

文章编号: 1001-246X(2024)06-0746-26

# 纳尺度热传导中声子波动行为的物理及建模

刘 彬, 黄云帆, 王沫然\*

(清华大学工程力学系, 北京 100084)

**摘 要:** 纳尺度热传导因其内在载热声子表现出独特的输运行为, 以及其解决电子器件热管理问题和提升热电转化能力中的巨大潜力, 在近年来引发了广泛关注。本文回顾了近三十年纳尺度热传导理论和模拟方面的研究进展, 特别是介绍并讨论了纳尺度相干热传导机制和基于波动和粒子两种图像的研究方法, 以及这些方法在描述载热声子波动行为上的优势和局限。最后, 剖析了纳尺度热传导研究领域面临的挑战并展望了未来可能的发展方向, 以期推动对载热声子波粒二象性的深入理解, 并促进其在关键领域中的应用。

**关键词:** 纳尺度热传导; 相干热传导; 声子热输运; 波动效应

中图分类号: O551

文献标识码: A

DOI: 10. 19596/j. cnki. 1001-246x. 9000

## 0 引言

近三十年来, 纳尺度热传导引起了人们的广泛关注<sup>[1-3]</sup>, 其重要推动力之一是电子器件的热管理问题<sup>[4]</sup>。随着电子器件的小型化和集成化, 单位面积能耗显著增加, 散热性能成为限制其进一步发展的关键因素之一。与此同时, 纳米结构的表界面效应显著<sup>[5-6]</sup>, 可表现出特殊的热输运行为, 例如, 弹道热波<sup>[7]</sup>、声子水动力学行为<sup>[8-9]</sup>、相干<sup>[10-12]</sup>和量子热传导<sup>[13]</sup>等。基于平衡和连续性假设的传统宏观理论和方法受到挑战<sup>[14-15]</sup>。另一方面, 纳米材料导热性质的调控与能源环境问题密切相关。全球约 70% 的能源输入以废热形式散失, 未能转化为可利用的能源形式, 造成了严重的经济损失<sup>[16]</sup>, 主要依赖化石燃料燃烧的发电过程还将导致大量二氧化碳等温室气体排放, 加剧环境污染问题。热电材料能够直接将工业废热转换为电能, 显著提高能源利用效率, 同时避免不良化学品和机械振动的产生, 在能量转换和散热应用中具有重要潜力<sup>[17]</sup>。热电材料热导率是决定其热电能量转化效率的关键因素, 其机理解释与准确预测对应其理性设计评估至关重要<sup>[18]</sup>。近年来涌现的热二极管、热逻辑门和热存储器等类电子设备为有效控制热流的传输和分布提供了新的可能性<sup>[19, 20]</sup>。纳米结构热调控技术有望推动热管理和热能转换领域的进一步发展。

纳尺度热传导涉及不同类型的能量载流子的输运性质。固态金属中电子是主要的能量载流子, 而晶格振动是半导体和绝缘体中的主要热载流子<sup>[21]</sup>。晶格振动可分解为正交模式的晶格波, 量子化的晶格波可视为准粒子, 称为声子。从量子力学的观点看, 电子和光子等能量载流子具有波粒二象性, 表现为粒子状且非连续的物质波描述, 在特定的物理过程中可表现出鲜明的动量和能量特征<sup>[22-23]</sup>。声子本质上是具有一定频率和波长的晶格波, 贯穿整个晶体。多个不同频率的声子叠加可形成具有较窄空间范围的波包, 当波包的尺寸远小于样品尺寸或材料整体尺寸时, 可将其视为粒子。因此, 声子同时具备波动特性(频率和波长)和粒子特性(能量和动量), 能在晶格中传播和散射, 也可发生声子间相互作用, 导致声子的动量和能量的转移和耗散<sup>[24]</sup>。

声子热输运普遍采用粒子图像来处理, 其中声子气模型是一种用于理解声子输运行为的传统方法<sup>[25-27]</sup>。一类常见的纳米材料热调控方法是基于声子的粒子(或非相干)输运性质, 通过改变声子的散射率来实现, 例如改变声子的缺陷散射<sup>[28-29]</sup>、表界面散射和高阶声子散射等<sup>[30-33]</sup>。由于声子具备波粒二象性, 另一类潜在方法是通过纳米结构设计来改变声子的波动(相干)输运性质, 从而实现热调控<sup>[10-12, 34-37]</sup>。需要

收稿日期: 2024-08-16; 修回日期: 2024-09-24

基金项目: 国家自然科学基金(51621062, 12272207)资助

第一作者: 刘彬, 博士, 助理研究员, 研究方向为微纳尺度薄膜和界面导热, E-mail: binliuhy@tsinghua.edu.cn

\* 通信作者: 王沫然, 博士, 教授, E-mail: mrwang@tsinghua.edu.cn

指出的是,对于纳尺度声子热输运过程中表现出的波动性质可以有多种理解方式,包括其量子化格波本质<sup>[3]</sup>、相干热输运、瞬态导热过程中的弹道热波和声子相互作用导致的“第二声”现象等。“第二声”指系统的温度变化快于其特征响应频率时,声子气中温度场以波动的形式传播。“第一声”与压力耦合,类似于普通物质中传播的声波<sup>[38]</sup>;“第二声”主要与温度或熵相关,更倾向于被视为一种热波或能量波动。关于“第二声”现象,可参考声子水动力学相关研究<sup>[8,15,39-43]</sup>。本文主要关注相干热传导,在过程中主要涉及晶格波的波动效应,例如相位关系固定的相干波叠加导致的干涉现象等。

尽管相干热传导的直接观测仍具有挑战性<sup>[44-46]</sup>,但通过纳尺度材料或结构的热导率表征可间接验证其存在<sup>[47-57]</sup>。现有研究主要关注超晶格结构的各类相干热传导现象,包括低温热导率与长度的线性关系<sup>[48,54-55]</sup>、随界面密度变化出现的最小热导率<sup>[50-53,56-57]</sup>和声子局域化导致的最大热导率<sup>[58-73]</sup>等;另外,还包括高维周期性纳米声子晶体(PnCs)的热导率下降等<sup>[74-78]</sup>。前期实验研究还报道了纳米 PnCs 内的多种非相干输运现象<sup>[79-85]</sup>。此外,理论和模拟研究预测并解释了更多相干效应或机制,包括能带折叠<sup>[68,86-87]</sup>、局域化<sup>[58-69]</sup>、共振杂化<sup>[88-92]</sup>、干涉<sup>[70-73]</sup>和隧穿<sup>[93-95]</sup>等。总体而言,纳米 PnCs 中声子的热输运状态通常被分为相干、部分相干和非相干三个主要相区<sup>[10]</sup>。基于不同物理图像(粒子/波动)的理论和模拟方法在不同相区具有各自的优势和局限性<sup>[10,96-97]</sup>。例如,对相干热传导中的干涉、能带折叠、群速度和态密度改变等行为,可采用晶格动力学(LD)、弹性波动模型(EWM)和非平衡格林函数(NEGF)描述和处理。非相干热传导通常采用基于粒子图像的声子玻尔兹曼输运方程(PBTE)来描述,包括结合密度泛函理论(DFT)的弛豫时间参数计算以及 PBTE 的介观数值求解方法,后者包括格子玻尔兹曼法(LBM)和离散坐标法(DOM)等确定性方法,以及蒙特卡罗(MC)随机方法<sup>[43,98-117]</sup>。特别地,PBTE 在揭示纳尺度热传导中的声子非谐散射方面具有重要作用。部分相干相区内的热输运行为更加复杂,其波粒行为常采用分子动力学(MD)模拟捕捉<sup>[94,118-119]</sup>,理论层面可以通过基于 LD 的声子色散关系修正将波动效应纳入 PBTE 计算<sup>[120-121]</sup>,或基于 NEGF 考虑相干机制与界面漫散射的竞争来描述该相区的波粒耦合行为<sup>[122-124]</sup>。然而,结构无序、表界面散射和非谐效应等因素对声子相干性的影响,以及波粒行为的准确划分仍是待解决的问题。声子波粒行为的统一描述对于相干热传导的理解和潜在热调控应用具有重要意义。

本文将从理论和模拟研究的角度介绍纳米结构相干热传导的产生、调控和内在声子的波动行为。第 1 节简要介绍纳米 PnCs 和相干热传导现象的产生;第 2 节阐述相干热传导的连续介质理论和原子理论基础,以及模拟计算方法;第 3 节详细介绍相干热传导中的声子波动效应,包括干涉、隧穿、局域化和共振效应,并概述表界面在输运过程中的作用;第 4 节借由以最小热导率为代表的部分相干热传导现象讨论声子相干性的概念,初步探讨声子的波粒二象性,关注从波动到粒子的过渡描述及相关的物理模型与方法;第 5 节进行总结和展望。

