

基于界面原子混合的材料导热性能

刘英光 薛新强 张静文 任国梁

Thermal conductivity of materials based on interfacial atomic mixing

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

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 71, 093102 (2022) DOI: 10.7498/aps.71.20211451

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.71.20211451>

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

含有倾斜界面硅/锗超晶格的导热性能

Thermal conductivity of Si/Ge superlattices containing tilted interface

物理学报. 2021, 70(11): 113101 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20201807>

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>

GaN薄膜的热导率模型研究

Thermal conductivity modeling of GaN films

物理学报. 2021, 70(4): 045101 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20201611>

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>

离子辐照对磷烯热导率的影响及其机制分析

Effect of ion irradiation on thermal conductivity of phosphorene and underlying mechanism

物理学报. 2022, 71(5): 056101 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20211857>

基于GaAs/Al_{0.45}Ga_{0.55}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_{0.45}Ga_{0.55}As superlattices

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

基于界面原子混合的材料导热性能*

刘英光[†] 薛新强 张静文 任国梁

(华北电力大学能源动力与机械工程学院, 保定 071003)

(2021 年 8 月 7 日收到; 2021 年 12 月 25 日收到修改稿)

构造了界面具有原子混合的硅锗 (Si/Ge) 单界面和超晶格结构. 采用非平衡分子动力学模拟研究了界面原子混合对于单界面和超晶格结构热导率的影响, 重点研究了界面原子混合层数、环境温度、体系总长以及周期长度对不同晶格结构热导率的影响. 结果表明: 由于声子的“桥接”机制, 2 层和 4 层界面原子混合能提高单一界面和少周期数的超晶格的热导率, 但是在多周期体系中, 具有原子混合时的热导率要低于完美界面时的热导率; 界面原子混合会破坏超晶格中声子的相干性输运, 一定程度引起热导率降低; 完美界面超晶格具有明显的温度效应, 而具有原子混合的超晶格热导率对温度的敏感性较低.

关键词: 单界面, 超晶格, 声子, 热导率**PACS:** 31.15.xy, 44.10.+i**DOI:** 10.7498/aps.71.20211451

1 引言

随着半导体工业技术进入纳米尺度, 高密度集成电路中的散热问题成为影响其寿命和效率的主要因素^[1]. 由于纳米电子器件比表面积比较高, 界面处的热输运往往对其整体的热行为起主导作用, 因此降低界面热阻是提高纳米器件散热性能的重要途径^[2-4].

固-固界面是半导体和绝缘体中普遍存在的特性, 这些材料中热输运的主要载流子是声子, 声子在界面处的输运散射机理直接决定了材料的导热性能^[5]. 由于晶体缺陷、声阻抗失配等因素导致了界面处声子散射较强^[6]. 为改善固-固界面热导, 人们基于降低声学失配提出许多方法来降低界面热阻, 其中最常见的方法主要有两种, 第一种是在界面处插入薄膜. 如 Liang 和 Tsai^[7] 采用非平衡分子动力学模拟研究了薄膜对于固-固界面热输运的影

响, 结果表明, 引入声子态密度介于两边固体态密度的薄膜, 且在两边固体声学失配相差较大的情况下可以显著提高界面热导, 这与实验上 O'Brien 等^[8] 在固-固界面中插入薄膜以提高导热的结论保持一致. 同样地, 其他研究表明, 在界面引入适当厚度且原子质量介于两边固体原子质量并具有一定质量梯度的薄膜, 也能较大地提升固-固界面热导^[9-11].

第二种是界面处两种固体材料的混合可以显著降低界面热阻. 如 Stevens 等^[12] 通过非平衡分子动力学模拟研究了晶格失配较大的固-固界面的热输运情况. 结果表明, 由于界面原子混合增加了声子散射点和声子“桥接”机制, 使得界面热输运提高近 2 倍. Tian 等^[13] 采用格林函数法对 Si/Ge 界面热输运的研究中发现, 当界面处具有两层原子混合时, 对长波长声子几乎没有影响, 仍然保持相干性输运. 但增加了中波长声子在界面处弹性散射的通道, 使得更多模式的中波长声子能够穿过界面,

* 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.

