

分形结构纳米复合材料热导率的分子动力学模拟研究

张程宾 程启坤 陈永平

Molecular dynamics simulation on thermal conductivity of nanocomposites embedded with fractal structure

Zhang Cheng-Bin Cheng Qi-Kun Chen Yong-Ping

引用信息 Citation: Acta Physica Sinica 63, 236601 (2014) DOI: 10.7498/aps.63.236601

在线阅读 View online: <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.236601>

当期内容 View Table of Contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn/CN/volumn/home.shtml>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

周期受击陀螺系统波函数的分形

周洁, 杨双波

2014, 63(22): 220507. 全文: [PDF](#) (27653KB)

基于多重分形去趋势波动分析法的交通流多重分形无标度区间自动识别方法

熊杰, 陈绍宽, 韦伟, 刘爽, 关伟

2014, 63(20): 200504. 全文: [PDF](#) (0KB)

基于小波 leaders 的海杂波时变奇异谱分布分析

熊刚, 张淑宁, 赵慧昌

2014, 63(15): 150503. 全文: [PDF](#) (8148KB)

分形基底上受限固固模型动力学性质的数值模拟研究

杨毅, 唐刚, 宋丽建, 寻之朋, 夏辉, 郝大鹏

2014, 63(15): 150501. 全文: [PDF](#) (417KB)

RIKEN 介观器件腔中粒子输运过程的混沌性质及分形自相似结构研究

杨秦男, 张延惠, 蔡祥吉, 蒋国辉, 徐学友

2013, 62(8): 080505. 全文: [PDF](#) (1289KB)

分形结构纳米复合材料热导率的分子动力学模拟研究*

张程宾 程启坤 陈永平†

(东南大学能源与环境学院, 能源热转换及其过程测控教育部重点实验室, 南京 210096)

(2014年5月5日收到; 2014年7月8日收到修改稿)

提出了一基于 Sierpinski 分形结构的 Si/Ge 纳米复合材料结构, 以调控纳米复合材料的热导率. 采用非平衡分子动力学方法模拟研究了分形结构 Si/Ge 纳米复合材料的导热性能, 给出了硅原子百分比、轴向长度以及截面尺寸对分形结构纳米复合材料热导率的影响规律, 并与传统矩形结构进行了对比. 研究表明, 分形结构纳米复合材料增强了 Si/Ge 界面散射作用, 使得热导率低于传统矩形结构, 这为提高材料的热电效率提供了有效途径. Si 原子百分比、截面尺寸、轴向长度皆对分形结构纳米复合材料热导率存在着重要影响. 纳米复合材料热导率随着 Si 原子百分比的增加呈先减小后增加的趋势, 随轴向长度的增加则呈单调增大趋势.

关键词: 热导率, 分形, 分子动力学, 纳米复合材料

PACS: 66.70.-f, 05.45.Df, 31.15.xv

DOI: 10.7498/aps.63.236601

1 引言

热电材料是一种利用固体内部载流子运动实现热能和电能相互转换的功能材料, 具有高效、清洁等优点, 在热电制冷器、红外探测器、超导电子仪、遥控导航系统等方面有着广阔的应用前景^[1-3]. 其中, 通过纳米技术制造的 Si/Ge 纳米复合结构热电材料具有良好的机械性能、热学性能和电学性能, 故近年来备受关注^[4-7]. 目前, 热电材料的热电效率通常采用无量纲热电优值 $ZT = S^2 T \sigma / k$ (S 为赛贝克系数, σ 为电导率, k 为热导率, T 为绝对温度) 进行评估. 理想的热电材料应具备较大的 ZT 值, 即具备较高的赛贝克系数 S 及电导率 σ 与较低的热导率 k , 降低热电材料热导率是提高热电材料 ZT 值的重要途径之一. 为此, 国内外学者开展了大量的复合结构热电材料热导率的理论和实验研究, 并取得了一定进展^[8-16].