## 1 纳米声子晶体与相干热传导现象的产生

随着纳米技术的发展,包括多晶材料、纳米复合薄膜、纳米线和碳纳米管等在内的各类纳米材料的结构精确控制可以逐步实现<sup>[125-126]</sup>。当结构的特征长度小于或接近载热声子的波长/相干长度(室温下通常为纳尺度)时<sup>[10,23,127]</sup>,声子热输运将显现出波动行为。纳米 PnCs 通过引入人工设计的二级周期性控制载热声子的输运特性,并因其精确定义的结构参数成为研究相干热传导的理想平台<sup>[128-129]</sup>。相位信息是波的基本性质,相干波在不同空间位置的两点或不同时刻的两点之间具有固定关系<sup>[23]</sup>。由于这种固定的相位关系,同一波源的波相互叠加会产生光学领域中常见的干涉和衍射现象<sup>[130]</sup>。当纳米 PnCs 的界面和边界足够光滑时,声子在传播过程可以保持相位连续,表界面的镜面散射通过改变声子的波动性质产生体材料中不存在的输运模式。例如,单一界面的模式转换<sup>[131-133]</sup>、驻波导致的量子尺寸效应<sup>[125]</sup>、多层结构的干涉和隧穿<sup>[45,70,134-135]</sup>等。利用相干机制操控声子输运是提升热电材料性能的潜在策略,在抑制材料热导率的同时可以保持电子性能<sup>[36]</sup>,而传统非相干散射机制可能会损害其电性能<sup>[136]</sup>。因此,相干声子的精确控制对纳米材料热应用具有重要意义<sup>[137-142]</sup>。

PnCs 最早用于操控声波或弹性波的传播<sup>[143]</sup>。周期性赋予 PnCs 新的物理特性,例如,声子带隙的产生,处于这些频带内的声波的传播受到显著抑制,在规则 PnCs 内引入不同类型的缺陷或无序,还可实现对上述

带隙内声子的进一步调控,并且散射体的几何形状、晶格结构、散射体与晶格对称性等多种参数对带隙的位置和宽度都有影响。通过不同尺寸和维度的结构设计,可提供更多的传播特性。

声子是半导体中机械振动(声扰动)和热量传递的主要载体。如图 1 所示,声子谱涵盖了从赫兹到数百太赫兹的广泛频率范围。不同频率的声子传递的信息和能量存在差异,简单来说,从赫兹到亚太赫兹的低频声子主要传递声音信息,而大于亚太赫兹的高频声子则为热传导中的主要能量载流子<sup>[128]</sup>。载热声子的波长通常在纳尺度,而 PnCs 内带隙的产生是由于声子的布拉格散射导致的,这要求 PnCs 的特征尺度与声子相干长度相当。因此,用于载热声子输运性质调控的 PnCs 通常为纳米 PnCs。

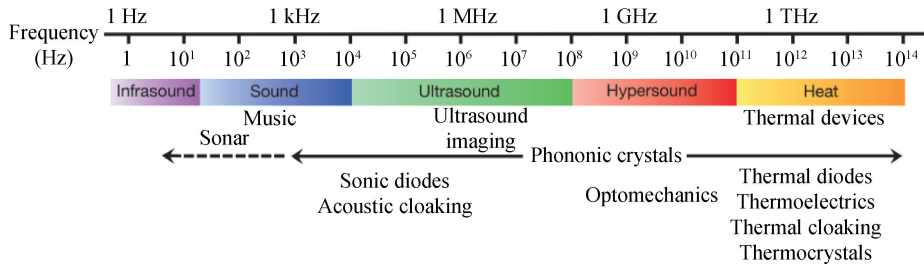


图 1 声子频谱的信息和能量传递<sup>[128]</sup>

Fig. 1 Information and energy transfer by phonon spectrum<sup>[128]</sup>

迄今为止,已报道了如图 2 所示的多种纳米 PnCs 结构。最简单的一维周期性纳米 PnCs,即在一个方向上的周期性多层结构,也称为超晶格(SLs)<sup>[60,62-63]</sup>。二维周期性纳米 PnCs 通常以柱式或孔式的薄膜或纳米线为主<sup>[76,86-87,144-145]</sup>。此外,用于调控载热声子的三维纳米 PnCs 由于对结构精度和表界面平滑度的要求较高,目前以理论研究为主<sup>[69]</sup>。

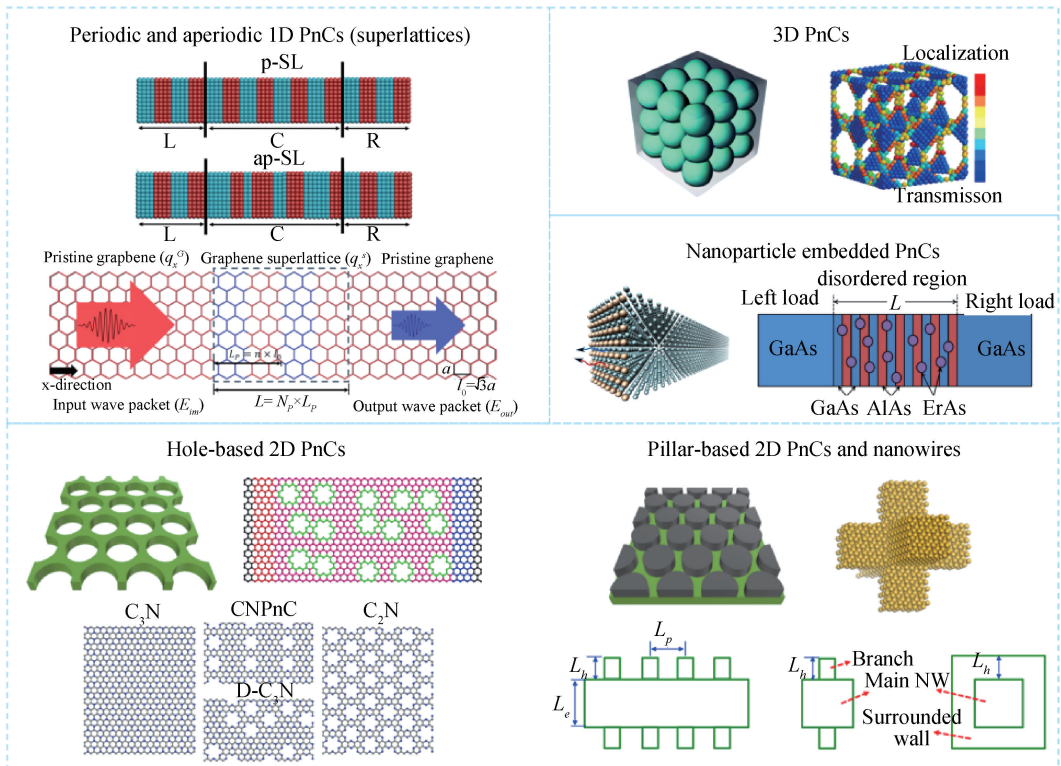


图 2 用于相干热传导调控的不同类型的 PnCs<sup>[60-61, 65, 67, 69, 72-73, 91-92, 128, 146]</sup>

Fig. 2 Different types of PnCs for manipulating coherent heat conduction<sup>[60-61, 65, 67, 69, 72-73, 91-92, 128, 146]</sup>

一般来说,纳米 PnCs 内热传导的控制主要是基于声子的相干和非相干性质,或者二者的结合。在相干

热输运相区, 纳米 PnCs 结构周期性引起的带折叠可以改变声子的色散关系, 这意味着声子群速度和态密度的变化, 以及一定条件下可形成能量带隙。声子的相干性描述了声子振幅和相位在空间和时间上的关联程度, 相干现象是声子之间由于相位差异而引起的增强或抵消效应<sup>[13]</sup>。由于载热声子的高频特性, 保持其相干性是一项具有挑战性的工作, 除了周期尺度与载热声子的特征尺度相当, 还要求声子在纳米 PnCs 的表面边界或内部界面上进行镜面散射, 通常表界面要达到原子级光滑。因此, 在室温下实现纳米 PnCs 的完全相干热传导仍具有挑战性。得益于纳米技术的发展, 近年来已通过实验验证了纳米 PnCs 内的多种相干热传导现象, 包括低温相干热传导、载热声子的局域共振和部分相干状态下出现的最小热导率现象等<sup>[48,50,60]</sup>。

## 2 相干热传导的经典理论与模拟计算

与其他输运过程类似, 若将声子视为准粒子, 对半导体材料热传导的处理可以基于简单动理学理论, 此时热导率表达为

$$\kappa = \frac{1}{3V} \sum_{k_s} C_{k_s} v_{k_s} l_{k_s}, \quad (1)$$

其中,  $V$  为材料体积,  $k_s$ 、 $C$ 、 $v$  和  $l$  分别为声子的模式、比热、群速度和平均自由程 (MFP)。式 (1) 常用于计算材料的晶格热导率, 但在对实际纳米结构材料的定性理解和预测方面存在一定的局限性。例如, 考虑到声子可在纳米 PnCs 的表界面发生反射和透射, 声子的散射过程将取决于表界面特性和声子输运状态; 而动理学理论基于声子气模型, 未考虑声子的波动行为。因此, 在相干热传导理论和模拟研究中, 常借助其他方法来解释波动现象。

