输运的直接表现. 纳米点的嵌入可以使更多的声子穿透界面, 对界面之间的热输运起到了促进的作用, 进而对 ITC 的提升起到了帮助.

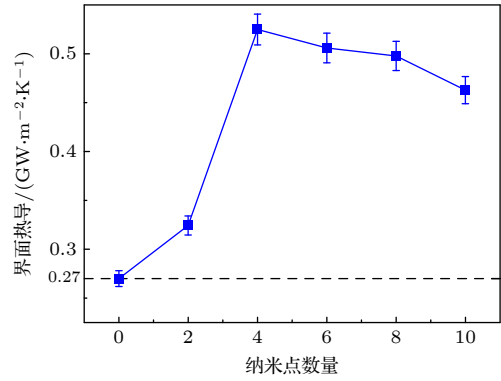


图 3 嵌入不同数量的 Sn 纳米点对 ITC 的影响

Fig. 3. Effect of Sn nanodots number on interfacial thermal conduction.

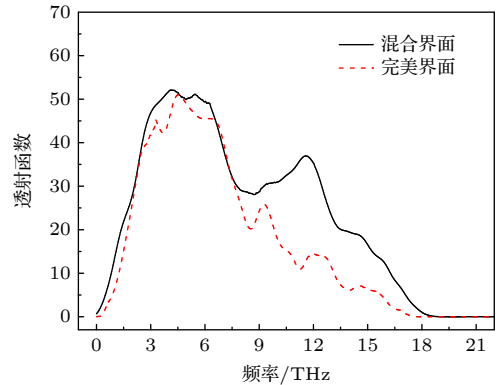


图 4 不同界面下的声子透射函数

Fig. 4. Phonon transmission function under different interfaces.

声子在界面间的传输可以通过弹性散射和非弹性散射两种方式进行, 一般认为弹性散射在界面声子输运中占主导地位. 当声子频率大于界面材料的截止频率时, 声子将会通过非弹性散射 (高阶声子散射) 进行 [30] 传输. 为了精确量化声子弹性和非弹性散射对热导的贡献, 计算了声子的态密度, 如

图 5 所示. 从图 5 可以看出, Sn 和 Ge 的声子截止频率分别为 5 THz 和 12 THz, 远低于 Si 的 17 THz. 在完美界面中, 通过 (8) 式对 12 THz 以上的声子进行积分, 发现频率大于 12 THz 的声子对 Si/Ge 界面的 ITC 贡献率为 10.9%, 即非弹性散射对 ITC 的贡献仅为 10.9%. 这表明, 声子输运主要受弹性散射控制. 嵌入 Sn 纳米点后, 频率大于 5 THz 的声子对混合界面 ITC 的贡献为 67.4%, 即非弹性散射对 ITC 的贡献高达 67.4%. 这表明, 引入 Sn 纳米点后, 非弹性散射占据主要的地位. 由于 Sn 的截止频率低于 Ge, 因此 Sn 纳米点的引入不会增加体系振动模态的重叠, 界面之间态密度的重叠进一步降低, 导致声子弹性散射减弱. 此外, 低频透射函数的提高是由于声子之间的耦合增加, 使更多的低频声子穿透界面.

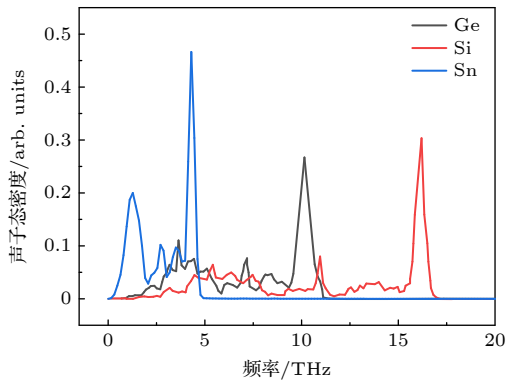


图 5 声子态密度图
Fig. 5. Phonon state density diagram.

进一步地, 计算了不同纳米点数量下的声子透射函数, 结果如图 6 所示. 首先需要说明, 由于嵌入 6 个和 8 个 Sn 纳米点的透射函数非常接近, 为了和其他数据形成更好的对比, 图 6 中只保留了一组数据. 从图 6 中可以看出, 随着嵌入纳米点数量的增加, 整体的透射函数呈现先上升后降低的趋势, 与图 3 所示的 ITC 变化趋势相符. 在图 6 中可以观察到两个明显的峰值, 分别在 3—6 THz 和 11.4 THz 附近. 与完美界面相比, 混合界面透射函数主要在峰值范围 (2.7—6.6 THz) 变化较大, 正是既不容易发生声子散射又不容易发生声子局域化的频率范围, 这恰恰表明通过嵌入纳米颗粒调控 ITC 的有效性. 嵌入 4 个 Sn 纳米点的透射函数明显高于嵌入其他数量时的值, 这表明声子非弹性散射达到最大值, 随着纳米点数量的进一步增加, 非弹性作用减弱, 弹性作用增强, ITC 呈下降的趋势.