Cheaito 等^[10] 通过实验方法研究了尺寸效应和边界散射对 Si/Ge 合金热导率的影响, 研究发现,

Si/Ge 合金薄膜的热导率是其大体积情况下热导率的 1/5—1/3, 并且有限尺度效应和试样尺寸是限制 Si/Ge 超晶格结构导热性能的主导因素. Chen 等^[11] 利用非平衡分子动力学方法模拟研究了晶格周期长度对 Si/Ge 超晶格结构热导率的影响, 研究表明, 当晶格的周期长度小于声子的平均自由程时, 导热系数将会出现最小值. Yang 和 Chen^[12] 采用声子 Boltzmann 输运方程研究了 Si/Ge 管状纳米线的热导率, 研究表明, 由于声子的弹道输运, Si/Ge 管状纳米线的有效热导率不仅和 Si, Ge 的组成比例有关, 还和管状纳米线尺寸相关. 随后, Li 和 Yang^[13] 采用平衡分子动力学方法模拟研究了嵌入粒子的体积率和形状对纳米复合材料的影响, 研究表明: 当体积率一定时, Si/Ge 纳米复合材料的热导率随粒子尺寸增加而呈先减小后增大的趋势; 正方体、球体和正四面体等嵌入的粒子形状对热导率也有重要影响. 这意味着改变结构布置可优化 Si/Ge 纳米复合材料的热导率.

总的来说, 现有纳米复合材料研究已为 ZT 值

* 国家自然科学基金(批准号: 11190015) 和江苏省自然科学基金(批准号: BK20130621) 资助的课题.

† 通讯作者. E-mail: ypchen@seu.edu.cn

的优化提供了很多思路,但是,目前的复合结构常侧重于矩形、圆柱等单一结构^[12],这些单一结构还远未能从结构上充分指明提高 ZT 值的方向.鉴于分形结构在质能运输结构优化方面展现出了很多独特的优势^[17],本文将分形结构引入纳米复合材料设计,采用嵌入Sierpinski分形来构建纳米复合材料.基于非平衡分子动力学模拟方法研究了分形结构纳米复合材料导热性能,阐明了分形纳米复合材料热导率随硅原子百分比、轴向长度以及截面尺寸的变化规律,并与嵌入矩形结构纳米复合材料进行了比较,分析了嵌入Sierpinski分形结构纳米复合材料的优势所在,为提高热电材料的热电优值提供了新的思路.

2 几何建模

Sierpinski分形结构生成过程如下:首先,将一正方形每边三等分,共获得9个正方形,舍弃中央正方形,得到如图1(a)所示图形.然后,将剩下的8个小正方形按上述同样的方法进行分割与舍弃,得到如图1(b)所示图形.经过第三次等分,则如图1(c)所示.以此类推,对Sierpinski分形结构进

行 n 次等分. Sierpinski分形结构的自相似分形维数 D 为

$$D = \frac{\lg b}{\lg a}, \quad (1)$$

式中, a 为正方形边长等分数, b 为第 n 次舍去中央正方形后所剩面积与所舍去正方形面积之比.本文所构造的Sierpinski分形结构的自相似分形维数 $D = \lg 8 / \lg 3 = 1.89$.

为研究Sierpinski分形结构对纳米复合材料热导率的影响,现建立Sierpinski分形结构纳米复合材料的三维几何构形.如图2所示,该构形 x 方向长度为 L_x , y 方向长度为 L_y , z 方向长度为 L_z .以Ge为基材,在整个Ge元胞中嵌入Si原子进而获得Sierpinski分形结构Si/Ge纳米复合材料,其截面形状如图2(b)所示.本文模拟对象即采用图2(b)所示的分形结构,宽、高(L_y, L_x)相等且取为 L .

为分析嵌入分形结构纳米复合材料的优越性,比较了嵌入矩形结构和嵌入分形结构的纳米复合材料的热导率.在比较中,保持纳米复合材料在 x, y, z 三个方向上的尺寸一致,并且嵌入的Si原子的百分比相同.