具体而言, 若将超晶格等纳米 PnCs 结构视为对固体晶格引入二次周期性, 声子作为晶格波的量子化, 其波动性质可以通过 LD 模型描述。结合原子间运动的内在关联性, 并将原子运动视为某种本征模式下的集体性运动 (即声子), 在倒易空间中从本征模式上描述系统的动力学行为; 声子与电子、光子等能量载流子输运的波动现象具有一定的相似特征, 因此相干热传导的描述也可借鉴电子波动输运与光传播现象的已有描述。实际上, 通过类比光子晶体内电磁波的传播, 经典声波 (或弹性波) 在经典 PnCs (非纳米尺度) 中的传播行为已经具有较为成熟的理论描述, 通过给定几何域内针对给定的某些边界条件对弹性波动方程组进行分析。在低温和纳米 PnCs 表界面光滑的理想情况下, 相干热输运由长波载热声子主导, 其波动行为可以通过声波或弹性波方程 (统称为 EWM) 近似描述从而直观理解; 另外, 也可类比量子点、量子线等介观体系中电子非平衡输运行为的量子相干特征描述, 采用 NEGF 方法描述声子热输运。本节主要介绍基于声子波动描述的相关模型和计算方法。

### 2.1 晶格动力学模型

声子作为量子化的晶格波, 其在固体内部的波动性质可通过 LD 方法描述。针对 SLs 热导率显著低于每层对应体材料的现象, 存在粒子和波动两种机理解释。粒子模型假设界面散射会破坏相位, 各层声子具有其体材料性质, 且经历非相干界面散射<sup>[119]</sup>, SLs 热导率的降低与其周期厚度相关<sup>[119,147]</sup>。而 LD 模型认为热导率降低来源于声子谱改变导致的群速度下降。Hyldgaard 等<sup>[148]</sup>采用简单立方 LD 模型将 SLs 内的声子视为晶格波, 计算表明声子群速度的减小导致了 SLs 热导率下降, 但未能解释热导率与周期厚度的依赖关系。Tamura 等<sup>[95]</sup>通过面心立方 LD 模型更为系统地研究了声子群速度对 SLs 热导率的影响。如图 3(a) 所示, SLs 的周期单元由两个面心立方晶格 A 和 B 组成, 并由两个相邻平面的界面分隔。第  $N$  个周期内平衡位置为的原子位移满足布洛赫定理, 以确保波函数沿  $z$  方向的周期性。假设各原子间力常数相同, 根据与最邻近原子相互作用的质量弹簧模型, 求解原子位移的运动方程可得到图 3(b) 中的声子色散关系, 并以此确定对应方向的声子群速度。LD 模型表明, SLs 的周期性给声子波矢增加了一个额外的限制, 并导致了例如图 3(b) 和 3(e) 中折叠区和声子带隙的形成<sup>[93,149-153]</sup>, 图 3(e) 为周期和非周期 SLs 的色散关系对比<sup>[63]</sup>。SLs 横向 ( $x$  和  $y$ ) 方向的周期仍为材料的晶格常数  $a$ 。而在法向 ( $z$ ) 方向, 周期为  $D = d_A + d_B$ , 因此第一布里渊区的最大宽度为  $\pi/D$  而不是  $\pi/a$ 。进一步地, SLs 的色散关系与其体材料有较大差别。例如, 在布里渊区的中心和边缘处会形成带隙。带隙的形成可以阻碍声子能量的透射, 从而导致热导率下降。然而, 通过理想简谐 LD 模型计算的 SLs 色散关系, 声子 MFP 须远大于周期厚度<sup>[148]</sup>。

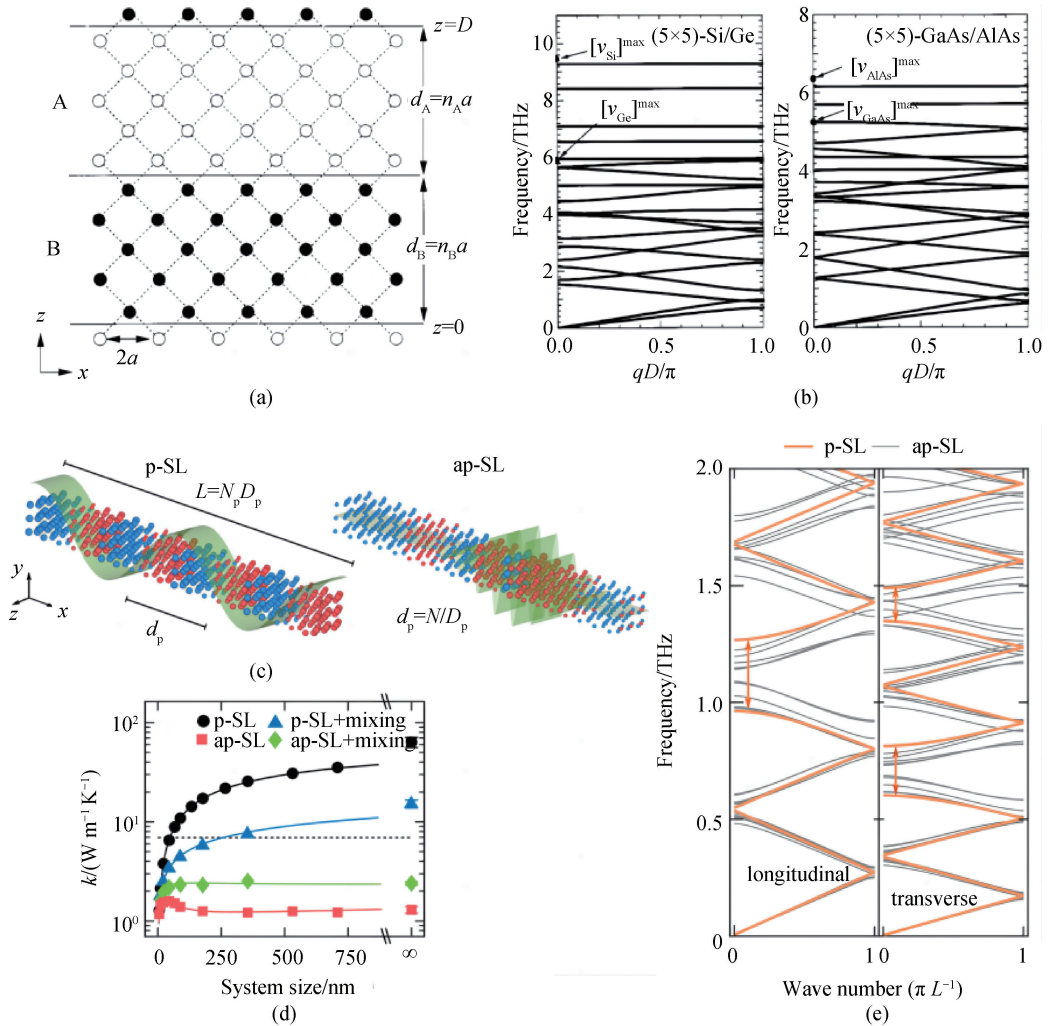


图 3 (a) SLs 的周期单元示意图和 (b) Si/Ge 和 GaAs/AlAs SLs 的声子色散<sup>[95]</sup>;

周期和非周期 SLs 的 (c) 结构示意图、(d) 热导率和 (e) 声子色散<sup>[63]</sup>

Fig. 3 (a) Schematic image of a unit period in SLs and (b) phonon dispersions of Si/Ge and GaAs/AlAs SLs<sup>[95]</sup>;

(c) schematic, (d) thermal conductivity and (e) phonon dispersions of periodic and aperiodic superlattice<sup>[63]</sup>

虽然声子在折叠布里渊区中心和边缘附近的群速度降低对于 SLs 热导率下降有重要贡献,但理想 LD 模型并不能预测得到与实验观察同数量级的热导率降低值<sup>[95]</sup>。这意味着实验测量中,声子-声子相互作用、缺陷和粗糙界面散射等非相干散射机制也可能发挥重要作用。由于简谐 LD 模型假设声子 MFP 远大于周期厚度<sup>[93,95,148,153-155]</sup>,为完全相干输运过程。对于部分相干过程,SLs 热导率计算值通常随周期厚度增加先减小,然后在约 10 个单原子层之后趋于稳定。当周期厚度很小时,LD 模型与实验结果相近,但由于未考虑非相干机制,无法解释周期厚度较大时,热导率随周期厚度增加而增大的实验现象<sup>[58,81]</sup>。而基于阻尼晶格波的 LD 模型,即晶格波并不扩展到整个超晶格而只存在于一定周期内,可以得到与部分相干热传导实验测量相同的趋势。这种阻尼波通过在平面波方程中引入复波矢得到,该波矢的复部由界面漫散射等导致的退相干过程决定。关于 LD 模型在部分相干相区的应用将在第 4 节中进一步介绍。