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

这有效降低了界面声阻抗并促进了声子传输,从而提升了 Si/Ge 界面热导. Jia 等^[14] 计算模拟了 Si/Ge 界面处热输运, 结果显示, 具有界面原子混合的 Si/Ge 三角形界面的导热系数比完美界面提高了近 22.3%. 他们将这归因于界面原子混合增加了声子穿过的频率模式, 使得更多模式的声子能够穿过界面. Merabia 和 Termentzidis^[15] 认为界面形状对于固-固界面热导的提升是因为界面重构导致有效面积的增加, 使得大部分声子以扩散输运的方式穿过界面.

然而, 实际的电子器件或者封装体往往是多层界面的堆叠结构, 与上述单一界面有所不同的是, 声子在多层界面中的输运机理更加复杂. 此时, 界面晶格结构的热导率不仅与界面原子形状或者结合方式有关, 更受单层厚度、总长度和温度的影响. 我们此前已经对不同结构超晶格进行了研究, 结果表明, 不同的周期结构排列方式以及界面接触角度对多层堆叠的超晶格的热输运性能有很大影响. Ravichandran 等^[16] 用分子束外延技术制备了钙钛矿氧化物超晶格并研究了其热输运性质. 结果表明, 在保证总长度不变的条件下, 随着周期长度的增加, 由于声子波粒性质转变, 超晶格的热导率先减少后增加出现了极小值. Luckyanova 等^[17] 同时利用模拟和实验研究了模型总长度对于超晶格热导率的影响. 研究发现, 在室温下, 由于声子相干输运与扩散输运机制的转变, GaAs/AlAs 超晶格的热导率随着总长度先增加后保持不变. Chakraborty 等^[18] 利用非平衡分子动力学模拟研究了温度对相干声子与非相干声子在超晶格热输运贡献的影响. 结果表明, 当温度升高时, 由于声子的非弹性界面透射率的增加, 非相干声子对热输运贡献逐渐增大. 而由于非谐性散射的增加, 相干声子对于热输运的贡献逐渐减小. 这两种竞争机制导致了超晶格热导率随温度变化的不同关系.

分析以上研究可知, 单纯以单一界面为研究对象, 通过改变界面原子结构来提高界面热导得出的结论, 对于指导具有多层界面堆叠的纳米电子器件的散热设计可能不完全适用, 需要进一步深入研究. 因此, 本文以硅锗 (Si/Ge) 超晶格为研究对象, 采用非平衡分子动力学方法模拟研究了界面原子混合对于超晶格导热性能的影响. 重点考虑界面原子混合方式、超晶格周期长度、总长度以及温度对声子输运的影响.

2 计算方法

非平衡态分子动力学方法类似于热传导的实验测量, 该方法的基础是施加热流, 利用经典的傅里叶导热定律测量热导率, 对计算非均匀材料系统的热传导更具优势. 本文构造了不同界面形式的 Si/Ge 原子模型, 如图 1(a)—图 1(d) 所示: (a) 完美界面晶格结构; (b) 界面具有原子混合晶格结构; (c) 完美界面超晶格; (d) 具有 n 层原子混合的超晶格, 混合区原子比例为 1:1. 采用非平衡分子动力学模拟计算 Si/Ge 超晶格热性质原理模型如图 2 所示, 沿着 x 方向 Si 和 Ge 的样品长度分别为 20 个单位晶胞. 为减少粒子蒸发, 避免与外界发生热量交换, 模型的最外侧分别设置了绝热壁. 为避免横截面积过小而带来的热导率计算误差, 将垂直于热流方向体系的横截面积设为 6×6 个单位晶胞. 在各个方向均采用周期性边界条件, 热流方向沿 x 方向.

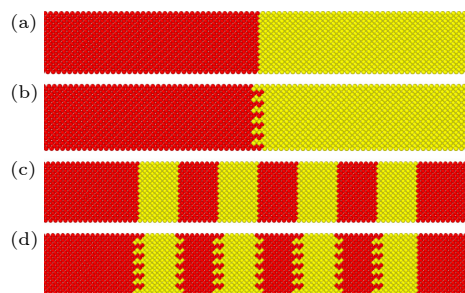


图 1 不同界面形式的 Si/Ge 原子模型结构示意图 (a) 完美界面晶格结构; (b) 界面具有原子混合晶格结构; (c) 完美界面超晶格; (d) 具有 n 层原子混合的超晶格
Fig. 1. Schematic diagram of Si/Ge atomic structure with different interface: (a) Single perfect interface; (b) single atomic mixing interface; (c) perfect superlattice; (d) superlattice with n -layer atomic mixing.