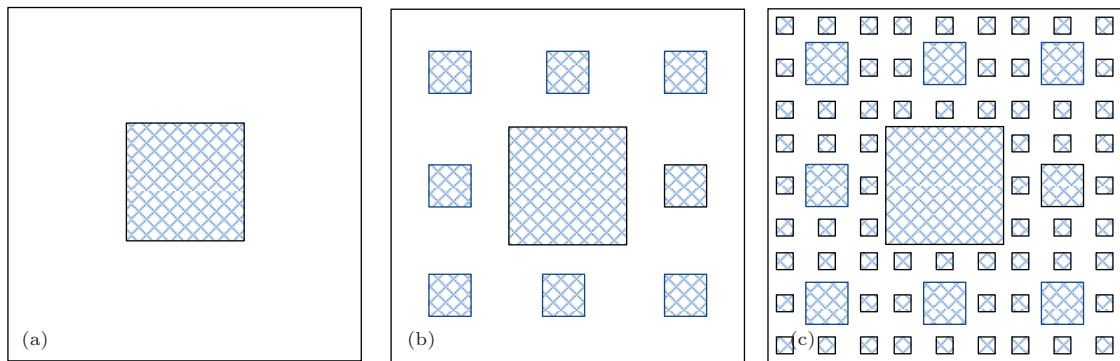


图1 Sierpinski分形结构 (a) $n = 1$; (b) $n = 2$; (c) $n = 3$

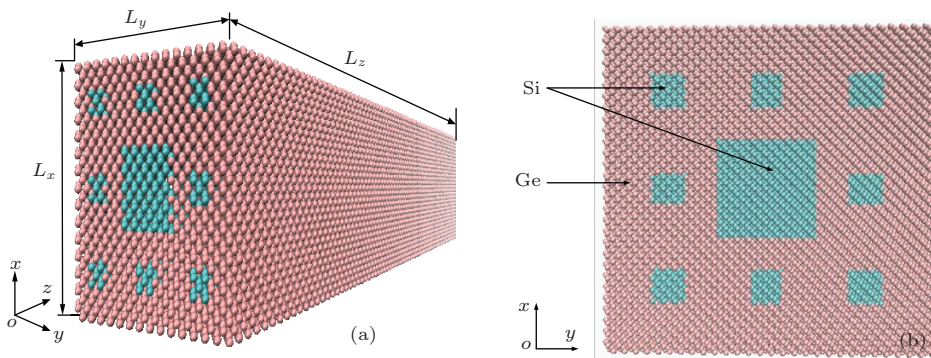


图2 (网刊彩色) 嵌入Sierpinski分形结构的纳米复合材料 (a) 立体图; (b) 截面形状

3 分子动力学模拟

选用合适的势函数来描述系统内原子间的相互作用对分子模拟的准确性具有决定性作用. 本文采用 Tersoff 势函数^[18]描述 Si, Ge 原子之间的相互作用, 在该模型中, 系统总势能 E 为所有化学键的键能总和, 即

$$E = \sum_i E_i = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} V_{ij}, \quad (2a)$$

$$V_{ij} = f_C(r_{ij})[f_R(r_{ij}) + b_{ij}f_A(r_{ij})], \quad (2b)$$

式中, f_R 和 f_A 分别表示原子之间的排斥和吸引作用, f_C 是一个光滑截断函数, 它们的表达式可分别写为

$$f_R(r_{ij}) = A_{ij} \exp(-\lambda_{ij}r_{ij}), \quad (3a)$$

$$f_A(r_{ij}) = -B_{ij} \exp(-u_{ij}r_{ij}), \quad (3b)$$

$$f_C(r_{ij}) = \begin{cases} 1 & (r_{ij} < R_{ij}), \\ \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \cos \left[\frac{\pi(r_{ij} - R_{ij})}{(S_{ij} - R_{ij})} \right] & (R_{ij} < r_{ij} < S_{ij}), \\ 0 & (r_{ij} > S_{ij}), \end{cases} \quad (3c)$$