当嵌入无限多的纳米点时, 漫散射占主导地位, 热导率应接近合金极限.

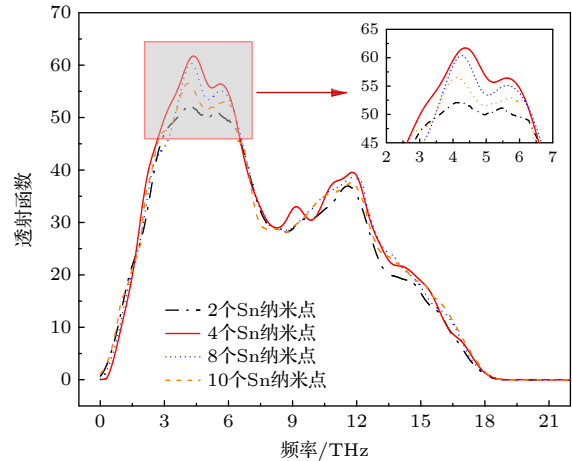


图 6 嵌入不同纳米点时声子透射函数的变化图
Fig. 6. Variation of phonon transmission function when inserted at different nanodots.

3.2 温度对 ITC 的影响

在 300—700 K 范围内, 嵌入两个 Sn 纳米点的混合界面和完美界面的 ITC 随温度的变化, 如图 7 所示. 结果表明, 两种界面的导热性能均随温度的升高而增大. ITC 对温度的依赖性主要受声子非弹性散射的影响 [31], 为了对其进行更好的阐释, 研究了在不同温度下嵌入两个 Sn 纳米点混合界面的透射函数, 如图 8 所示. 由于高频声子主要参与界面的热输运, 在低温下高频声子的数量较少, 并且界面上声子之间的耦合较小, 导致 ITC 较低. 随着温度的升高, 更多的高频声子被激发出来, 非弹性界面透射函数不断增加, 非相干声子对热输运贡献逐渐增大, 这与之前对混合体系热导的温度相关

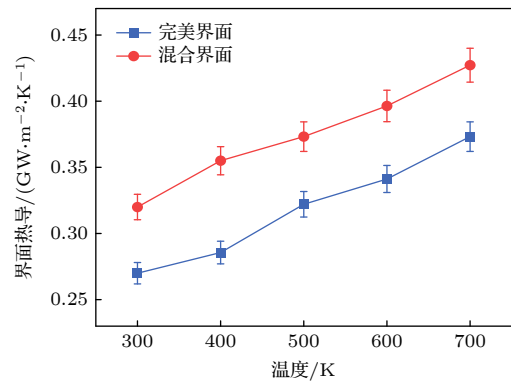


图 7 ITC 随温度的变化规律
Fig. 7. The variation of interface thermal conductance with temperature.

性的研究结果一致^[32,33]. 增强的非弹性声子散射为界面声子输运打开了新的通道, 使 ITC 不断增加. 这就是 ITC 随温度升高的主要原因.

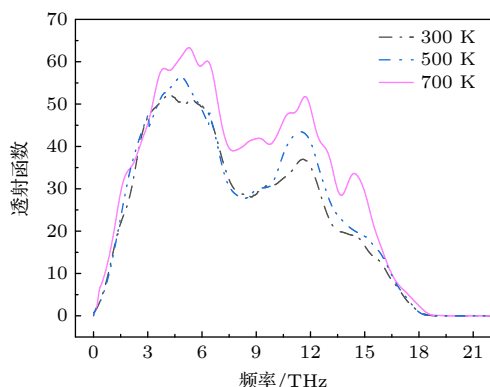


图 8 透射函数随温度的变化规律

Fig. 8. The variation of transmission function with temperature.

4 结 论

本文采用非平衡分子动力学模拟方法研究了在界面处嵌入 Sn 纳米点对 Si/Ge 界面热输运的影响. 结果表明: 1) 在硅锗界面处嵌入 Sn 纳米点, 促进了界面的热输运, 使 ITC 得到了提升; 2) 随着嵌入纳米点数量的增加, 在声子输运的弹性过程和非弹性竞争机制下, ITC 呈先升后降的趋势; 3) 在界面嵌入 4 个 Sn 纳米点时, 弹性和非弹性相互作用达到最大值, 随着纳米点数量的进一步增加, 非弹性作用减弱, 弹性作用增强, ITC 下降; 4) 随着温度的升高, 声子的非弹性界面透射率不断增加, 更多的高频声子被激发出来, 非相干声子对热输运贡献逐渐增大, 增强的非弹性声子散射为界面声子输运打开了新的通道, 使 ITC 不断增加.