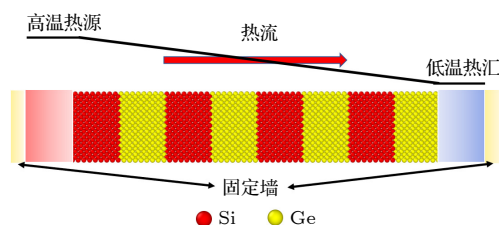


图 2 非平衡分子动力学模拟计算热性质示意图
Fig. 2. Schematic diagram of thermal properties calculated by non-equilibrium molecular dynamics simulation.

所有非平衡分子动力学模拟均基于 LAMMPS 进行^[19], 并采用 Tersoff 势函数来模拟 Si-Si, Ge-Ge 和 Si-Ge 原子间的相互作用. 时间步长设置为

0.001 ps. 首先在零温下对体系能量最小化, 优化原子位置; 然后将体系放置在正则 (NVT) 系综中, 使得体系在期望温度下能量分布均匀; 最后使用朗之万恒温器在体系中产生一个温度梯度, 放在微正则 (NVE) 系综下获取热流值并计算模型热导率.

图 3 展示了非平衡分子动力学模拟得到的温度阶跃曲线, 由外推界面的线性温度曲线的差值可估算出界面处的温度阶跃 ΔT . 界面热阻 R 的计算方法为通过界面的温度阶跃 ΔT 与热流 J_x 的比值 [20]:

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

据此计算出整体界面热导 G :

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

热流 J_x 的计算方法为 [21]

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

其中 E 为能量, t 为模拟时间, A 为横截面积. 利用傅里叶热传导定律, 求得导热系数 κ

$$\kappa = -\frac{J_x}{(\partial T / \partial x)}, \quad (4)$$

其中, $\partial T / \partial x$ 为拟合温度分布的线性部分的温度梯度.

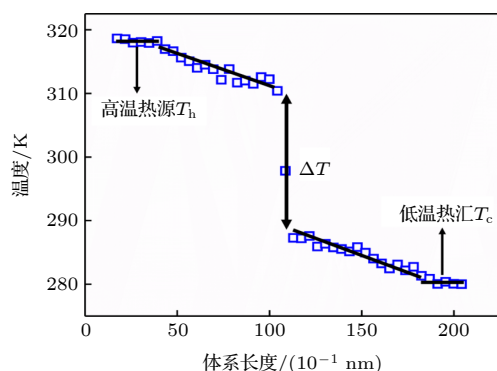


图 3 在环境温度为 300 K 时, Si/Ge 晶格沿 x 轴向的温度分布

Fig. 3. Temperature profile in the x -direction of the Si/Ge lattice with ambient temperature is 300 K.

为了解声子传输的潜在机制, 通过对所有原子的速度自相关函数进行快速傅里叶变换计算了声子态密度 $D(\omega)$ 其表达式为 [22]

$$D(\omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-i\omega t} C(t) dt, \quad (5)$$

其中, 速度自关联函数定义为

$$C(t) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \langle \mathbf{v}_i(0) \mathbf{v}_i(t) \rangle, \quad (6)$$

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 i 原子的初速度, $\langle \cdot \rangle$ 为系综平均.

声子参与率 $P(\omega)$ 是深入了解声子活动的有效方法, 同时在定量描述声子局域化效应中有着很好的应用 [23–26]. 其表达式为 [22]

$$P(\omega) = \frac{1}{N} \frac{\left[\sum_i D_i(\omega) \right]^2}{\sum_i D_i(\omega)^4}, \quad (7)$$

式中 N 为原子总数.

界面声子频谱热流可以对不同结构热导率的变化有更进一步的解释, 通过 Si/Ge 界面的单向光谱热流定义为 [27,28]

$$q(\omega) = \frac{2}{A} \text{Re} \sum_{j \in \text{Ge}} \sum_{i \in \text{Si}} \int_{-\infty}^{\infty} d\tau e^{i\omega\tau} \langle \mathbf{F}_{ij}(\tau) \cdot \mathbf{V}_i(0) \rangle, \quad (8)$$

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 界面上的力. 光谱界面热导可以计算为 $G(\omega) = |q(\omega)| / \Delta T$, 其中 ΔT 为通过界面上的温度降. 最后界面的总热导为 [29]

$$\frac{1}{R} = \int_0^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} G(\omega) = \Delta f \frac{\sum_{\omega} |q(\omega)|}{\Delta T}, \quad (9)$$

其中 Δf 为离散区间.