$$b_{ij} = \chi_{ij}(1 + \beta_i^n \zeta_{ij}^n)^{-1/2n}, \quad (3d)$$

$$\zeta_{ij} = \sum_{k \neq i} f_C(r_{ik}) \omega_{ik} g(\theta_{ijk}), \quad (3e)$$

$$g(\theta_{ijk}) = 1 + \frac{c_i^2}{d_i^2} - \frac{c_i^2}{d_i^2 + (h_i - \cos \theta_{ijk})^2}, \quad (3f)$$

$$\lambda_{ij} = (\lambda_i + \lambda_j)/2, \quad (3g)$$

$$u_{ij} = (u_i + u_j)/2, \quad (3h)$$

$$A_{ij} = (A_i A_j)^{1/2}, \quad (3i)$$

$$B_{ij} = (B_i B_j)^{1/2}, \quad (3j)$$

$$R_{ij} = (R_i R_j)^{1/2}, \quad (3k)$$

$$S_{ij} = (S_i S_j)^{1/2}, \quad (3l)$$

其中, i, j 和 k 表示系统中的不同原子, r_{ij} 表示 i — j 原子之间的键长, θ_{ijk} 表示 i — j 键与 i — k 键之间的键角, b_{ij} 表示吸引力项 $f_A(r)$ 对角度 θ_{ijk} 依赖的修正, λ_{ij} 和 n 为 Tersoff 势函数中的参数, 其值由原子类型决定. 上式中各项物理参数值如表 1 所列.

为研究嵌入 Sierpinski 分形结构对 Si/Ge 纳米复合材料热导率的影响, 本文采用非平衡分子动力学方法对 Si/Ge 纳米复合材料导热过程进行模拟, 其导热模型如图 3 所示. 在该模型中, x 方向、 y 方

向均为周期性边界条件, z 方向通过 Nosé-Hoover 热浴施加微热流产生温度梯度并且热流沿 z 方向流动.

表 1 Si, Ge Tersoff 势函数的参数值

	Si	Ge
A/eV	1.8308×10^3	1.769×10^3
B/eV	4.7118×10^2	4.1923×10^3
$\lambda/\text{\AA}^{-1}$	2.4799	2.4451
$\mu/\text{\AA}^{-1}$	1.7322	1.7047
β	1.1000×10^{-6}	9.0166×10^{-7}
n	7.8734×10^{-1}	7.5627×10^{-1}
c	1.0039×10^5	1.0643×10^5
d	1.6217×10^1	1.5652×10^1
h	-5.9825×10^{-1}	-4.3884×10^{-1}
$R/\text{\AA}$	2.7	2.8
$S/\text{\AA}$	3.0	3.1

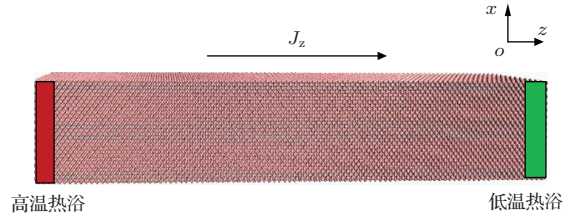


图 3 导热模型

在模拟中, 系统粒子的初始速度服从 Gaussian 分布, 采用 velocity-Verlet 算法计算粒子运动方程, 时间步长 $\Delta t = 0.5$ fs. 模拟热传导过程的总时间为 18 ns, 分为如下两个阶段: 第一阶段, 让系统处于正则系综 (NVT) 下弛豫 1 ns (即 20 万步), 维持系统温度 $T = 300$ K, 使系统趋于平衡; 第二阶段, 给系统施加一个恒定的热流 \mathbf{J} , 在微正则系综 (NVE) 下弛豫 8 ns (即 160 万步), 当热流方向上中间区域的温度呈线性分布, 即可认为系统达到稳态. 经过线性拟合得到时间平均温度梯度 ∇T , 则热导率 k 可表示为

$$k = -\frac{\mathbf{J}_z}{L_x L_y \nabla T}, \quad (4)$$

式中, \mathbf{J}_z 为恒定热流, $L_x L_y$ 为横截面积, ∇T 为温度梯度.