近期工作基于 LD 模型提出了涵盖完整声子输运相区的唯象表达式,并给出了对应的物理图像,用于解释图 3(c) 所示的非周期 SLs 的声子局域化<sup>[63]</sup>。该模型考虑了非周期 SLs 内声子局域化和退相干过程的相互作用。图 3(e) 显示,在周期性 SLs 中,纵波和横波模式皆由于带折叠而形成明显带隙。这些带隙附近的色散曲线变得平坦,导致声子群速度减小,热导率的降低。当人为引入次级无序周期时,非周期 SLs 中的声子谱形成了多个微带,因局域化效应声子群速度和热导率进一步下降。

## 2.2 弹性波动模型

能量载流子的波动性质会在界面和纳米结构内产生与体相不同的输运机制。电子、光子和声子三种能量载体可产生的波动现象相似。其中,电子波和电磁波可以分别通过薛定谔方程(或相对论条件下的狄拉克方程)和麦克斯韦方程组等波动方程描述,声子相干热传导也可针对不同尺寸、界面形貌和所处温度范围的纳米结构,采用与声波和弹性波类似的连续分析方法<sup>[23]</sup>。不过三种能量载体的统计行为、色散关系和起因存在差异,波的传播过程也存在不同,例如,声波在界面的模式转换。

当载热声子波长远大于结构特征尺寸,或可忽略原子结构并将离散晶格看作连续介质,例如低温情况下,理想量子结构中的弹性声子热传导<sup>[3]</sup>和 SLs 内的相干热传导<sup>[23]</sup>。此时,晶格波的传播通过经典声波的 EWM 描述,基于偏离平衡位置的局部介质位移与应变张量几何关系,由广义胡克定律和经典力学中的牛顿第二运动定律可以推导出应力张量和位移之间的关系。要实现 PnCs 中的干涉效应,声波必须跨越多个界面,从而产生多个次级波。声波穿过界面的能量透射系数可以通过求解多个耦合界面的应力和位移连续性方程来获得。值得注意的是,原子尺度下的位移速度连续性却不一定成立,连续性假设在满足长波条件或界面足够规则平整时才可成立。对于这类情况,可采用传递矩阵<sup>[156]</sup>或散射矩阵方法<sup>[3]</sup>计算。

与未经修正的理想简谐 LD 方法相似,EWM 仅考虑了纯粹的相干输运过程。当周期或温度持续增加时,相干效应逐渐减弱,而声子的非相干/粒子行为变得重要,此时波动描述无法捕捉完整物理图像。EWM 常用于传统 PnCs 内频率范围在太赫兹以下的声波或弹性波计算<sup>[143,146]</sup>。当考虑纳米 PnCs 内太赫兹以上的载热声子时,需要慎重考虑连续介质和弹性假设的适用条件。例如,高频声子容易在粗糙界面或边界产生漫散射<sup>[157,161]</sup>,并且原子无序<sup>[133,162]</sup>、杂质和缺陷散射<sup>[28-29,163-164]</sup>同样可能导致声子的退相干过程。对于复杂结构和较高温度的情况,MD 模拟方法将更加适用于直接描述可能蕴含各类退相干机制的纳尺度热传导<sup>[10]</sup>。

## 2.3 非平衡格林函数

NEGF 方法已被广泛地应用于纳米结构电子和声子输运等各类物理系统的研究中<sup>[165-166]</sup>。与经典的 EWM、MD 和半经典的 PBTE 等方法不同,NEGF 起源于量子场论,为量子力学方法。1971 年,Caroli 等<sup>[167]</sup>首次利用 NEGF 研究了电子的量子输运。后续 Meir 等<sup>[168]</sup>推导了朗道尔公式,为介观系统中的电子输运研究提供了理论框架。除电子输运外,NEGF 方法还可用于处理半导体异质结中的声子输运,并给出原子振动引起的热流公式<sup>[169-170]</sup>,同时可以结合 DFT 计算提高准确性<sup>[171-174]</sup>。此外,虽然 NEGF 理论框架传统上未包含声子间散射,但最新研究进展已表明:可以在该框架内引入非谐散射效应<sup>[175-177]</sup>。

NEGF 包含了原子细节并原生地描述了载热声子的波动性质,是纳米 PnCs 内相干和弹道热传导的有效研究方法<sup>[48,178-179]</sup>。例如,NEGF 可用于验证低温相干热传导导致的 SLs 热导率与长度的线性关系,并量化界面原子混合的影响<sup>[48]</sup>。该方法也被用于解释高温下界面粗糙度对声子相干输运的部分破坏过程,并进一步预测低频相干模式与高频非相干模式竞争导致的最小热导率,给出临界周期厚度<sup>[174]</sup>。此外,也有工作采用 NEGF 验证了同位素对 SLs 热导率的影响,通过结构调控可以显著降低石墨烯同位素 SLs 的热导率<sup>[122]</sup>。模式分辨的 NEGF 计算可以提供单个声子模式的传输信息,比如用于捕捉非周期 SLs 中的局域声子模式<sup>[65]</sup>。晶格振动的相位信息对于分析纳米 PnCs 中的声子干涉效应也很重要<sup>[166,180-181]</sup>。类比电子输运,Klößner 等基于 NEGF 从中心散射区域信息中获取传输特征,从而保持了声子的相位信息,用于声子的相干性研究<sup>[182]</sup>。关于纳尺度热传导 NEGF 研究的系统介绍和总结,可以参考近期的研究<sup>[10,36,165-166,183]</sup>。

## 3 相干热传导中的典型波动效应

现有研究表明,界面无序(如粗糙度和原子混合)、材料物性、结构无序性和温度等因素都会对相干热传导产生影响<sup>[28-29,133,157-164]</sup>。而内在载热声子的波动行为通常难以直接观测,这凸显了上述理论和模拟方法在解释对波动效应和输运特性和指导相干热传导调控中的重要意义。

### 3.1 低温相干热传导现象

完全相干热传导通常只在低温度条件下存在。在实际情况下,随着周期数或温度的增加或界面无序度的提升,声子退相干效应将增强并使相干效应逐渐减弱,声子的非相干或粒子行为变得显著。以 SLs 为例,

在非相干输运相区,不同层内的声子不存在相位相关性。此时,SLs 的法向热导率并不依赖于层数,由各层热导率和界面热阻串联决定<sup>[120]</sup>:

$$\kappa_{\perp,SL} = \frac{d_{SL}}{d_A/\kappa_A + d_B/\kappa_B + 2R_K}, \quad (2)$$

其中,  $d_{SL} = d_A + d_B$  为周期厚度,  $d_A$  和  $d_B$ ,  $\kappa_A$  和  $\kappa_B$  分别为材料 A 和 B 的层厚和薄膜热导率,  $R_K$  为界面热阻, 也称为 Kapitza 热阻<sup>[5-6]</sup>。假设  $d_A = d_B = d$ , 由式(2)可知  $\kappa_{\perp,SL}$  随着  $d$  的减小而降低, 可归因于声子 MFP 受限于周期厚度。该趋势在实验中已被多次观测<sup>[58, 80-82]</sup>。然而, 当周期厚度进一步减小至声子 MFP 以下时, 观察到了周期厚度减小导致 SLs 热导率增加的反向趋势<sup>[58, 184]</sup>, 该现象必须通过声子的波动性质解释。前面提到, 对于经历波动干涉的声子, 虽然诸如带折叠、带隙形成和带展宽等效应会降低声子群速度, 从而降低热导率, 但随着周期的减小, 上述效应将减弱从而导致热导率回升<sup>[35, 95, 154, 185]</sup>。

在低温条件下, 可导致声子退相干的界面漫散射或其他非谐散射将减弱甚至可以忽略, 载热声子波长可增加两个数量级以上, 这使得声子的传播距离显著增加。对于简谐晶格波, SLs 热导率  $\kappa_{\perp,SL}$  与总长度  $L_{SL}$  的关系可表示为  $\kappa_{\perp,SL} = \sigma_{SL} L_{SL}$ , 其中类比于界面热导  $R_K$ ,  $\sigma_{SL}$  为 SLs 的热导<sup>[5-6]</sup>。在完全相干热传导过程中,  $\sigma_{SL}$  保持恒定,  $\kappa_{\perp,SL}$  随  $L_{SL}$  增加线性增长<sup>[48, 186-187]</sup>。如图 4(a) 所示, Luckyanova 等<sup>[48]</sup> 测量了周期厚度恒定的 SLs 热导率。在 30~150 K 范围内, 图 4(b) 中 SLs 热导率随周期数的线性增长被认为是相干热传导的明确证据。当温度继续升高或者周期数超过 5, 退相干效应增强, SLs 热导率表现出非线性依赖关系。其他研究也指出类似的退相干效应对热导率的影响, 高温下大量激发的中高频声子更容易在粗糙界面发生漫散射, 因此相干输运被抑制, 削弱了类似图 4(b) 中的线性关系<sup>[174]</sup>。