3 结果与讨论

图 3 给出了模拟结束后, 在环境温度为 300 K 时, 将样本划分为 50 个区域块, Si/Ge 晶格沿 x 方向的典型温度分布. 可以看出远离界面处的 Si 和 Ge 的温度分布几乎是线性的, 由于 Si 和 Ge 材料的声阻抗失配、晶体界面缺陷等导致的界面散射作用, 在界面处有一个显著的温度降 ΔT , 该温度降由界面两边温度分布线性拟合的差值来确定. 界面热阻由 (1) 式计算, 通过 Si/Ge 界面的热通量 J_x 由 (3) 式确定, 结合 ΔT 和 J_x , 可以得到 Si/Ge 界面热导.

3.1 界面原子混合对 Si/Ge 单一界面导热的影响

首先研究界面原子混合对单一界面 Si/Ge 体系导热的影响, 为后面超晶格的研究提供对比和参

考. 固定单界面模型长度为 40 个晶格长度 (约为 21.7 nm). 图 4 显示了不同原子混合层数对于 Si/Ge 界面热运输的影响. 结果表明, 在环境温度为 100—600 K 之间, 2 层和 4 层界面原子混合的热导始终大于完美界面. 这表明, 界面原子混合可以显著改善 Si/Ge 界面热运输. 随着原子混合厚度的增加, 热导先增大后减小, 在 2 层原子混合时达到最大值. 与完美界面相比, 2 层原子混合的界面热导增加约 20%, 而 4 层原子混合的热导增加了 8%. 为了解界面热导的强化机制, 利用原子速度自相关函数的傅里叶变换计算了界面两边区域的 Si 和 Ge 以及原子混合层的声子态密度, 选取中间混合部分区域以及距中间部分约 5 nm 处同中间混合区域相同长度的 Si 区域和 Ge 区域分别进行计算. 结果如图 5 所示, 实际上, 界面热阻主要受两个固体声子态密度重叠的影响. 由于 Si 和 Ge 德拜温度的差别, 其声子态密度相差很大, 固体 Si 声子的主要频率在 5—17 THz, 固体 Ge 声子的主要频率在 2—12 THz. 因此, 有限的声子态密度重叠使得界面弹性声子散射的热运输很小, 进而导致较大的 Si/Ge 界面热阻 [3].

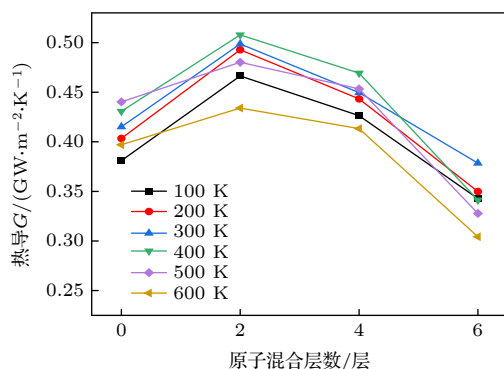


图 4 界面热导与原子混合层数的关系

Fig. 4. Thermal conductance as a function of the number of atomic mixing layers.

图 5 显示了引入界面原子混合后的声子态密度, 其为声阻抗匹配度相差较大的 Si 和 Ge 提供了桥梁作用, 为声子模式高低频转换提供了通道, 使得更多模式的声子能够穿过界面. 可以看出, 与固体 Si 相比, 2 层和 4 层原子混合的声子态密度峰值向低频偏移, 说明低频声子模式增加, 高频模式声子减少. 相比于高频声子, 低频声子具有更大的概率穿过界面, 因此导致了热导的提高. 然而随着界面原子混合层数的增加, 热导并未线性增加 (图 4).

这是由于两个相互竞争的因素, 一是重叠的声子态密度增强了声子在界面上的传输, 二是原子混合层增加了界面的扩散散射. 该竞争机制使得在 2 层原子混合时, 热导出现峰值 (图 4). 比较 2 层和 4 层原子混合层的声子态密度, 如图 5 所示, 两者的声子态密度频域基本一致, 但是 2 层原子混合的显著峰很明显高于 4 层. 说明在该频率下, 穿过 2 层原子混合的声子数量更多.