4 结果与讨论

4.1 温度分布

温度分布可反映纳米复合材料的热传递特性. 图4给出了嵌入Sierpinski分形结构纳米复合材料(系统尺寸为 $9 \text{ UC} \times 9 \text{ UC} \times 18 \text{ UC}$, $1 \text{ UC} = 0.5658 \text{ nm}$, 热流密度为 $25 \text{ eV} \cdot \text{ps}^{-1}$)沿轴向统计平均温度分布. 由图4可知, 在远离热源与热汇的纳米复合材料中心导热区域, 温度分布呈线性分布, 这与Fourier导热定律获得的温度分布一致. 但是, 在靠近热源与热汇的区域, 温度分布表现出明显的非线性特征, 这是由于维持热源与热汇区域恒温特性所致的声子强烈散射作用而导致的[19-21]. 需要指出的是, 在计算热导率的温度梯度时, 要排除靠近热源与热汇区域的非线性温度分布部分, 取中心导热区域温度分布进行线性拟合. 如图4所示, 中心导热区域温度分布的线性拟合由实线加以表征. 根据拟合直线获得温度梯度, 再结合热流密度, 由(4)式可计算得到纳米复合材料的热导率.

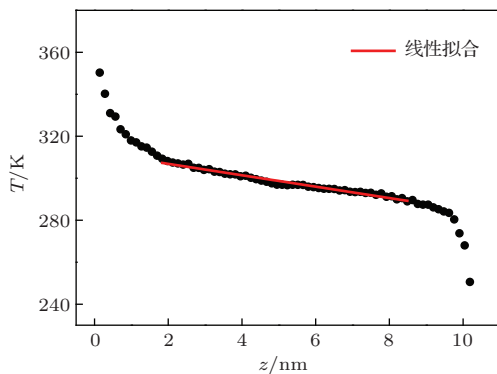


图4 轴向温度分布

4.2 Si原子百分比对热导率的影响

图5比较了嵌入Sierpinski分形结构和传统矩形结构Si/Ge复合纳米材料的热导率. 由图5可知, 在相同Si原子百分比 x 下, 嵌入Sierpinski分形结构的纳米复合材料热导率要比传统矩形结构的纳米复合材料热导率小. 在Sierpinski分形结构中, Si原子呈分散布置, 使得分形结构的面/体积比(surface to volume ratio)比传统矩形结构复合材料大, 即分形结构的Si/Ge相互作用的界面面积较传统矩形结构大. 文献[22]研究表明, 纳米复合材料的热导率主要由声子的平均自由程决定, 界面散射是

影响平均自由程的一个重要因素. 相对于矩形结构, 分形结构Si/Ge复合纳米材料由于Si/Ge相互作用的界面面积大, 使得界面散射作用强, 声子平均自由程降低, 从而增大界面热阻, 导致分形结构热导率小于传统矩形结构. 这表明嵌入Sierpinski分形结构的纳米复合材料在减小热导率方面更具优势, 有利于增大热电优值 ZT .

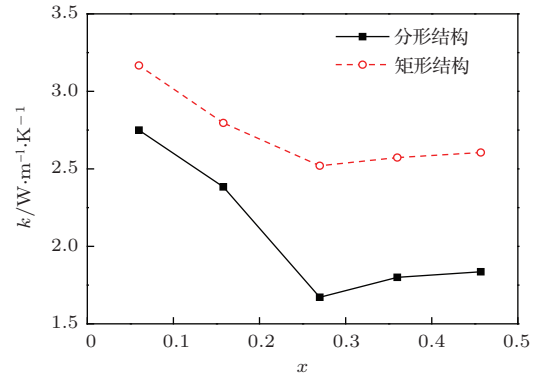


图5 Si原子百分比对热导率的影响(系统尺寸: $12 \text{ UC} \times 12 \text{ UC} \times 12 \text{ UC}$)

