

## 含有倾斜界面硅/锗超晶格的导热性能

刘英光 任国梁 郝将帅 张静文 薛新强

### Thermal conductivity of Si/Ge superlattices containing tilted interface

Liu Ying-Guang Ren Guo-Liang Hao Jiang-Shuai Zhang Jing-Wen Xue Xin-Qiang

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 70, 113101 (2021) DOI: 10.7498/aps.70.20201807

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.70.20201807>

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

#### 包含倾斜晶界的双晶ZnO的热输运行为

Heat transport behavior of bicrystal ZnO containing tilt grain boundary

物理学报. 2020, 69(3): 033101 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20190627>

#### 交联对硅橡胶热导率影响的分子动力学模拟

Molecular dynamics simulation of effect of crosslinking on thermal conductivity of silicone rubber

物理学报. 2020, 69(19): 196601 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20200737>

#### 基于分子动力学的石墨炔纳米带空位缺陷的导热特性

Based on the molecular dynamics characteristic research of heat conduction of graphyne nanoribbons with vacancy defects

物理学报. 2017, 66(13): 136801 <https://doi.org/10.7498/aps.66.136801>

#### 基于GaAs/Al<sub>0.45</sub>Ga<sub>0.55</sub>As超晶格芯片自发混沌振荡的8 Gb/s物理真随机数实现

Generation of 8 Gb/s physical random numbers based on spontaneous chaotic oscillation of GaAs/Al<sub>0.45</sub>Ga<sub>0.55</sub>As superlattices

物理学报. 2020, 69(10): 100504 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20200136>

#### 界面结构对Cu/Ni多层膜纳米压痕特性影响的分子动力学模拟

Influence of interface structure on nanoindentation behavior of Cu/Ni multilayer film: Atomic scale simulation

物理学报. 2018, 67(19): 190202 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20180958>

#### 纳米尺度下Si/Ge界面应力释放机制的分子动力学研究

Molecular dynamics study of release mechanism of stress at Si/Ge interface on a nanoscale

物理学报. 2019, 68(2): 026801 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20181530>

## 含有倾斜界面硅/锗超晶格的导热性能\*

刘英光<sup>†</sup> 任国梁 郝将帅 张静文 薛新强

(华北电力大学能源动力与机械工程学院, 保定 071003)

(2020 年 10 月 30 日收到; 2021 年 1 月 23 日收到修改稿)

采用非平衡分子动力学 (NEMD) 方法模拟含有倾斜界面的硅/锗 (Si/Ge) 超晶格在不同倾斜角、不同周期长度、不同样本长度和不同温度下的导热性能. 模拟结果表明, Si/Ge 超晶格的热导率随着界面倾斜角的增加而非单调变化. 当周期长度为 4—8 原子层时, 界面倾斜角为 45° 的热导率比其他界面倾斜角时热导率增大了数量级, 且热导率随样本长度的增加而增加, 随温度的增加而减小. 然而当周期长度为 20 原子层时, 由于声子局域化的存在, 热导率对样本长度和温度的依赖性都较弱.

**关键词:** 超晶格, 倾斜角, 热导率, 分子动力学**PACS:** 31.15.xv, 44.10.+i**DOI:** 10.7498/aps.70.20201807

## 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, 具有方便、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<sup>[1–4]</sup>. 目前热电材料的能量转换效率采用无量纲热电优值 ( $ZT$ ) 来衡量,  $ZT = S^2 \sigma T / \kappa$ , 其中  $S$ ,  $\sigma$ ,  $\kappa$  和  $T$  分别为塞贝克系数、电导率、热导率和绝对温度. 一般来说追求高的  $ZT$  值需要塞贝克系数  $S$  和电导率  $\sigma$  最大化的同时减小热导率  $\kappa$ . 由于纳米结构材料在对电导率和塞贝克系数影响较小的前提下可显著降低材料热导率从而提高热电转换效率, 因此近年来纳米结构材料的热输运问题引起了广泛的研究兴趣<sup>[5,6]</sup>. 超晶格是典型的由相同或者不同材料周期排列组成的纳米结构, 是热电转换领域的优秀候选材料之一<sup>[7–10]</sup>, 所以学者们针对超晶格周期长度<sup>[11–13]</sup>、样本长度<sup>[14–16]</sup>和界面粗糙度<sup>[17,18]</sup>

等方面对其导热性能的影响做了广泛的研究, 并取得了一系列显著进展.