总体而言, 相干热传导主要由低温下波动行为容易被观察的长波声子主导, 此时非谐散射导致的退相干效应较弱, 可以深入讨论载热声子的潜在波动效应, 例如干涉、隧穿和表面散射等。随着系统从完全相干相区转变, 例如通过继续提高温度或增加周期厚度, 退相干过程逐渐增强, 出现部分相干或非相干现象。

### 3.2 干涉和隧穿

当波(电子波、电磁波和声波等)在多层连续介质内的界面处发生全内反射时, 在界面另一侧会出现衰减波<sup>[23, 143, 189-190]</sup>。衰减波携带进入第二介质的能量通量或粒子通量的时间平均为零, 但瞬时场和能量并不为零, 衰减波的场或波函数在离开界面后呈指数衰减。若在界面处引入中间薄层, 衰减波在完全衰减前能够透射穿过中间薄层, 使其能量或粒子通量“隧穿”进入下一介质。以 SLs 为例的纳米 PnCs 内, 若 SLs 的周期厚度(纳米尺度)小于载热声子波长, 或可能发生相似的原子尺度下的隧穿现象。需要注意该过程类比了经典声波的“隧穿”现象, 在原子尺度下需要基于量子力学描述的进一步验证。在不同物理过程中, 声子的隧穿概念并不严格一致。例如, 对于固体间的真空间隙, 纯粹的声波或弹性波严格来讲无法传播。然而, 压电效应可以引发声波或声子在真空间隙的隧穿<sup>[191-192]</sup>; 电声波的衰减电场可扩展到真空间隙, 使其在该空间内的传播成为可能, 这类声波有时也被称为电声波; 在近场热辐射中, 当固体间的真空间隙足够小时, 晶格振动或声子还可通过该空间内仍存在的原子相互作用产生隧穿, 部分能量也可实现以热传导的形式传播<sup>[193-194]</sup>。此外, 根据 Allen-Feldmann 理论<sup>[195]</sup>, 非晶材料内的热量输运由扩散子主导, 能量可以通过不同声子模式间的类波隧穿过程传输<sup>[196-200]</sup>。

对于低温条件下的理想 SLs 结构, 忽略非谐散射并假设介质连续, 可基于图 4(c) 所示的 EWM 计算 SLs 的声子能量透射率, 从而直观表现声子的干涉、隧穿和限制效应<sup>[94, 150, 152, 188]</sup>。如图 4(d) 所示, 声子谱失配和全内反射引起的限制效应可导致单层薄膜热导率的显著降低<sup>[94]</sup>。声子干涉对单层薄膜热导率的影响较小, 但在例如 SLs 的多层结构内, 干涉可以产生多个带隙并显著降低其热导率。简谐假设下的透射谱分析有助于声子波动行为的理解。图 4(e) 给出了 SLs 与单一界面的声子透射谱对比<sup>[188]</sup>。声子的透射率显著依赖于其入射角度、频率和模式。当入射角大于临界角时, 全内反射导致透射系数下降。由于 SLs 周期厚度为纳尺度, 声子隧穿可以导致其能量透射率稍有恢复。相较于单一界面, SLs 的透射系数明显更低, 多个带隙的形成也表明干涉效应的存在。并且隧穿声子同样受到周期结构影响也表现出干涉现象。干涉和限制(全内反射)效应降低了 SLs 热导率, 而隧穿效应使热导率适度回升。由此可见, 多种机制参与了相干热传导过程, 并发挥了重要作用。但值得注意的是, EWM 涉及多种假设, 尚未包含声子的非谐散射行为并且缺少原子细节。

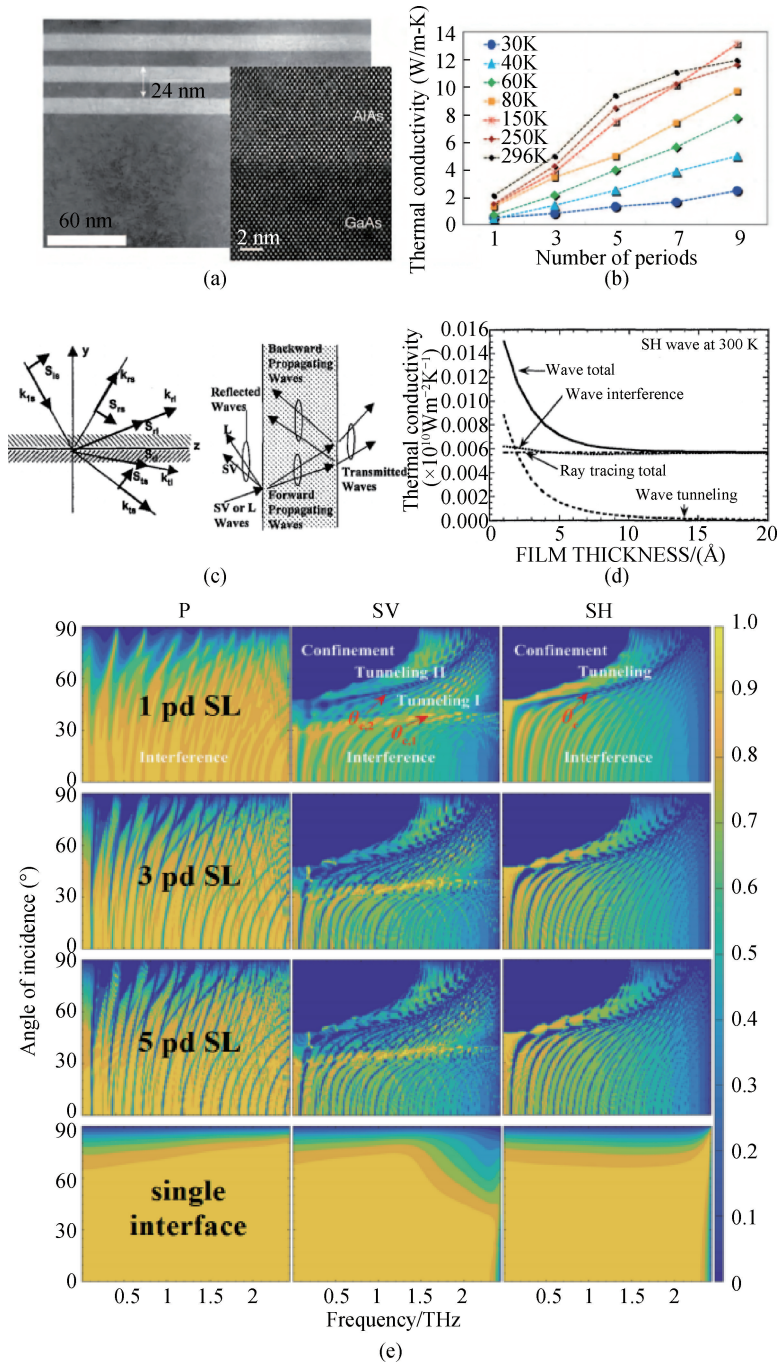


图 4 (a) 周期厚度恒定的 GaAs/AlAs SLs 和 (b) 其热导率测量值<sup>[48]</sup>; (c) 界面和薄膜内的声子波散射和 (d) 薄膜热导的 EWM 计算值<sup>[94]</sup>; (e) GaAs/AlAs SLs 和单一界面的声子能量透射谱<sup>[188]</sup>

Fig. 4 (a) GaAs/AlAs SLs with constant period thickness and (b) their measured thermal conductivity<sup>[48]</sup>; (c) reflection and transmission of phonon waves at the interface and in the film and (d) calculated thermal conductance of a thin film by EWM<sup>[94]</sup>; (e) phonon energy transmission spectra of GaAs/AlAs SLs and single interface<sup>[188]</sup>

声波间的相互作用和引起的波动效应可作为原子模拟方法的参考和辅助理解, 并被视为一个理想情况下的上限, 即只考虑完全相干运输过程, 例如图 4(b) 所示的低温相干热传导。在部分相干运输研究中需引入其他非谐散射过程。

### 3.3 表界面散射

如前所述, 表界面散射对于 SLs 和其他纳米 PnCs 内相干声子的带折叠和退相干效应至关重要。相干声子的布洛赫模式可延伸到整个结构, 因此 SLs 可从二级周期性的角度被视为具有超晶格晶胞和声子色散的

均匀材料。而来源于界面无序(原子混合或粗糙度)的表界面漫散射可以使声子失去其相位信息并破坏布洛赫干涉而造成非相干模式的输运,此时 SLs 表现为由两种交替材料堆叠而成的复合材料,每种材料有各自的声子色散。由此,在确定了声子 MFP 和界面热导等参数后,可以通过 PBTE 方法确定 SLs 的热导率。然而,尽管界面无序对于不同频率声子的影响差异已有一定认识,其对声子相干性的微观影响机制尚不清晰。