在宏观尺度情况下, Si/Ge复合材料的热导率随着Si原子数的增加而增加, 这是由于宏观尺度下Si的热导率要比Ge的热导率大. 但在纳米尺度条件下, Si/Ge复合材料则表现出了不同的趋势. 由图5可知, 热导率随着Si原子百分比 x 的增加先降低然后逐渐增加. 这是因为随着Si数目增加, Si/Ge相互作用的界面面积增加, 界面散射作用增强导致声子热传递能力减弱, 纳米复合材料热导率下降. 另外, Si的热导率要远大于Ge, 随着Si原子百分比的进一步增加, Si原子良好的导热性能对纳米复合材料热导率的贡献随之增加, 且该强化作用会逐渐强于界面散射的抑制作用, 所以随着Si原子百分比 x 的增加, 热导率会降低至一最低点, 然后将随着 x 的继续增加而增大.

4.3 系统尺寸对热导率的影响

当纳米复合材料的尺寸与系统的平均自由程相当时, 由于微尺度效应使得系统尺寸对纳米复合材料的热导率有着重要影响. 图6给出了嵌入Sierpinski分形结构和传统矩形结构的纳米复合材料热导率随轴向长度 L_z 的变化. 由图6可知, 纳米复合材料的轴向热导率随着轴向长度的增加而增大. 在纳米结构中, 声子界面散射和热边界阻力是影响热导率的主要因素[22]. 因此, 随着轴向长度的减小, 声子和边界碰撞的频率增加, 纳米复合材料

的热导率随着轴向长度的减小而减小。

截面尺寸也是影响纳米复合材料热导率的重要因素。当截面尺寸与平均自由程在同一个量级时,自由表面的声子边界散射将会阻碍声子的传播,进而影响材料的热导率。图7给出了Si原子百分比相同的情况下,Si/Ge纳米复合材料热导率随截面尺寸的变化。文献[23]研究表明,当截面尺寸 $L < 2.1$ UC (对应于 1.2 nm) 时,弹道输运在声子的输运中占主导地位,此时热导率与截面尺寸无关。随着截面尺寸的增大,薄膜边界对声子的散射作用将会对纳米复合材料热导率产生影响。如图7所示,在本文所给工况下,当截面尺寸从6 UC 增长到15 UC (对应于 3.4—8.5 nm),分形结构和矩形结构纳米复合材料的热导率均呈单调增加。这主要是因为随着截面尺寸 L 的增大,纳米复合材料的表面积增加,边界对声子的散射概率减小,总热阻减小,热导率增加。

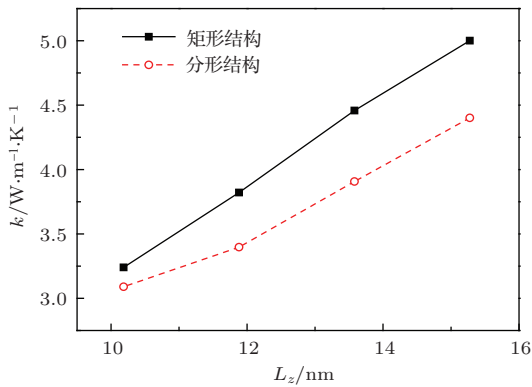


图6 轴向长度对热导率的影响 ($x = 0.21, L = 9$ UC)

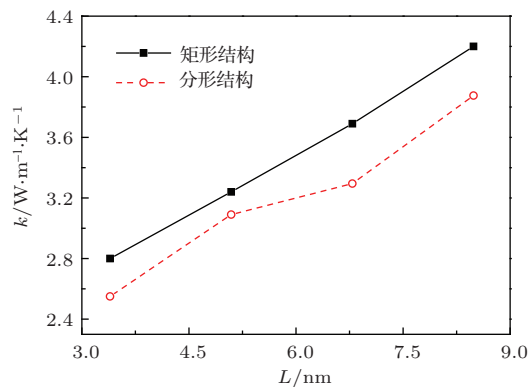


图7 截面尺寸对热导率的影响 ($x = 0.21, L_z = 18$ UC)