界面角度是影响多晶和复合材料导热性能的重要因素, 国内外研究者对其开展了许多研究, 如 Elapolu 等<sup>[19]</sup>采用反非平衡分子动力学模拟方法研究了含对称倾斜晶界的二维六方氮化硼纳米带的热导率, 研究发现在晶界角度  $\theta < 27.79^\circ$  时, 热导率随着倾斜角的增加而减小. 作者将其归因于随着倾斜角的增加, 晶界缺陷密度增加, 声子散射增加所致. 我们<sup>[20]</sup>采用 NEMD 方法研究了双晶 ZnO 在更大倾斜角范围内的卡皮查热阻, 结果发现卡皮查热阻具有明显的尺寸效应, 在小角度 ( $\theta < 36.86^\circ$ ) 区域受倾斜角的影响较大, 其卡皮查热阻随着倾斜角呈线性增加, 而在大角度 ( $\theta > 36.86^\circ$ ) 区域受倾斜角的影响较小, 所以热导率变化也相对较小.

Fujii 等<sup>[21]</sup>采用 MD 方法对 MgO 中对称倾斜晶界的晶格热传导进行了系统的研究, 结果表明, 小角度对称倾斜晶界主要降低低频声子热输运,

\* 国家自然科学基金 (批准号: 52076080)、河北省自然科学基金 (批准号: E2020502011) 和中央高校基本科研业务费 (批准号: 2020MS105) 资助的课题.

<sup>†</sup> 通信作者. E-mail: liuyingguang@ncepu.edu.cn

而高角度对称倾斜晶界主要降低中、高频声子热输运,从而使得高角度对称倾斜晶界热导率总体小于低角度对称倾斜晶界热导率. Bagri 等<sup>[22]</sup>研究了晶粒尺寸和倾斜角对石墨烯导热性能的影响,研究发现,界面角度对热导率的影响与晶粒尺寸相关,且存在一临界尺寸,当临界晶粒尺寸在  $0.1\ \mu\text{m}$  以下时,倾斜边界对热导率的贡献可以与晶粒本身的贡献相当. 而在晶粒尺寸大于  $0.1\ \mu\text{m}$  时,石墨烯晶体热导率主要受声子在晶粒内部的散射决定,晶界散射对热导率的贡献随着晶粒尺寸的增加逐渐消失. 研究人员还发现,某一界面倾斜角度下材料热导率可能与其他角度下有很大不同,例如 Tan 等<sup>[23]</sup>利用真空热蒸发技术制备了具有倾斜结构的  $(\text{Sb}, \text{Bi})_2\text{Te}_3$  纳米线,发现倾斜角为  $45^\circ$  的纳米线阵列在室温下具有很高的热导率,说明独特的倾斜结构在影响声子输运特性方面起关键作用.

受以上研究启发,可以知道界面角度也会对超晶格热导率产生重要影响,是调控热导率的一个重要参数. 所以,为了揭示界面角度对热导率影响的规律,发现不同倾斜角下声子的输运机理,本文采用 NEMD 模拟方法研究含有不同倾斜角的 Si/Ge 超晶格的导热特性,同时综合考虑了周期长度、样本长度和温度对试样热导率的影响.

## 2 模拟方法及步骤

本文所采用的超晶格导热模型如图 1 所示. 在  $X, Y$  方向上施加周期性边界条件,在结构完全弛豫后在  $Z$  方向施加固定边界条件. 由于截面积过小会对计算结果产生较大的误差<sup>[24]</sup>,因此在本文中我们选取  $XOY$  截面积为  $4\ \text{UC} \times 4\ \text{UC}$  ( $\text{UC}$  为晶胞长度). 为了建立热流方向的温度梯度,在  $Z$  方向上布置恒温器. 首先将两边固定 10 原子层厚度为固定边界,防止与外界产生热量交换,并将该区域内粒子的速度设置为 0. 然后分别将紧邻边界区域的 3  $\text{UC}$  厚度设置为热源和热汇,以建立温度梯度. 我们将一对连续的 Si 层和 Ge 层的总厚度定义为周期长度,利用  $2_{\text{Si}} \times 2_{\text{Ge}}$ 、 $4_{\text{Si}} \times 4_{\text{Ge}}$  和  $10_{\text{Si}} \times 10_{\text{Ge}}$  分别表示周期长度为 4, 8 和 20 原子层厚度的 Si/Ge 超晶格. 本文中主要计算 3 种不同周期长度 ( $2_{\text{Si}} \times 2_{\text{Ge}}$ 、 $4_{\text{Si}} \times 4_{\text{Ge}}$  和  $10_{\text{Si}} \times 10_{\text{Ge}}$ ) 和 5 种不同的倾斜角 ( $30^\circ$ ,  $45^\circ$ ,  $60^\circ$ ,  $75^\circ$ ,  $90^\circ$ ) 的结构如图 2 所示.

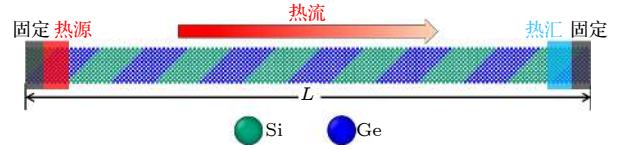


图 1 NEMD 模拟计算热性质的示意图

Fig. 1. Schematic diagram of the NEMD model for calculating the thermal properties.