Sun 等<sup>[201]</sup>通过 MD 模拟研究了界面处声子能量透射率随着粗糙度厚度的变化。粗糙度厚度对长波声子的能量透射率可以忽略不计。而对于中高频短波声子,随着粗糙度厚度的增加透射率会降低直至达到饱和。结合 DFT 和 NEGF 计算,Tian 等<sup>[173]</sup>指出界面原子混合可以增加声子透射,前提是界面层的厚度和轮廓得到适当控制,这与粗糙界面使声子透射降低的直觉相反。如果两种材料的声学失配较大,这种效应会更加显著。在此基础上,Tian 等<sup>[174]</sup>进一步研究了 Si/Ge SLs 的热传导。通过固定周期厚度并改变周期数,研究发现界面粗糙度部分破坏了高温下的相干声子输运。图 5(a)展示了分别具有光滑和粗糙界面的 SLs 热导率<sup>[174]</sup>。界面光滑 SLs 的热导率表现出随周期数线性增加的特征,表明存在相干输运,尽管最终非谱效应限制了相干输运的范围。相比之下,界面粗糙 SLs 的热导率增长速度较慢,表明存在部分非相干输运。界面粗糙度(计算中将原子混合层视为界面粗糙度)增加了短周期 SLs 的热导率,这是因为原子混合层使声子态密度变化更为平滑<sup>[174]</sup>。需要注意的是声子谱的重合与界面漫散射间的竞争关系,因为两种机制皆由原子混合引入,并最终导致了特定粗糙度和周期数时声子输运的增强。因此,该结论与原子混合导致热导率降低的实验观测结果并不矛盾<sup>[49]</sup>。

除了界面少量原子混合引起的界面失序,图 5(b)所示的由界面高度起伏定义的粗糙度同样导致界面输运的显著变化<sup>[202-205]</sup>。例如,Hopkins 等<sup>[203-204]</sup>通过量子点引入制备了具有不同均方根粗糙度的界面以量化其对热输运的影响,该研究发现均方根粗糙度大于 4 nm 时,界面热导可下降 1.6 倍,并给出了图 5(c)所示的依赖关系。界面失序对单一界面导热的影响已被广泛研究<sup>[6]</sup>。但 SLs 内的界面散射更为复杂且包含对声子相干性的影响,仍有待进一步研究。

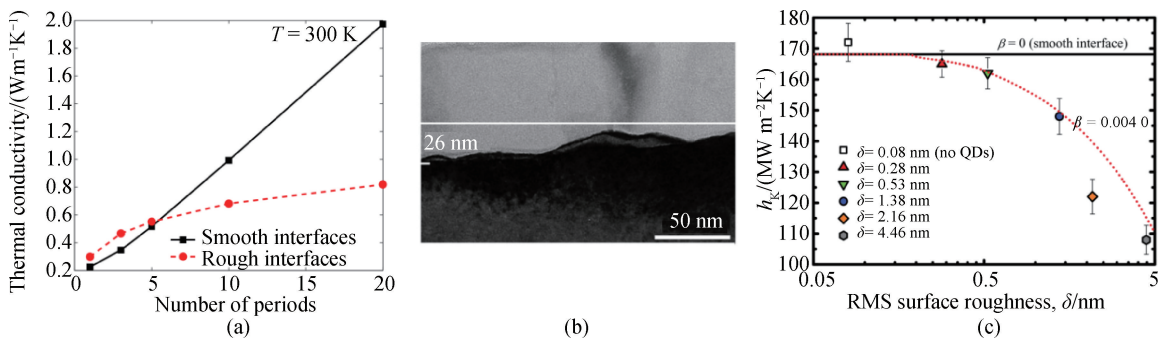


图 5 (a) 界面平滑和粗糙 Si/Ge SLs 的热导率<sup>[174]</sup>; (b) Al/Si 粗糙界面<sup>[204]</sup>; (c) Al/Si 界面热导随粗糙度的变化<sup>[203]</sup>

Fig. 5 (a) Thermal conductivity of Si/Ge SLs with smooth and rough interfaces<sup>[174]</sup>; (b) TEM micrographs of Al/Si rough interface<sup>[204]</sup>; (c) interfacial thermal conductance of Al/Si interfaces as a function of roughness<sup>[203]</sup>

### 3.4 局域化和共振

非周期或无序纳米 PnCs 中的载热声子局域化是相干热传导中的重要现象<sup>[58-69,206]</sup>。如图 6(a)所示, Mendoza 等<sup>[60]</sup>采用 NEGF 预测了界面处随机嵌入 ErAs 纳米颗粒的 GaAs/AlAs SLs 随长度增加出现的热导率最大值现象。由于指数抑制的局域声子的出现,导致在扩散到局域输运的过渡相区,即从多通道到单通道输运的临界点处出现了热导率最大值。随后,类似结构的热导率最大值现象被实验验证<sup>[62]</sup>。研究发现 SLs 热导率随周期数增加而增大并最终达到饱和,表明从弹道到扩散输运的过渡。此外,非周期 SLs 同样会出现由声子局域化导致的热导率最大值现象。Juntunen 等<sup>[63]</sup>基于 LD 计算指出非周期 SLs 的热导率最大值出现在局域和扩散输运的过渡相区,而局域化源于声子谱中子带的形成,如 2.1 节中图 3(c)~(e)所示。通过声子局域化可进一步降低纳米 PnCs 热导率,在热电转换等应用中表现出极大潜力。但相关设计的调控空间极大,一些研究工作基于机器学习方法提出了例如图 6(b)的 SLs 优化策略。其中,研究发现非周期 SLs 最

小热导率的临界周期厚度远小于对应的周期 SLs<sup>[207]</sup>, 如图 6(c) 所示。临界周期以上, 界面处的非相干声子散射较少; 临界周期以下, 空间随机性下降导致更多的相干声子脱离局域化, 热导率增加。由于难以跟踪特定的运输模式, 声子局域化常通过热导率随结构长度的衰减来推断。但模式分辨的 NEGF 研究发现了图 6(d) 所示的声子运输的指数衰减, 提供了局域化的直接证据<sup>[65]</sup>。该研究在整体热导率随长度变化过程中没有集体减少的情况下, 也能清晰地捕捉到不同结构中的局域模式, 强调了声子模式分辨对相干热传导分析的重要性。