参考文献

[1] Mayelifartash A, Abdol M A, Sadeghzadeh S 2021 *Phys. Chem. Chem. Phys.* **23** 13310
 [2] Basu R, Singh A 2021 *Mater. Today Phys.* **21** 100468
 [3] Jin Z 2021 *Phys. Status Solidi B* **258** 2000443
 [4] Gurumathan R, Hanus R, Graham S, Garg A, Snyder G J 2021 *Phys. Rev. B* **103** 144302
 [5] Rajabpour A, Bazrafshan S, Volz S 2019 *Phys. Chem. Chem.*

Phys. **21** 2507
 [6] Bracht H, Eon S, Frieling R, Plech A, Isenmann D, Wolf D, Lundsgaard Hansen J, Nylandsted Larsen A, Ager III J W, Haller E E 2014 *New J. Phys.* **16** 015021
 [7] Zong Z C, Pan D K, Deng S C, Wan X, Yang L N, Ma D K, Yang N 2023 *Acta Phys. Sin.* **72** 034401 (in Chinese) [宗志成, 潘东楷, 邓世琛, 万晓, 杨哩娜, 马登科, 杨诺 2023 *物理学报* **72** 034401]
 [8] Yang L N, Wan X, Ma D K, Jiang Y, Yang N 2021 *Phys. Rev. B* **103** 155305
 [9] Deng S C, Xiao C D, Yuan J L, Ma D K, Li J H, Yang N, He H 2019 *Appl. Phys. Lett.* **115** 101603
 [10] Cao B Y, Zhang Z T 2022 *Acta Phys. Sin.* **71** 014401 (in Chinese) [曹炳阳, 张梓彤 2022 *物理学报* **71** 014401]
 [11] Jia L, Ju S H, Liang X G, Zhang X 2016 *Mater. Res. Express* **3** 095024
 [12] Liu Y G, Xue X Q, Zhang J W, Ren G L 2022 *Acta Phys. Sin.* **71** 093102 (in Chinese) [刘英光, 薛新强, 张静文, 任国梁 2022 *物理学报* **71** 093102]
 [13] Han J J, Yang X F, Ren Y, Li Y, Li Y, Li Z X 2023 *J. Phys. Condens. Matter* **35** 115001
 [14] Ma D K, Xing Y H, Zhang L F 2023 *J. Phys. Condens. Matter* **35** 053001
 [15] Wang X, Wang X L, Wang Z, Guo Y L, Wang Y P 2021 *Chem. Phys.* **542** 111019
 [16] Lee E, Zhang T, Yoo T, Guo Z, Luo T 2016 *ACS Appl. Mater. Interfaces* **8** 35505
 [17] Xu Y X, Wang G, Zhou Y G 2022 *Int. J. Heat Mass Transfer* **187** 122499
 [18] Ma D K, Zhang L F 2020 *J. Phys. Condens. Matter* **32** 425001
 [19] Schelling P K, Phillpot S R, Keblinski P 2002 *Phys. Rev. B* **65** 144306
 [20] Plimpton S 1995 *J. Comput. Phys.* **117** 1
 [21] Liu Y G, Zhang J W, Ren G L, Chernatynskiy A 2022 *Int. J. Heat Mass Transfer* **189** 122700
 [22] Qu X L, Gu J J 2020 *RSC Adv.* **10** 1243
 [23] Liang T, Zhou M, Zhang P, Yuan P, Yang D G 2020 *Int. J. Heat Mass Transfer* **151** 119395
 [24] Bao H, Chen J, Gu X K, Cao B Y 2018 *ES Energy Environ.* **1** 16
 [25] Loh G C, Teo E H T, Tay B K 2012 *Diamond Relat. Mater.* **23** 88
 [26] Säskilähti K, Oksanen J, Tulkki J, Volz S 2016 *Phys. Rev. E* **93** 052141
 [27] Hu S Q, Zhang Z W, Jiang P F, Chen J, Volz S, Nomura M, Li B 2018 *J. Phys. Chem. Lett.* **9** 3959
 [28] Hu S Q, Zhang Z W, Jiang P F, Ren W J, Yu C Q, Shiomi J, Chen J 2019 *J. Phys. Chem. Lett.* **11** 11839
 [29] Säskilähti K, Oksanen J, Tulkki J, Volz S 2014 *Phys. Rev. B* **90** 134312
 [30] Zhang Y Y, Ma D K, Zang Y, Wang X J, Yang N 2018 *Front. Energy Res.* **6** 1
 [31] Ong Z Y, Pop E 2010 *Phys. Rev. B* **81** 155408
 [32] Diao J, Srivastava D, Menon M, Chem J 2008 *J. Chem. Phys.* **128** 164708
 [33] Samvedi V, Tomar V 2009 *Nanotechnology* **20** 365701