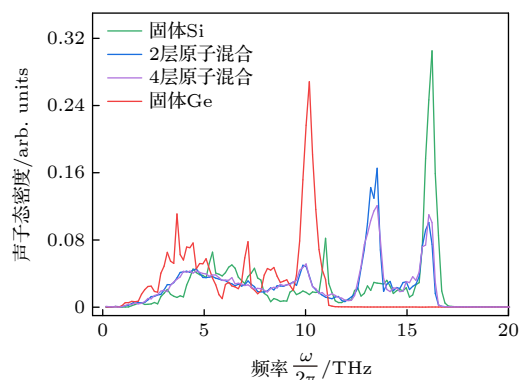


图 5 不同界面形式 Si/Ge 晶格的声子态密度

Fig. 5. Phonon density of states as a function of frequency for different Si/Ge interface forms.

由图 4 也可以看出温度对于热导的影响. 对于完美界面和原子混合界面, 热导随温度的升高先增大后减小. 这是由于随温度的升高, 原子振动剧烈, 激发了更多的高频声子模式, 高频声子可分解成更多的低频声子, 从而导致更多低频模态的声子穿过界面. 这之前对单一界面处原子混合结构的研究结果保持一致 [22,30], 同时验证了模拟结果的准确性. 随着温度的持续升高, 声子-声子散射 (umklapp 过程) 逐渐增强, 散射作用的增强降低了热传输效率.

3.2 界面原子混合对于超晶格导热的影响

界面处的原子混合不仅对单一界面有着影响, 也对超晶格多界面结构有着不可忽略的作用. 本节研究了热导率和周期数 (体系总长) 的变化关系. 之前的研究表明 Si/Ge 超晶格中声子运输的相干长度约为 4.34 nm [31], 因此我们将样本周期长度固定为 4.34 nm, 模型总长度随周期数增加而增加. 图 6 所示为完美界面、2 层和 4 层原子混合界面的超晶格的热导率随周期数的变化. 可以看出在周期数较少时, 具有完美界面的超晶格的热导率是低于

原子混合界面的热导率. 这说明当周期数量较少或单一界面时, 2 层和 4 层界面原子混合强化了热运输, 此时主导热运输的是非相干声子, 由于声子“桥接”机制, 导致了热导率的上升. 这与 3.1 节的结论是一致的.

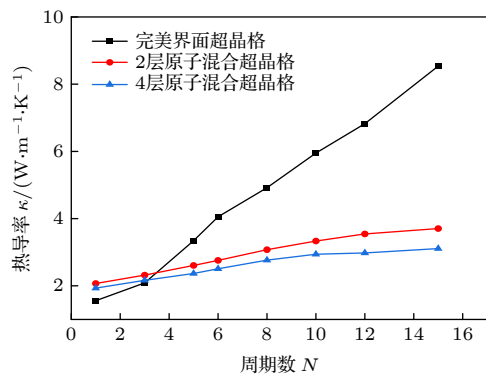


图 6 超晶格热导率随周期数的变化

Fig. 6. Thermal conductivity of superlattices as a function of number of periods.

与小周期数不同的是, 随着周期数的增加, 完美界面超晶格的热导率几乎呈线性增加, 这说明声子在进行相干性运输, 即声子在运输过程中保持相位信息, 相干地穿过超晶格界面, 只与最外层界面发生散射, 因此完美界面的热导率有着明显的尺寸效应 [32]. 而具有 2 层和 4 层原子混合超晶格的热导率也有增加, 但是增加幅度显著低于完美界面的热导率. 这说明原子混合破坏了声子的相干性运输, 热导率随总长度的小幅度升高说明仍有部分低频声子进行相干运输. 为了深入分析混合界面下声子的运输性能, 以整个模型结构为计算区域, 计算了环境温度为 300 K, 周期数 $N = 15$, 体系总长度为 71.6 nm 时, 完美界面超晶格和具有 4 层原子混合超晶格的声子态密度和频谱热流, 分别如图 7 和图 8 所示. 从图 7 可以看出, 4 层原子混合超晶格的声子态密度与完美界面超晶格相比, 显著峰明显降低, 且频宽变窄, 这在一定条件下对热运输产生负面作用. 从图 8 所示的频谱热流可以明显看出: 在大部分频率下, 完美界面热流都高于混合界面, 进一步说明了完美界面热导率高的原因; 此外, 频率为 15—16 THz 的态密度峰值的高频声子被强烈地散射; 在频率为 5—7 THz 时, 完美界面超晶格的谱热流峰值比原子混合界面的高出约 60%, 而在频率为 1—3 THz 时, 完美界面超晶格高出约 55%. 这与图 6 中热导率的趋势保持一致.