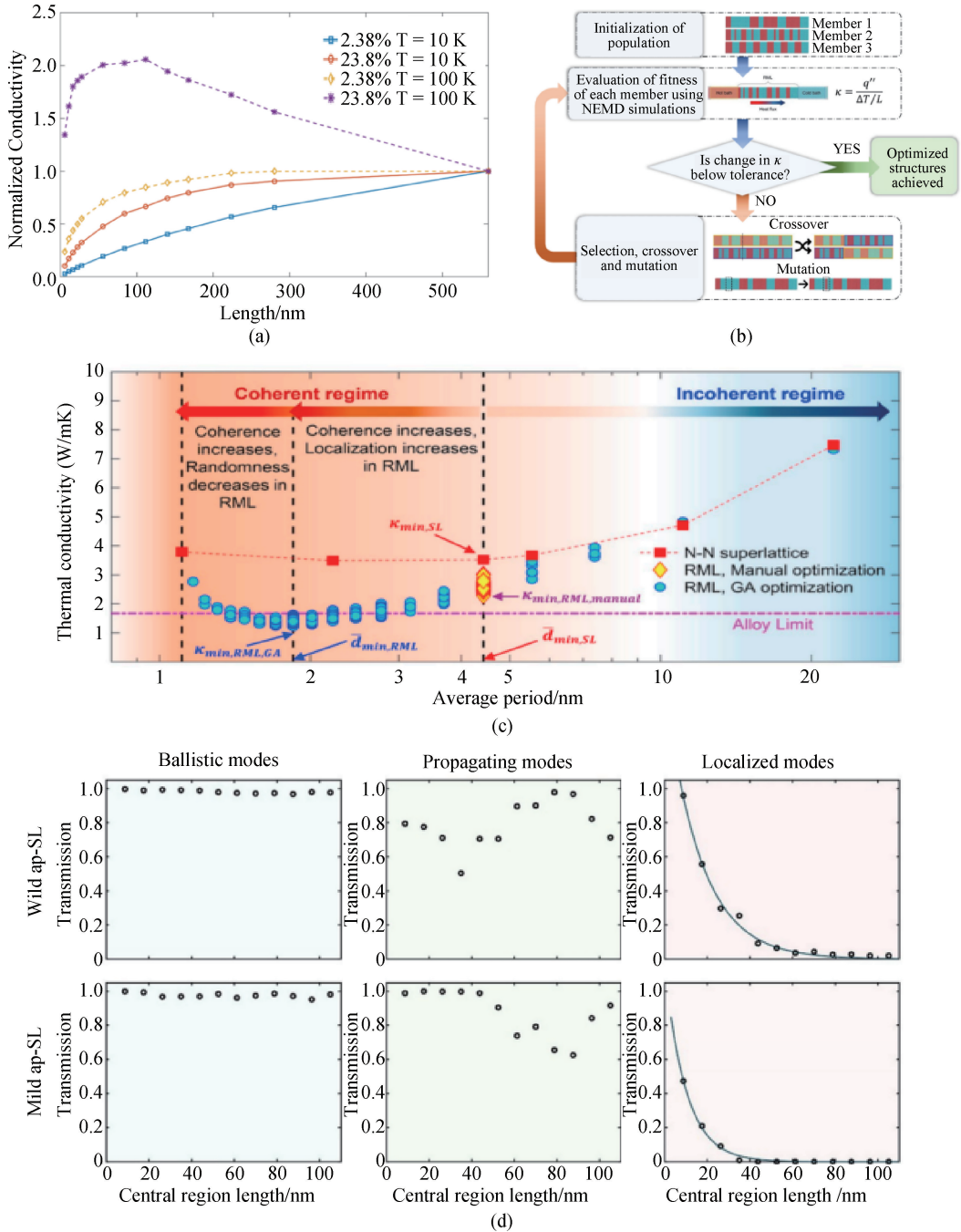


图 6 (a)不同 ErAs 界面覆盖率的 GaAs/AlAs SLs 的热导率随其长度的变化<sup>[60]</sup>; (b)遗传算法优化方法示意图<sup>[207]</sup>;

(c)周期和非周期 SLs 的热导率随平均周期厚度的变化<sup>[207]</sup>; (d)非周期 SLs 内的声子弹道、传输和局域模式<sup>[65]</sup>

Fig. 6 (a) Thermal conductivity versus length of GaAs/ AlAs SLs with different ErAs interfacial coverage<sup>[60]</sup>; (b) schematic of the genetic algorithm based optimization method<sup>[207]</sup>; (c) variation of thermal conductivity with average period thickness for periodic and aperiodic SLs<sup>[207]</sup>; (d) phonon ballistic, propagating and localized mode in aperiodic SLs<sup>[65]</sup>

局部共振结构可以在不改变薄膜基材的情况下,通过引入孔洞、界面和杂质等散射结构有效降低纳米结构内载热声子的热导率,相关波动机制还包括共振杂化<sup>[88-92]</sup>和双路径干涉<sup>[70-73]</sup>等。如图 7(a)和 7(b)所示,通过构建局部共振声子超材料可以改变对应薄膜基体的声子频谱<sup>[89-90]</sup>,这是由于周期排列的柱状结构产生的局部共振与薄膜的晶格色散的通过作用。模拟研究表明该超材料热导率可能会低至相应均质薄膜的 50%。如图 7(c)所示,局部共振也可导致硅纳米线的极低热导率<sup>[91]</sup>。声子共振和传播模式的杂化可显著降低低频范围内(低于 4 THz)的声子群速度和 MFP。如图 7(d)所示, Ma 等<sup>[92]</sup>利用硅纳米线笼结构的共振杂化效应分别量化了声子的波动和粒子效应对热导率的贡献。

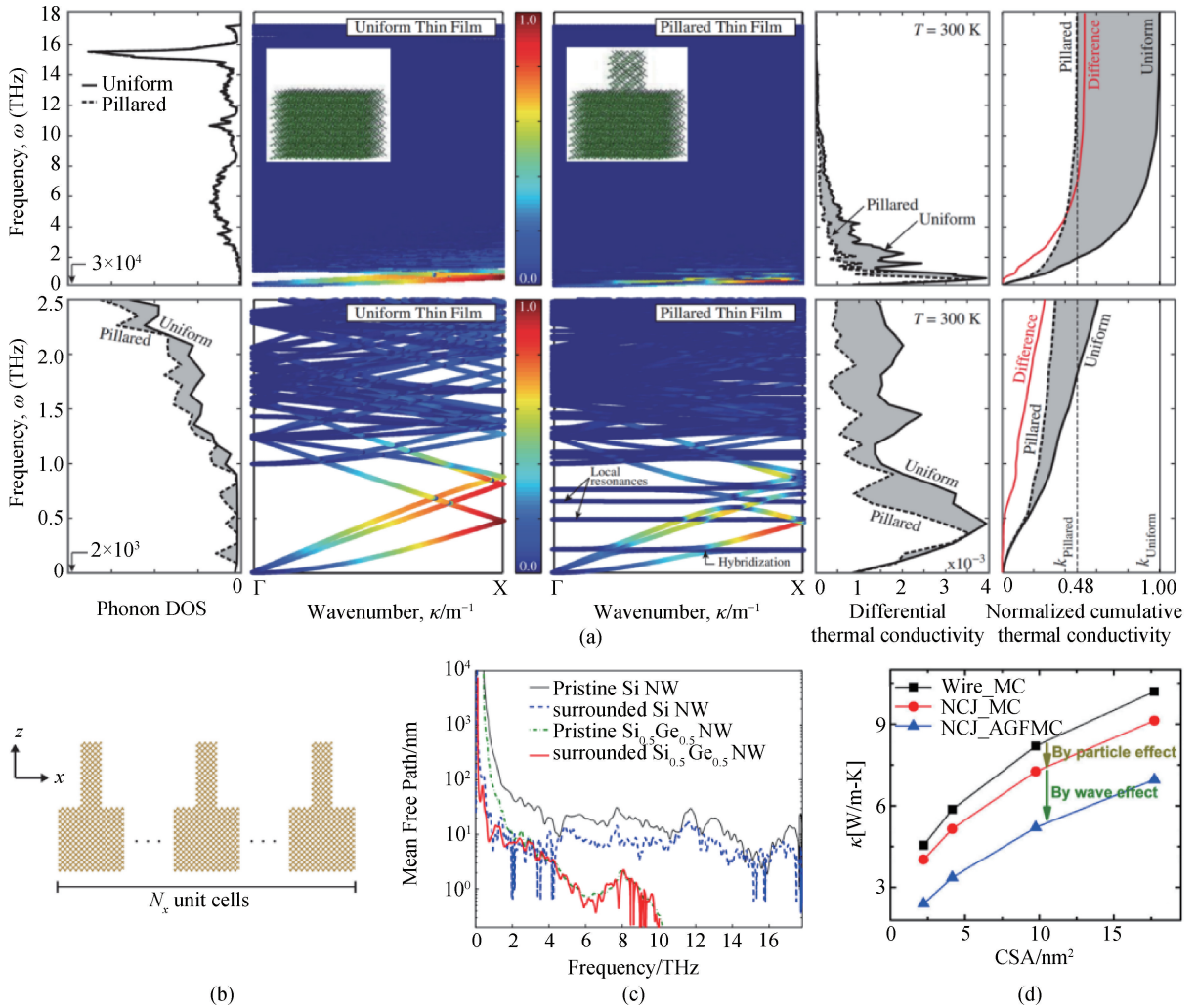


图 7 (a)具有柱状结构的硅薄膜与对应均质薄膜的声子色散和热导率对比<sup>[89]</sup>; (b)具有柱体阵列的硅薄膜结构示意图<sup>[90]</sup>; (c)不同结构硅纳米线的声子 MFP<sup>[91]</sup>; (d)硅纳米线交叉结的热导率<sup>[92]</sup>

Fig. 7 (a) Comparison of the phonon dispersion and thermal conductivity of a pillared silicon thin film with a corresponding uniform thin film<sup>[89]</sup>; (b) schematic of silicon membrane with pillar arrays<sup>[90]</sup>; (c) phonon MFP of silicon nanowires with different structures<sup>[91]</sup>; (d) thermal conductivity of silicon nanowire cross junction<sup>[92]</sup>

## 4 部分相干导热理论与声子的波动和粒子行为

最小热导率现象已在 Si/Ge<sup>[80,82]</sup>、GaAs/AlAs<sup>[81]</sup>、Bi $_2$ Te $_3$ /Sb $_2$ Te $_3$ <sup>[58]</sup>等多种 SLs 结构中被观察到,如图 8(a)所示<sup>[50]</sup>。众多研究采用 MD 模拟<sup>[123,208-212]</sup>,以及结合 LD<sup>[120,213]</sup>/DFT<sup>[121,214]</sup>/MC<sup>[76,106]</sup>的 PBTE 方法对这一现象进行了解释<sup>[120,208]</sup>。特别地,MD 模拟研究在 SLs<sup>[148,208-211,215-224]</sup>、碳纳米管<sup>[225]</sup>和纳米线<sup>[226]</sup>等一维纳米 PnCs,以及二维孔式<sup>[61,67,227]</sup>和柱式<sup>[88,90-92]</sup>纳米 PnCs 中发现了声子部分相干热传导、局域化和共振杂化