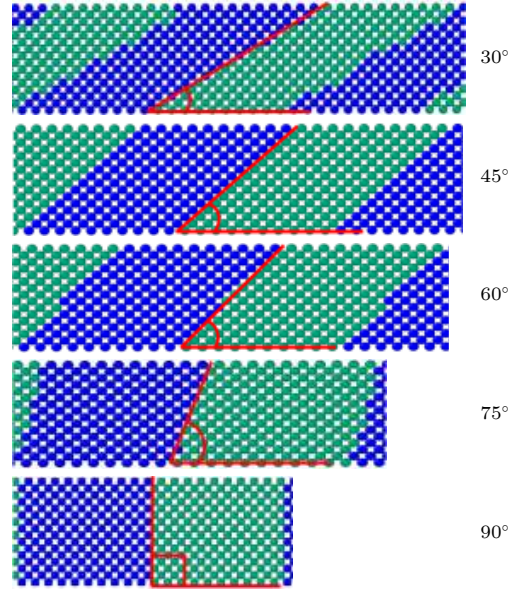


图 2 周期长度为 20 原子层厚度时不同界面倾斜角的示意图

Fig. 2. Schematic diagram of different tilted interface angles with the period length of 20 atomic layers.

所有的模拟过程都是基于 LAMMPS 软件进行的<sup>[25]</sup>, 模拟计算中时间步长采用  $0.001\ \text{ps}$ . 在 MD 模拟中, 采用 Tersoff 多体势函数描述 Si-Si, Si-Ge, Ge-Ge 原子间相互作用. 首先, 在零温度条件下对体系进行能量最小化, 优化原子位置; 然后, 在正则系综 (NVT) 下进行  $1\ \text{ns}$  的平衡态模拟来达到控制的温度和体积; 最后, 使用朗之万热浴在微正则系综 (NVE) 下施加温度梯度并测量热流值.

在稳定状态下超晶格内部建立线性温度梯度, 而在体系的两端存在非线性区域. 在界面处温度不连续, 具有非常明显的温度跳跃. 卡皮查热阻  $R$  为界面处的温度跳跃  $\Delta T$  与热流密度  $J$  之比,

$$R = \frac{\Delta T}{J}. \quad (1)$$

$Z$  方向热流密度  $J_Z$  的计算公式为

$$J_Z = \frac{1}{A} \sum_{i \in \text{hot bath}} \frac{d}{dt} E_i(t), \quad (2)$$

其中,  $E$  为能量,  $t$  为模拟时间,  $A$  为横截面积. 然后通过傅里叶定律计算超晶格热导率:

$$\kappa = -\frac{J_Z}{\left(\frac{\partial T}{\partial Z}\right)}, \quad (3)$$

其中  $\frac{\partial T}{\partial Z}$  为沿  $Z$  方向温度梯度.

声子态密度 (phonon density of states, PDOS) 是表征材料中声子活动的一种有效的方法. 根据所有原子的速度自关联函数 (velocity autocorrelation function, VACF) 的傅里叶变换<sup>[26]</sup> 计算得到 PDOS:

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

其中速度自关联函数 (VACF) 由 (5) 式定义:

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

其中,  $N$  为原子总数,  $\mathbf{v}_i(t)$  为  $t$  时刻  $i$  原子的速度矢量,  $\mathbf{v}_i(0)$  为原子的初速度,  $\langle \rangle$  为系综平均.

声子参与率 (phonon participation ratio, PPR) 是了解声子输运的另一种有效方法<sup>[27–29]</sup>, 尤其是定量描述声子局域化效应<sup>[30]</sup>:

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

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

### 3 结果与讨论

#### 3.1 界面角对热导率的影响

我们计算了样本长度为 32.6 nm、温度为 300 K 下不同倾斜角时  $2_{\text{Si}} \times 2_{\text{Ge}}$ ,  $4_{\text{Si}} \times 4_{\text{Ge}}$  和  $10_{\text{Si}} \times 10_{\text{Ge}}$  周期超晶格热导率, 如图 3 所示. 从图中明显地看到  $10_{\text{Si}} \times 10_{\text{Ge}}$  周期超晶格热导率对倾斜角具有较弱的敏感度. 当倾斜角从  $30^\circ$  增加到  $75^\circ$  时, 由于卡皮查热阻的增加, 热导率呈现略微降低的趋势; 而倾斜角从  $75^\circ$  继续增加至  $90^\circ$  时, 由于在此范围内 Si/Ge 界面粗糙度减小, 界面变得相对光滑, 部分长波声子会以相干模式输运, 从而热导率会略微升高.