Nanodot embedding based optimization of interfacial thermal conductance*

Qiu Yu-Jun Li Heng-Xuan Li Ya-Tao Huang Chun-Pu
Li Wei-Hua Zhang Xu-Tao Liu Ying-Guang[†]

(*Department of Power Engineering, North China Electric Power University, Baoding 071003, China*)

(Received 3 March 2023; revised manuscript received 19 March 2023)

Abstract

Regulating the interfacial thermal conductance is a key task in the thermal management of electronic devices, and implanting nanostructures at the interface is an effective way to improve the interfacial thermal conductance. In order to study the effect of the embedding of nanostructures on the thermal conductivity of the interface, the effect of embedding tin (Sn) nanodots at the interface on the interfacial thermal conductance of silicon-germanium (Si/Ge) composite material is investigated by using a non-equilibrium molecular dynamics simulation. It is found that the phonon transmission function of the hybrid interface with embedded nanodots is significantly larger than that of the perfect interface (there are no nanodots at interface). The enhanced transmission function plays a role in facilitating the thermal transport at the interface, which enhances the interfacial thermal conductance. The simulation results also indicate that the interfacial thermal conductance changes nonlinearly with the increase of the number of Sn nanodots, first increasing and then decreasing. This is attributed to the competition between two phonon transport mechanisms, which are elastic scattering of phonons and inelastic scattering of phonons. When four nanodots are inserted, the interfacial thermal conductance reaches a maximum value, which is 1.92 times that of a perfect interface. In order to reveal the reason why the interfacial thermal conductance varies nonlinearly with the number of nanodots, the transmission function and density of states of photons are calculated, and the result indicates that the increasing of interfacial thermal conductance is due to the enhancement of phonons inelastic scattering, which opens new channels for the interfacial phonons transport. As the number of nanodots increases to a certain value, the elastic scattering of phonons gradually dominates, and the interfacial thermal conductance starts to decrease. In addition, temperature is also a key factor affecting the interfacial thermal conductance. This study shows that as the temperature increases, more and more high-frequency phonons are excited, the phonons transmission function at the interface keeps increasing, and the enhanced inelastic scattering makes the interfacial thermal conductance keep increasing. This study provides theoretical guidance for improving the interfacial thermal conductance of electronic devices.

Keywords: interfacial thermal conductance, nanodots, molecular dynamics simulation, phonon

PACS: 31.15.xv, 44.10.+i

DOI: 10.7498/aps.72.20230314

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 52076080) and the Natural Science Foundation of Hebei Province, China (Grant No. E2020502011).

[†] Corresponding author. E-mail: liyingguang@ncepu.edu.cn

基于纳米点嵌入的界面导热性能优化

邱钰珺 李亨宣 李亚涛 黄春朴 李卫华 张旭涛 刘英光

Nanodot embedding based optimization of interfacial thermal conductance

Qiu Yu-Jun Li Heng-Xuan Li Ya-Tao Huang Chun-Pu Li Wei-Hua Zhang Xu-Tao Liu Ying-Guang

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 72, 113102 (2023) DOI: 10.7498/aps.72.20230314

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.72.20230314>

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

基于界面原子混合的材料导热性能

Thermal conductivity of materials based on interfacial atomic mixing

物理学报. 2022, 71(9): 093102 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20211451>

石墨烯/碳化硅异质界面热学特性的分子动力学模拟

Thermal property of graphene/silicon carbide heterostructure by molecular dynamics simulation

物理学报. 2021, 70(18): 187302 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20210613>

不同周期结构硅锗超晶格导热性能研究

Thermal conductivities of different period Si/Ge superlattices

物理学报. 2021, 70(7): 073101 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20201789>

不同尺寸Cu₆₄Zr₃₆纳米液滴的快速凝固过程分子动力学模拟

Molecular dynamics simulation of rapid solidification of Cu₆₄Zr₃₆ nanodrops of different sizes

物理学报. 2021, 70(24): 246401 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20211235>

Fe合金FCC-BCC原子尺度台阶型马氏体相界面迁移行为的分子动力学模拟研究

Molecular dynamics simulation of migration behavior of FCC-BCC atomic terrace-step phase boundary in iron-based alloy

物理学报. 2020, 69(13): 136102 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20191903>

氮掺杂对石墨烯摩擦学特性影响的分子动力学模拟

Effect of N-doping on tribological properties of graphene by molecular dynamics simulation

物理学报. 2022, 71(14): 146801 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20212309>