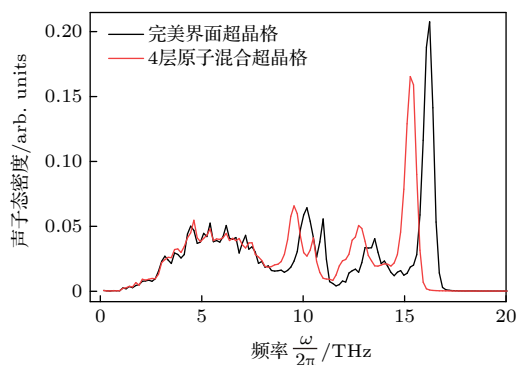


图 7 完美界面与 4 层原子混合界面的超晶格声子态密度
Fig. 7. Phonon density of states of superlattices with perfect interfaces and 4-layer atomic mixing.

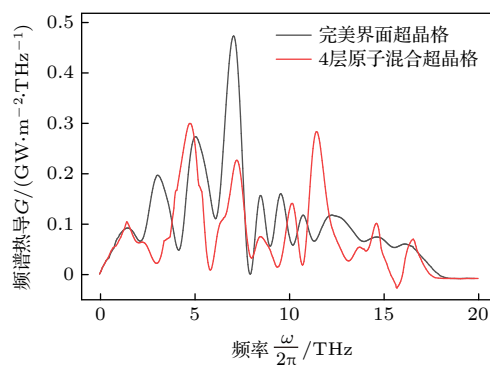


图 8 完美界面和 4 层原子混合的超晶格的频谱热导
Fig. 8. Spectral thermal conductance of superlattices with perfect interfaces and 4-layer atomic mixing.

为了进一步捕捉声子活动及其在超晶格中对热运输的影响, 在环境温度为 300 K, 以体系总长度为 71.6 nm 的模型整体为计算区域, 使用 (7) 式计算了声子参与率, 声子参与率表明声子局域化程度的高低, 结果如图 9 所示. 与完美界面相比, 原子混合超晶格的平均声子参与率要低于完美界面, 即声子原子混合超晶格中局域化严重.

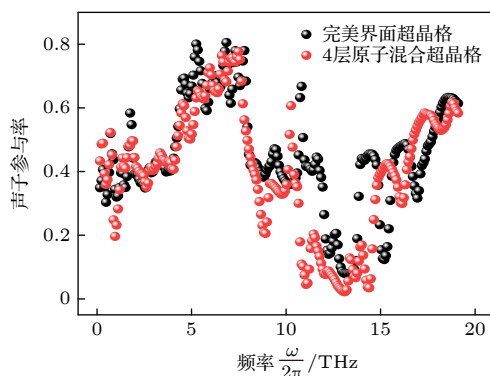


图 9 完美界面与 4 层原子混合的超晶格的声子参与率
Fig. 9. Phonon participation ratio of superlattices with perfect interfaces and 4-layer atomic mixing.

进一步研究了完美界面和原子混合界面超晶格的热导率随周期长度的变化,如图10所示.可以看出,在固定体系总长度为71.6 nm时,完美界面Si/Ge超晶格的热导率随周期长度的增加先减小后增大.当声子在超晶格中进行相干输运时,热导率随着周期长度的增加而降低,这是由于声子平均自由程与周期长度相当,此时声子的相干输运占据主导地位.随周期长度的增加,声子微带数量增加,导致声子的群速度降低,从而引起热导率的降低.当周期长度进一步增加时,此时周期长度大于声子的平均自由程,声子进行非相干性的扩散输运,且界面密度的降低减少了声子在界面处的散射,所以热导率随周期长度增加而增加.热导率极小值的存在提供了声子输运由波动性的相干输运向粒子性的非相干输运转变的证据.然而,与完美界面超晶格不同的是,具有原子混合超晶格的热导率始终随着周期长度的增加而增加,这表明了界面处的原子混合破坏了大部分声子的相干性,声子-界面散射占据主导,故热导率随周期长度增加呈现上升趋势.

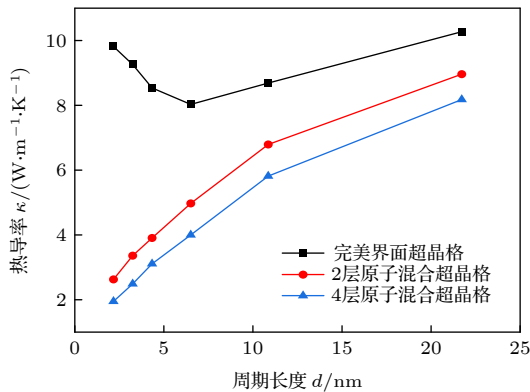


图10 超晶格热导率与周期长度的关系

Fig. 10. Thermal conductivity of superlattices as a function of period length.