与  $10_{\text{Si}} \times 10_{\text{Ge}}$  周期超晶格不同的是, 在  $2_{\text{Si}} \times 2_{\text{Ge}}$  和  $4_{\text{Si}} \times 4_{\text{Ge}}$  周期超晶格中, 可以发现在倾斜角为  $45^\circ$  时, 热导率出现了一个明显的峰值, 其热导率约为  $10_{\text{Si}} \times 10_{\text{Ge}}$  周期 Si/Ge 超晶格的 3 倍. 这是因为在倾斜角为  $45^\circ$  时, Si/Ge 界面比较光滑, 大部分声子在 Si/Ge 超晶格中进行相干性输运. 为了验证此结论的合理性, 我们计算了界面角度为  $45^\circ$  时  $4_{\text{Si}} \times 4_{\text{Ge}}$  和  $10_{\text{Si}} \times 10_{\text{Ge}}$  两种周期 Si/Ge 超晶格的 PDOS, 如图 4 所示. 从图中可以看出, 在  $4_{\text{Si}} \times 4_{\text{Ge}}$  周期 Si/Ge 超晶格中, 低频声子的峰值较多, 这说明有更多的相干性声子参与热传导. 而在  $10_{\text{Si}} \times 10_{\text{Ge}}$  周期 Si/Ge 超晶格的 PDOS 中, 相对于  $4_{\text{Si}} \times 4_{\text{Ge}}$  周期 Si/Ge 超晶格的峰值, 其明显的峰值发生了“左移”, 而较窄的声子频带表明热导率较低<sup>[31]</sup>, 这与图 3 中结果保持一致. 为了进一步解释在倾斜角度为  $45^\circ$  时短周期结构的热导率明显

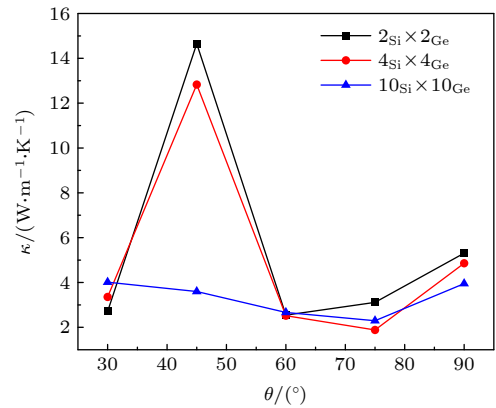


图 3 不同周期长度下热导率与倾斜角的关系

Fig. 3. The relationship between thermal conductivity and tilted angle as the different period length.

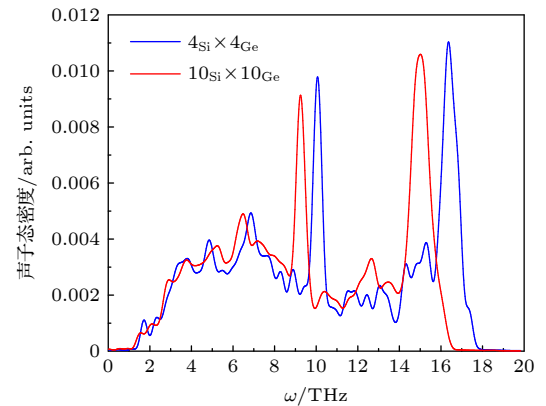


图 4 不同周期长度 Si/Ge 超晶格的声子态密度

Fig. 4. The PDOS of Si/Ge superlattices with different period lengths.



高于  $10_{\text{Si}} \times 10_{\text{Ge}}$  结构的热导率, 我们计算了通过  $4_{\text{Si}} \times 4_{\text{Ge}}$  和  $10_{\text{Si}} \times 10_{\text{Ge}}$  结构的界面声子频谱热流 [32]. Si-Ge 界面的单向光谱热流  $q(\omega)$  定义为 [33,34]:

$$q(\omega) = \frac{2}{A} \text{Re} \sum_{j \in \text{Ge}} \sum_{i \in \text{Si}} \int_{-\infty}^{\infty} d\tau e^{i\omega\tau} \langle \mathbf{F}_{ij}(\tau) \cdot \mathbf{v}_i(0) \rangle, \quad (7)$$

其中,  $A$  为截面面积,  $\mathbf{v}_i$  为 Si 界面上的原子速度,  $\mathbf{F}_{ij}$  为原子通过 Si-Ge 界面时的力. 光谱界面热导可以计算为  $G(\omega) = |q(\omega)|/\Delta T$ , 其中  $\Delta T$  为通过界面时的温度降. 最后计算界面的总热阻为 [33,34]

$$\frac{1}{R} = \int_0^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} G(\omega) = \Delta f \frac{\sum |q(\omega)|}{\Delta T}, \quad (8)$$