5 结 论

本文提出了一基于Sierpinski分形的纳米复合材料结构,采用非平衡分子动力学方法对Sierpinski

ki分形结构Si/Ge纳米复合材料导热性能进行了模拟研究,给出了硅原子百分比、轴向长度以及截面尺寸对分形结构纳米复合材料热导率的影响规律,并与矩形结构纳米复合材料进行了对比分析,提出了对复合纳米材料结构的一种改进方向。主要研究结论如下:

1) 相对于矩形结构,嵌入Sierpinski分形结构的纳米复合材料由于Si原子呈分散布置,提高了Si/Ge相互作用的界面面积,增强了界面散射作用,使得热导率明显低于嵌入矩形结构纳米复合材料,因此,嵌入Sierpinski分形结构纳米复合材料在增大无量纲热电优值 ZT 方面具有优势,这为提高材料的热电效率提供了一个有效途径;

2) 在远离热源与热汇的中心导热区域,纳米复合材料的温度呈线性分布,而靠近热源与热汇的区域由于声子散射作用使得温度分布呈现非线性特征;

3) 受Si/Ge界面散射和Si导热率大这两个因素的博弈作用,纳米复合材料热导率随着Si原子百分比的增加先呈减小趋势,当达到最小值后又随着Si原子百分比的增加而增大;

4) 系统尺寸对纳米复合材料热导率有重要影响,在本文所给工况下,Sierpinski分形纳米复合材料热导率随着轴向长度和截面尺寸的增加均呈单调增大的趋势。

纳米复合材料为发展高性能的新型材料和改善传统材料性能提供了新的途径。特别是分子自组装方法的广泛应用[24-26],为纳米复合材料的制备创造了更多的可能。本文基于分形几何提出了复合纳米材料结构的一种改进方向。

参考文献

- [1] Yang R, Chen G 2004 *Phys. Rev. B* **69** 195316
- [2] Jeng M S, Yang R, Song D, Chen G 2008 *J. Heat. Transfer* **130** 042410
- [3] Ordonez M J, Yang R, Alvarado-Gil J J 2011 *Appl. Phys. Lett.* **98** 233111
- [4] Hui Z X, He P F, Dai Y, Wu A H 2014 *Acta Phys. Sin.* **63** 074401 (in Chinese) [惠治鑫, 贺鹏飞, 戴瑛, 吴艾辉 2014 物理学报 **63** 074401]
- [5] Yang R, Chen G, Dresselhaus M S 2005 *Phys. Rev. B* **72** 125418
- [6] Chen G 1998 *Phys. Rev. B* **57** 14958
- [7] Hu M, Giapis K P, Goicochea J V, Zhang X L, Poulidakos D 2011 *Nano Lett.* **11** 618
- [8] Yang P, Wu Y S, Xu H F, Xu X X, Zhang L Q, Li P 2011 *Acta Phys. Sin.* **60** 066601 (in Chinese) [杨平, 吴