此外还计算了环境温度对超晶格热导率的影响,图11所示为完美界面超晶格和4层原子混合超晶格在体系总长为71.6 nm,周期长度为4.34 nm时热导率随着温度的变化关系.与单一界面相比,完美界面超晶格热导率随着温度的升高呈现下降趋势.这与单一界面结构热导率随温度变化趋势不同(先升后降),说明与单一界面结构相比,超晶格结构中声子-界面散射与声子-声子散射对导热的作用同等重要.与完美界面不同的是,混合界面超晶格热导率几乎不随温度的变化而变化,这可能与声

子的局域化和声子-声子散射有关^[18].界面原子混合超晶格中有很大一部分局域化相干声子无法传递热能,但是随着温度的升高,声子局域化性质随温度的升高而被削弱,在一定程度上促进了热输运.随着温度的升高,声子-声子散射作用增强,降低了热输运.这两个相互竞争的因素导致了热导率对于温度的低敏感性.同时,也有界面原子混合一定程度上增加了体系结构非晶化的原因,促使材料表现出非晶体热导率的温度无关性.

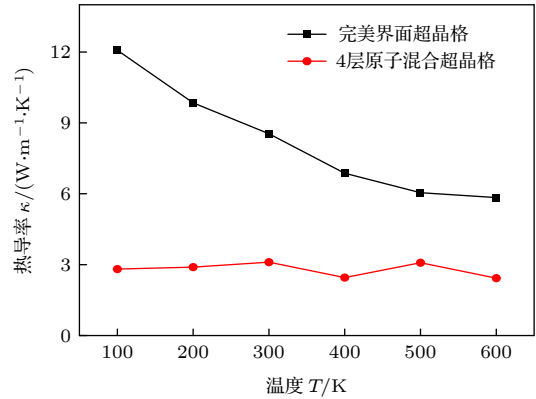


图11 超晶格热导率随环境温度的变化

Fig. 11. Thermal conductivity of superlattices as a function of ambient temperature.

4 结 论

采用非平衡分子动力学模拟方法研究了界面原子混合对Si/Ge超晶格热输运的影响.结果表明:1)通过构造声子“桥接”,界面原子混合可以提高材料的热导率;2)同一界面原子结构情况下,单一界面结构的热导率和多个界面堆叠的超晶格热导率并不相同;3)声子在完美界面超晶格中进行相干性输运,而界面原子混合则一定程度上破坏了相干输运从而导致热导率降低;4)界面原子混合使声子在超晶格中发生局域化,局域程度随温度升高而降低;5)由于声子局域化和声子-声子散射的竞争机制,导致了界面原子混合降低了超晶格热导率的温度敏感性;6)周期长度对热导率的影响较大.完美界面超晶格热导率呈现非单调趋势,表明了声子输运由波动性的相干输运转化为粒子性的扩散输运的证据.而界面原子混合破坏了超晶格声子的相干性输运,界面扩散散射在声子输运中占据主导,因此界面原子混合超晶格的热导率随着周期长度的增加而增加.