其中,  $\Delta f$  为离散的频率区间. 图 5 为 SiGe 界面的 NEMD 模拟的频谱界面热导  $G(\omega)$  的计算结果. 根据图 5 可以发现, 在中低频范围 ( $\omega < 16$  THz) 内,  $4_{\text{Si}} \times 4_{\text{Ge}}$  结构的超晶格的频谱热导高于  $10_{\text{Si}} \times 10_{\text{Ge}}$  结构超晶格的频谱热导. 这是由于中低频声子具有较长的波长, 通过短周期长度的超晶格时不易发生散射和局域化现象, 对热导贡献较大. 对  $10_{\text{Si}} \times 10_{\text{Ge}}$  结构的超晶格, 声子通过界面时容易发生散射和局域化效应, 频谱热导较低, 因此  $4_{\text{Si}} \times 4_{\text{Ge}}$  结构的超晶格的热导率明显高于  $10_{\text{Si}} \times 10_{\text{Ge}}$  结构的超晶格的热导率. 随着倾斜角继续增加至  $60^\circ$  的过程中, Si/Ge 界面逐渐变得粗糙, 破坏了声子的相干性, 因此在界面角度大于  $45^\circ$  时热导率急剧下降. 为了解释这一现象, 计算  $4_{\text{Si}} \times 4_{\text{Ge}}$  结构的  $30^\circ$ ,  $45^\circ$ ,  $60^\circ$  时的 PDOS, 如图 6 所示. 从图 6 可以看出, 倾斜角为  $45^\circ$  时的 PDOS 在 5, 7, 10 THz

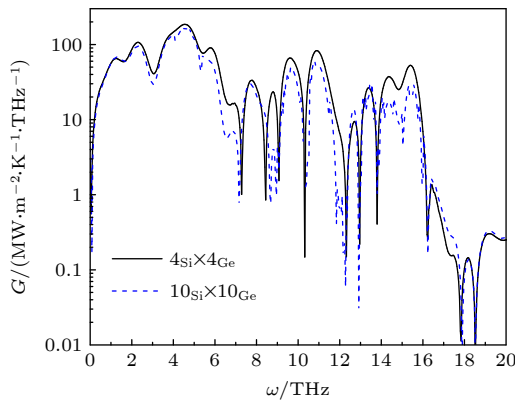


图 5 倾斜角度为  $45^\circ$  时  $4_{\text{Si}} \times 4_{\text{Ge}}$  和  $10_{\text{Si}} \times 10_{\text{Ge}}$  超晶格的频谱热导

Fig. 5. Spectral thermal conductance of  $4_{\text{Si}} \times 4_{\text{Ge}}$  and  $10_{\text{Si}} \times 10_{\text{Ge}}$  superlattices at the tilt angle of  $45^\circ$ .

时比其他两个角度的 PDOS 多了三个明显的峰值, 这说明粗糙度极大地恶化了声子相干性输运. 而当倾斜角从  $60^\circ$  增加到  $90^\circ$ , 由于界面变的相对平滑, 导热系数又开始上升, 这与  $10_{\text{Si}} \times 10_{\text{Ge}}$  周期 Si/Ge 超晶格是一致的.

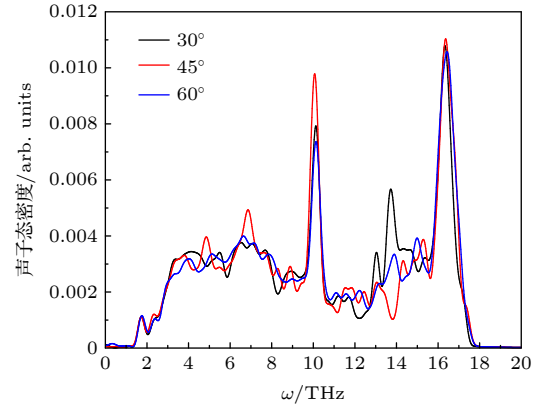


图 6 不同倾斜角下 Si/Ge 超晶格的声子态密度

Fig. 6. The PDOS of Si/Ge superlattices with different tilted angle.

### 3.2 声子局域化

图 7 为  $2_{\text{Si}} \times 2_{\text{Ge}}$ 、 $4_{\text{Si}} \times 4_{\text{Ge}}$  和  $10_{\text{Si}} \times 10_{\text{Ge}}$  周期 Si/Ge 超晶格在不同样本长度下的热导率的变化, 其倾斜角和温度设置为  $45^\circ$  和 300 K. 从图中可以看到, 由于声子的相干性输运,  $2_{\text{Si}} \times 2_{\text{Ge}}$  和  $4_{\text{Si}} \times 4_{\text{Ge}}$  周期 Si/Ge 超晶格的热导率随样本长度的增加呈线性增加 [35,36]. 由于声子的平均自由程大于或等于样本长度, 声子通过界面时保持其相位信息不变, 只与样本边界发生散射, 由动力学理论  $\kappa = \frac{1}{3} C v \Lambda$  和声子-边界散射所引起的弛豫时间