- 勇胜, 许海锋, 许鲜欣, 张立强, 李培 2011 物理学报 **60** 066601]
- [9] Liu J F, Zeng D L, Liu C, Li Q 2007 *J. Eng. Thermophys.* **28** 196 (in Chinese) [刘娟芳, 曾丹苓, 刘朝, 李勤 2007 工程热物理学报 **28** 196]
- [10] Cheaito R, Duda J C, Beechem T E, Hattar K, Ihlefeld J F, Medlin D L, Rodriguez M A, Campion M J, Piekos E S, Hopkins P E 2012 *Phys. Rev. Lett.* **109** 195901
- [11] Chen Y F, Li D Y, Lukes J R, Ni Z, Chen M 2005 *Phys. Rev. B* **72** 174302
- [12] Yang R, Chen G 2005 *Nano Lett.* **5** 1111
- [13] Li X B, Yang R 2013 *J. Appl. Phys.* **113** 104306
- [14] Bai S Y, Tang Z A, Huang Z X, Yu J, Wang J Q 2008 *Chin. Phys. Lett.* **25** 593
- [15] Wang H F, Chu W G, Guo Y J, Jin H 2010 *Chin. Phys. B* **19** 076501
- [16] Wu T Y, Lai W S, Fu B Q 2013 *Chin. Phys. B* **22** 076601
- [17] Yu B M, Li B W 2006 *Phys. Rev. E* **73** 066302
- [18] Tersoff J 1989 *Phys. Rev. B* **39** 5566
- [19] Oligschleger C, Schon J C 1999 *Phys. Rev. B* **59** 4125
- [20] Maiti A, Mahan G D 1997 *Solid. State. Commun.* **102** 517
- [21] Schelling P K, Phillpot S R, Keblinski P 2002 *Phys. Rev. B* **65** 144306
- [22] Chen G 2000 *Int. J. Therm. Sci.* **39** 471
- [23] Hu M, Zhang X L, Poulikakos D 2011 *Phys. Rev. B* **84** 085442
- [24] Yang Y, Lu Y F, Lu M C, Huang J M, Haddad R, X-omeritakis G, Liu N G, Malanoski A P, Sturmayer D, Fan H Y, Sasaki D Y, Assink R A, Shelnett J A, van Swol F, Lopez G P, Burns A R, Brinker C J 2003 *J. Am. Chem. Soc.* **125** 1269
- [25] Zhou X S, Yin Y X, Wan L J, Guo Y G 2012 *Adv. Energy Mater.* **2** 1086
- [26] Zhao Y J, Zhao X W, Hu J, Xu M, Zhao W J, Sun L J, Zhu C, Xu H, Gu Z Z 2009 *Adv. Mater.* **21** 569

Molecular dynamics simulation on thermal conductivity of nanocomposites embedded with fractal structure*

Zhang Cheng-Bin Cheng Qi-Kun Chen Yong-Ping[†]

(Key Laboratory of Energy Thermal Conversion and Control of Ministry of Education, School of Energy and Environment, Southeast University, Nanjing 210096, China)

(Received 5 May 2014; revised manuscript received 8 July 2014)

Abstract

Sierpinski carpet fractal structure is introduced into the construction of Si/Ge nanocomposites in this paper so as to regulate and control the thermal conductivity of the nanocomposites. Non-equilibrium molecular dynamics simulation is applied to investigate the thermal conduction performance of nanocomposites embedded with fractal structure. Effects of the silicon atom percent, axial length and cross-sectional dimensions on the thermal conductivity of nanocomposites embedded with fractal structure are analyzed and compared with the corresponding nanocomposites embedded with traditional rectangular structure. It is indicated that, owing to the enhanced scattering at the Si/Ge interfaces of nanocomposites embedded with fractal structure, their thermal conductivity are lower than that embedded with rectangular structure, thus providing an effective way to improve the thermoelectric efficiency. And it is also demonstrated that the thermal conductivity of nanocomposites embedded with fractal structure are affected by the silicon atoms percent, axial length and cross-sectional size. The thermal conductivity is first decreased and then increased with the increase of Si atom percent. In addition, the increase in axial length of nanocomposites may lead to the enhancement of thermal conduction.

Keywords: thermal conductivity, fractal, molecular dynamics, nanocomposites

PACS: 66.70.-f, 05.45.Df, 31.15.xv

DOI: 10.7498/aps.63.236601

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 11190015) and the Natural Science Foundation of Jiangsu Province, China (Grant No. BK20130621)

[†] Corresponding author. E-mail: ypchen@seu.edu.cn