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] Tang D S, Cao B Y 2021 *J. Eng. Thermophys.* **42** 1546 (in Chinese) [唐道胜, 曹炳阳 2021 工程热物理学报 **42** 1546]
- [3] Liang Z, Tsai H L 2012 *Int. J. Heat Mass Transf.* **55** 2999
- [4] Chen W Y, Yang J K, Wei Z Y, Liu C H, Bi K D, Xu D Y, Li D Y, Chen Y F 2015 *Phys. Rev. B* **92** 134113
- [5] Tian Z T, Esfarjani K, Chen G 2014 *Phys. Rev. B* **89** 235307
- [6] Kechrakos D 1991 *J. Phys. Condens. Matter* **3** 1443
- [7] Liang Z, Tsai H L 2011 *J. Phys. Condens. Matter* **23** 495303
- [8] O'Brien P J, Shenogin S, Liu J X, Chow P K, Laurencin D, Mutin P H, Yamaguchi M, Keblinski P, Ramanath G 2013 *Nat. Mater.* **12** 118
- [9] English T S, Duda J C, Smoyer J L, Jordan D A, Norris P M, Zhigilei L V 2012 *Phys. Rev. B* **85** 035438
- [10] Shao C, Bao H 2015 *Int. J. Heat Mass Transf.* **85** 33
- [11] Zhou Y G, Zhang X L, Hu M 2016 *Nanoscale* **8** 1994
- [12] Stevens R J, Zhigilei L V, Norris P M 2007 *Int. J. Heat Mass Transf.* **50** 3977
- [13] Tian Z T, Esfarjani K, Chen G 2012 *Phys. Rev. B* **86** 235304
- [14] Jia L, Ju S H, Liang X G, Zhang X 2016 *Mater. Res. Express* **3** 095024
- [15] Merabia S, Termentzidis K 2014 *Phys. Rev. B* **89** 054309
- [16] 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
- [17] 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, Poretzky A A, Zhu Y, Dresselhaus M S, Gossard A, Chen G 2018 *Sci. Adv.* **4** eaat9460
- [18] Chakraborty P, Chiu I A, Ma T F, Wang Y 2021 *Nanotechnology* **32** 065401
- [19] Plimpton S 1995 *J. Comput. Phys.* **117** 1
- [20] Zang Y, Ma D K, Yang N 2017 *J. Eng. Thermophys.* **38** 2686 (in Chinese) [臧毅, 马登科, 杨诺 2017 工程热物理学报 **38** 2686]
- [21] Qu X L, Gu J J 2020 *RSC Adv.* **10** 1243
- [22] Liang T, Zhou M, Zhang P, Yuan P, Yang D G 2020 *Int. J. Heat Mass Transf.* **151** 119395
- [23] Chen J, Zhang G, Li B W 2010 *Nano Lett.* **10** 3978
- [24] Wang Y, Vallabhaneni A, Hu J N, Qiu B, Chen Y P, Ruan X L 2014 *Nano Lett.* **14** 592
- [25] Zhang Z W, Chen Y P, Xie Y E, Zhang S B 2016 *Appl. Therm. Eng.* **102** 1075
- [26] Bodapati A, Schelling P K, Phillpot S R, Keblinski P 2006 *Phys. Rev. B* **74** 245207
- [27] Sun Y D, Zhou Y G, Han J, Hu M, Xu B, Liu W 2020 *J. Appl. Phys.* **127** 045106
- [28] Sääskilähti K, Oksanen J, Tulkki J, Volz S 2014 *Phys. Rev. B* **90** 134312
- [29] Ma Y L, Zhang Z W, Chen J G, Sääskilähti K, Volz S, Chen J 2018 *Carbon* **135** 263
- [30] Liu Y G, Bian Y Q, Chernatynskiy A, Han Z H 2019 *Int. J. Heat Mass Transf.* **145** 118791
- [31] Liu Y G, Hao J S, Ren G L, Zhang J W 2021 *Acta Phys. Sin.* **70** 073101 (in Chinese) [刘英光, 郝将帅, 任国梁, 张静文 2021 物理学报 **70** 073101]
- [32] 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]

Thermal conductivity of materials based on interfacial atomic mixing^{*}

Liu Ying-Guang[†] Xue Xin-Qiang Zhang Jing-Wen Ren Guo-Liang

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

(Received 7 August 2021; revised manuscript received 25 December 2021)

Abstract

The Si/Ge single interface and superlattice structure with atom mixing interfaces are constructed. The effects of interfacial atomic mixing on thermal conductivity of single interface and superlattice structures are studied by non-equilibrium molecular dynamics simulation. The effects of the number of atomic mixing layers, temperature, total length of the system and period length on the thermal conductivity for different lattice structures are studied. The results show that the mixing of two and four layers of atoms can improve the thermal conductivity of Si/Ge lattice with single interface and the few-period superlattice due to the “phonon bridging” mechanism. When the total length of the system is large, the thermal conductivity of the superlattice with atomic mixing interfaces decreases significantly compared with that of the perfect interface. The interfacial atom mixing will destroy the phonon coherent transport in the superlattice and reduce the thermal conductivity to some extent. The superlattice with perfect interface has obvious temperature effect, while the thermal conductivity of the superlattice with atomic mixing is less sensitive to temperature.

Keywords: single interface, superlattices, phonons, thermal conductivity

PACS: 31.15.xv, 44.10.+i

DOI: [10.7498/aps.71.20211451](https://doi.org/10.7498/aps.71.20211451)

^{*} 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).

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