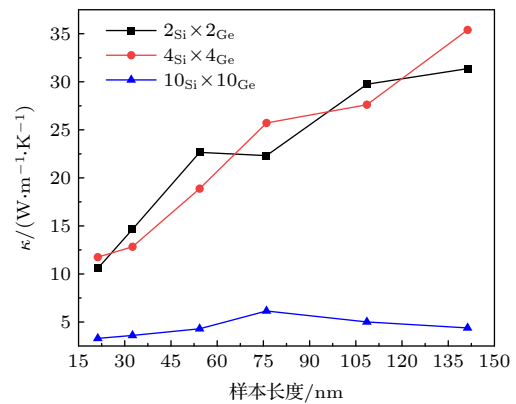


图 7 Si/Ge 超晶格热导率与样本长度的关系

Fig. 7. Thermal conductivity of Si/Ge superlattice vs. sample total length.

$\tau^{-1} = b_s v / L$  可知<sup>[37]</sup>, 热导率与样本总长度成正比. 然而,  $10_{\text{Si}} \times 10_{\text{Ge}}$  周期 Si/Ge 超晶格的热导率随着样本长度的增加呈现非线性趋势, 其值先增大后减小. 这是因为尽管  $10_{\text{Si}} \times 10_{\text{Ge}}$  周期 Si/Ge 超晶格的周期长度处于非相干性区域, 但是仍有一部分声子参与相干性传输. 而随着样本长度继续增加, 相干声子发生局域化, 不再对热传导起作用, 因此热导率随着样本长度的增加而呈现减小的趋势.

图 8 显示了倾斜角为  $45^\circ$ 、样本长度为 32.6 nm 时不同周期长度结构超晶格的热导率与温度的关系. 我们发现  $2_{\text{Si}} \times 2_{\text{Ge}}$  和  $4_{\text{Si}} \times 4_{\text{Ge}}$  周期 Si/Ge 超晶格的热导率随温度的升高呈现下降的趋势, 这是由于随着温度的升高, 原子振动增强, 导致 Umklapp 过程的散射增强, 热导率逐渐降低<sup>[20,35,36]</sup>. 与  $2_{\text{Si}} \times 2_{\text{Ge}}$  和  $4_{\text{Si}} \times 4_{\text{Ge}}$  周期 Si/Ge 超晶格的热导率趋势相反的是,  $10_{\text{Si}} \times 10_{\text{Ge}}$  周期 Si/Ge 超晶格的热导率对温度不太敏感. 这主要由于声子的散射过程和声子局域化两种竞争效应引起的. 在  $10_{\text{Si}} \times 10_{\text{Ge}}$  周期 Si/Ge 超晶格中, 随着温度的升高, 声子的相干性的恶化将削弱局域化机制, 从而导致热导率的增加; 而同时由于超晶格中的非相干性声子的 Umklapp 散射, 使热导率呈  $1/T$  变化趋势, 这将导致  $10_{\text{Si}} \times 10_{\text{Ge}}$  周期 Si/Ge 超晶格热导率随温度的升高而下降. 这两种机制共同作用使得  $10_{\text{Si}} \times 10_{\text{Ge}}$  周期 Si/Ge 超晶格热导率基本保持不变.

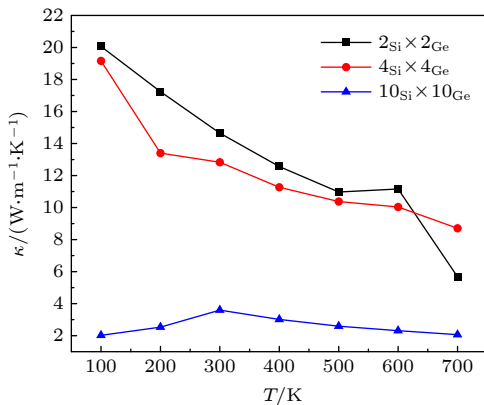


图 8 Si/Ge 超晶格热导率与温度的关系

Fig. 8. Temperature dependent thermal conductivity of Si/Ge superlattice.

为了说明局域化现象, 我们根据 (6) 式计算了不同周期长度结构中声子参与率, 如图 9 所示. 从图 9(a) 中可以看出无论是低频声子还是高频声子,

其声子参与率都随着周期长度的增加而减小. 即随着周期长度的增加, 越来越多的声子表现出局域化的特征. 正如我们计算的那样, 由于声子局域化效应,  $10_{\text{Si}} \times 10_{\text{Ge}}$  周期 Si/Ge 超晶格的热导率通常小于  $2_{\text{Si}} \times 2_{\text{Ge}}$  和  $4_{\text{Si}} \times 4_{\text{Ge}}$  周期 Si/Ge 超晶格的热导率. 从图 9(b) 中发现声子参与率随着样本长度的增加而减小. 在 12.5—16.0 THz 频率下, 样本长度为 108.6 nm 时的声子参与率明显小于 54.3712 nm 时的值, 表现出更明显的局域化效应. 这些结果也更好地支持了图 7 中声子局域化的定性讨论.

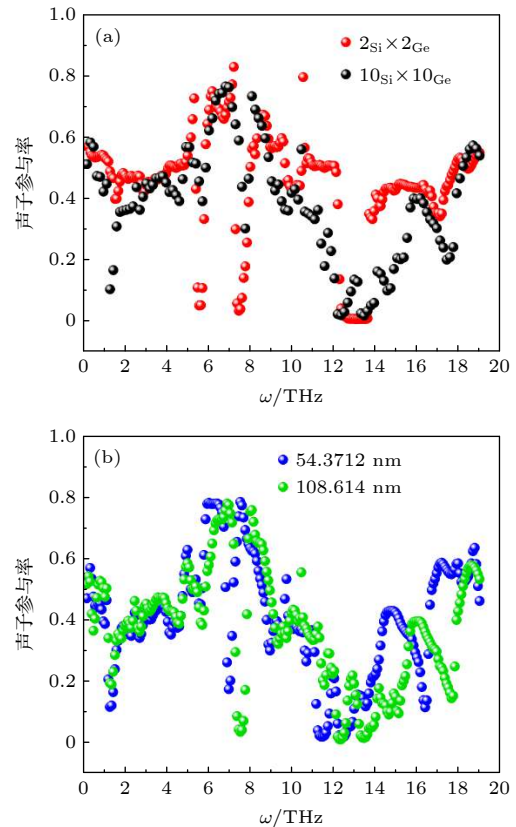


图 9 (a) 不同周期长度时的声子参与率; (b) 不同样本长度的声子参与率

Fig. 9. (a) The participation ratio of superlattices with different period length; (b) the participation ratio of superlattices with different sample length.

## 4 结 论

本文采用 NEMD 方法研究了含有倾斜界面的 Si/Ge 超晶格的热输运性质. 系统地分析了倾斜角、周期长度, 样本长度及温度对热导率的影响. 模拟结果如下.

1) 不同周期长度超晶格的热导率随倾斜角的变化而变化, 并呈现出非单调的趋势. 光滑的界面

促进了声子的相干输运. 因此, 当界面角为  $45^\circ$  时, 超晶格的热导率几乎比其他角度大一个数量级.

2) 由于声子-声子散射和声子局域化的竞争机制,  $10_{\text{Si}} \times 10_{\text{Ge}}$  周期 Si/Ge 超晶格对倾斜角度、样本总长度和温度的敏感性都较低.

3) 在低周期长度 ( $2_{\text{Si}} \times 2_{\text{Ge}}$ ,  $4_{\text{Si}} \times 4_{\text{Ge}}$ ) 的超晶格中, 声子的相干输运和非相干输运对导热系数同样重要. 界面粗糙度的增加会严重破坏声子的相干输运. 而改善声子的相干输运可以显著提高材料的热导率.

通过优化倾斜角和周期长度, Si/Ge 超晶格可以成为很好的高性能、高效热电材料的候选材料. 这为材料的结构配置提供了一种新的控制方法, 从而改善材料的性能.

## 参考文献

- [1] Zhang Y, Wu L H, Zengli J K, Liu Y F, Zhang J Y, Xing J J, Luo J 2016 *Acta. Phys. Sin.* **65** 107201 (in Chinese) [张玉, 吴立华, 曾李骄开, 刘叶烽, 张继业, 邢娟娟, 骆军 2016 物理学报 **65** 107201]
- [2] Zhang C B, Cheng Q K, Chen Y P 2014 *Acta. Phys. Sin.* **63** 236601 (in Chinese) [张程宾, 程启坤, 陈永平 2014 物理学报 **63** 236601]
- [3] Chen Z Y, Wang R F, Wang G Y, Zhou X Y, Wang Z S, Yin C, Hu Q, Zhou B Q, Tang J, Ang R 2018 *Chin. Phys. B* **27** 47202
- [4] Wang K X, Wang J W, Li Y, Zou T, Wang X H, Li J B, Cao Z, Shi W J, Xinba Yaer 2018 *Chin. Phys. B* **27** 48401
- [5] Xu X, Zhou J, Chen J 2020 *Adv. Funct. Mater* **30** 1904704
- [6] Zhang Z W, Ouyang Y L, Cheng Y, Chen J, Li N B, Zhang G 2020 *Phys. Rep.-Rev. Sec. Phys. Lett.* **860** 1
- [7] 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]
- [8] Yang R, Chen G 2004 *Phys. Rev. B* **69** 195316
- [9] Chen G 1998 *Phys. Rev. B* **57** 14958
- [10] Hu M, Poulidakos D 2012 *Nano Lett.* **12** 5487
- [11] Juntunen T, Vänskä O, Tittonen I 2019 *Phys. Rev. Lett.* **122** 105901
- [12] Xiong R, Yang C, Wang Q, Zhang Y, Li X 2019 *Int. J. Thermophys.* **40** 86
- [13] Garg J, Bonini N, Marzari N 2011 *Nano Lett.* **11** 5135
- [14] 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 F, Fitzgerald E A, Chen G 2012 *Science* **338** 936
- [15] Cheaito R, Polanco C A, Addamane S, Zhang J, Ghosh A W, Balakrishnan G, Hopkins P E 2018 *Phys. Rev. B* **97** 085306
- [16] Tian Z, Esfarjani K, Chen G 2014 *Phys. Rev. B* **89** 235307
- [17] Tian Z, Esfarjani K, Chen G 2012 *Phys. Rev. B* **86** 235304
- [18] Garg J, Chen G 2013 *Phys. Rev. B* **87** 93
- [19] Elapolu M S R, Tabarraei A 2018 *Comput. Mater. Sci.* **144** 161
- [20] Liu Y G, Bian Y Q, Han Z H 2020 *Acta. Phys. Sin.* **69** 033101 (in Chinese) [刘英光, 边永庆, 韩中合 2020 物理学报 **69** 033101]
- [21] Fujii S, Yokoi T, Yoshiya M 2019 *Acta Mater.* **171** 154
- [22] Bagri A, Kim S P, Ruoff R S, Shenoy V B 2011 *Nano Lett.* **11** 3917
- [23] Tan M, Hao Y, Deng Y, Yan D, Wu Z 2018 *Sci Rep* **8** 6384
- [24] Schelling P K, Phillpot S R, Keblinski P 2002 *Phys. Rev. B* **65** 144306
- [25] Plimpton S 1995 *J. Comput. Phys.* **117** 1
- [26] Dickey J M, Paskin A 1969 *Phys. Rev.* **188** 1407
- [27] Chen J, Zhang G, Li B 2010 *Nano Lett.* **10** 3978
- [28] Zhang Z, Chen Y, Xie Y, Zhang S 2016 *Appl. Therm. Eng.* **102** 1075
- [29] Zhang Z W, Hu S Q, Xi Q, Nakayama T, Volz S, Chen J, Li B W 2020 *Phys. Rev. B* **101** 081402 6
- [30] Liang T, Zhou M, Zhang P, Yuan P, Yang D 2020 *Int. J. Heat Mass Transfer* **151** 119395
- [31] Liu Q, Luo H, Wang L, Shen S 2017 *J. Phys. D-Appl. Phys.* **50** 065108
- [32] Ma Y L, Zhang Z W, Chen J G, Saaskilahti K, Volz S, Chen J 2018 *Carbon* **135** 263
- [33] Sääskilahti K, Oksanen J, Tulkki J, Volz S 2014 *Phys. Rev. B* **90** 134312
- [34] Sääskilahti K, Oksanen J, Tulkki J, Volz S 2016 *Phys. Rev. E* **93** 052141
- [35] Hu S Q, Zhang Z W, Jiang P F, Ren W J, Yu C Q, Shiomi J, Chen J 2019 *Nanoscale* **11** 11839
- [36] 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
- [37] Zhang Z W, Hu S Q, Nakayama T, Chen J, Li B W 2018 *Carbon* **139** 289

# Thermal conductivity of Si/Ge superlattices containing tilted interface<sup>\*</sup>

Liu Ying-Guang<sup>†</sup> Ren Guo-Liang Hao Jiang-Shuai  
Zhang Jing-Wen Xue Xin-Qiang

(School of Energy, Power and Mechanical Engineering, North China Electric Power University, Baoding 071003, China)

( Received 30 October 2020; revised manuscript received 23 January 2021 )

## Abstract

The non-equilibrium molecular dynamics (NEMD) method is used to study the thermal conductivities of Si/Ge superlattices with tilted interface under different period lengths, different sample lengths, and different temperatures. The simulation results are as follows. The thermal conductivity of Si/Ge superlattices varies nonmonotonically with the increase of interface angle: when the period length is 4–8 atomic layers, the thermal conductivity for the interface angle of 45° is one order of magnitude larger than those for other interface angles, and the thermal conductivity increases linearly with the sample length increasing and decreases with the temperature increasing. However, when the period length is 20 atomic layers, the thermal conductivity is weakly dependent on sample length and temperature due to the existence of phonon localization.

**Keywords:** superlattices, tilt angle, thermal conductivity, molecular dynamic simulation

**PACS:** 31.15.xv, 44.10.+i

**DOI:** 10.7498/aps.70.20201807

---

<sup>\*</sup> Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 52076080), the Natural Science Foundation of Hebei Province, China (Grant No. E2020502011), and the Fundamental Research Fund for the Central Universities, China (Grant No. 2020MS105).

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