等现象。这些研究也表明了界面粗糙度、晶格失配、结构随机性、应变和温度对于相干热传导的影响,并强调了声子相干性、波动和粒子行为划分的重要性。

研究发现,SLs 最小热导率出现在载相干到非相干的过渡相区,有时也称为部分相干相区<sup>[213,228]</sup>。其中,Zhu 等<sup>[222]</sup>验证了最小热导率的出现是由于晶格色散和非谐散射间的竞争机制。如图 8(b)所示,为了解释部分相干运输机制,除了 SLs 总长度和周期厚度,该研究给出了几个额外的特征长度,包括声子相干长度、局部和全局 MFP。相干长度用于表征声子从粒子(经典效应)到波动性质的转变<sup>[94,118-119]</sup>,MFP 的确定参考了声子水动力学理论,通过局部和全局努森数量化弹道运输。部分相干运输由于受到多种声子波动行为的影响,具体机制尚不清晰。因此,对载热声子波粒行为的明确划分和深入理解至关重要<sup>[50,51,105,222,229-230]</sup>。

本节将主要总结现有工作在描述声子波粒行为方面的探索,并讨论声子的相干性以及波动与粒子行为的划分。

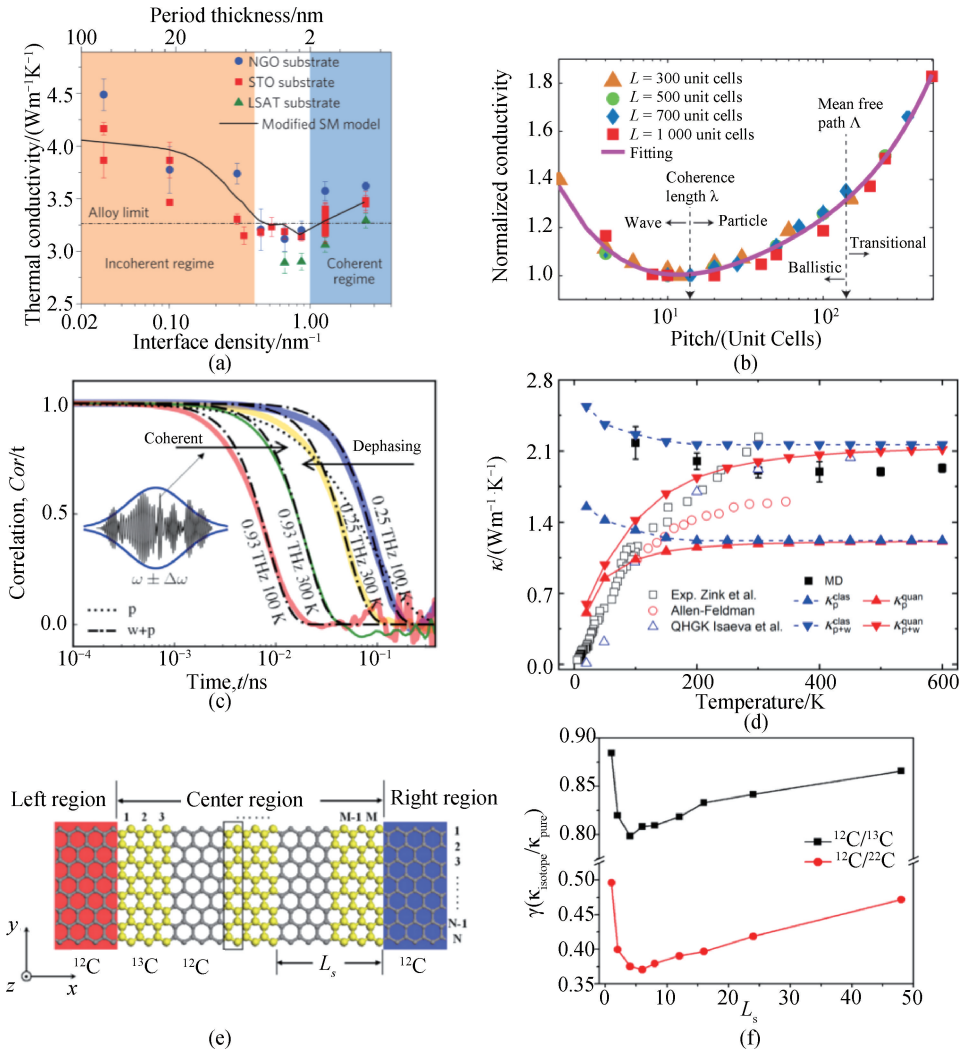


图 8 (a) CaTiO<sub>3</sub>/SrTiO<sub>3</sub> SLs 热导率测量值<sup>[50]</sup>; (b) 石墨烯/硼氮化物 SLs 热导率<sup>[222]</sup>; (c) Ti<sub>3</sub>VSe<sub>4</sub> 内声子衰减随时间的变化<sup>[199]</sup>; (d) 非晶硅热导率理论和测量值<sup>[200]</sup>; 石墨烯同位素 SLs 纳米带的 (e) 示意图和 (f) 热导率<sup>[122]</sup>  
 Fig. 8 (a) Measured thermal conductivity of CaTiO<sub>3</sub>/SrTiO<sub>3</sub> SLs<sup>[50]</sup>; (b) thermal conductivity of graphene/hBN SLs<sup>[222]</sup>; (c) phonon decay versus correlation time in Ti<sub>3</sub>VSe<sub>4</sub><sup>[199]</sup>; (d) theoretical and measured thermal conductivities of amorphous silicon<sup>[200]</sup>; (e) schematic of the isotopic-superlattice graphene nanoribbon and (f) its thermal conductivity<sup>[118]</sup>

#### 4.1 部分相干相区的声子热输运理论

对于部分相干相区声子热输运行为的描述通常可分为两类。一是拓展粒子描述,通过结合 LD 模型或

MD 模拟引入包含相干特征的色散关系或模式演化作为波动性修正,以修正 PBTE、Green-Kubo 公式和固体热输运 Wigner 方程为代表;二是拓展波动描述,构造界面微观散射机制与声子相干模式的竞争,通过引入退相干机制作为粒子性修正,以修正 NEGF 理论和 LD 模型为代表。特别地,为捕捉载热声子在原子运动模拟中的相干或者波动性质,原子级 MD 模拟提供了原子系统动态演化的经典描述<sup>[97]</sup>,其在计算较大周期厚度的 SLs 的非相干热导率的可行性已被验证<sup>[226,231]</sup>,目前也被广泛用于部分相干相区的研究。

#### 4.1.1 粒子描述的拓展

基于粒子图像的 PBTE 前期被广泛用于非相干热传导计算<sup>[119,147]</sup>。为了考虑部分相干热传导,一些工作通过声子色散关系的修正在 PBTE 计算中引入了波动效应<sup>[120-121]</sup>。通过类比电子能带计算,Simkin 等<sup>[120]</sup>提出了一种唯象的简单立方 LD 模型,在波矢中添加与声子 MFP 相关的虚部来考虑 SLs 中的 MFP 改变对声子模式的影响,进而通过 PBTE 预测了 SLs 的最小热导率现象。但该模型未能解释 SLs 的横向热导率降低,并且法向热导率的计算结果与其他 LD 模型相近,远小于实验测得的 SLs 热导率下降值。Yang 等<sup>[213]</sup>将该问题归因于 LD 模型中界面漫散射效应的缺失,并进一步改进了模型。同样,他们通过虚波矢引入了界面漫散射效应来同时考虑相干和非相干输运。经过该处理,模型可以解释实验观测到的热导率下降值及其与 SLs 周期厚度和温度的依赖关系。随后,Garg 等<sup>[121]</sup>结合 DFT 和 PBTE 计算考虑了非谐声子散射和界面漫散射。该研究发现结合低频声子群速度的下降和界面失序引起的高频声子散射,SLs 热导率可以降低到合金极限以下;随着 SLs 周期数的增长,声子的群速度减小和寿命增加的共同作用将导致热导率最小值的出现。为了解释二维纳米 PnCs 热导率显著降低的实验现象,在 Simkin 等<sup>[120]</sup>的部分相干输运模型基础上,Dechaumphai 等<sup>[127]</sup>通过体材料声子 MFP 和 PnCs 周期尺寸的数值对比将声子划分为相干和非相干两类,通过分别计算对应的声子色散得到二维纳米 PnCs 的热导率。通过结合 DFT 和声子 MFP 抽样方法,可以进一步提高二维纳米 PnCs 的 PBTE 计算准确性<sup>[76,232]</sup>。

另一方面,MD 模拟以波包的形式对声子的波粒行为进行统一描述,通常难以在模式水平上对二者进行划分。在复杂晶体热输运研究中,近期工作基于 Wigner 函数统一并扩展了 Peierls-Boltzmann 和 Allen-Feldman 输运方程,从而构建了晶体和非晶材料内的传播子和扩散子(分别表现为粒子和波动行为的热载流子)热传导的理论框架<sup>[195-197]</sup>。近年来,为了揭示纳米 PnCs 中载热声子的相干特性,特别是在模式水平解释非相干到相干行为的转变,Zhang 等<sup>[199]</sup>提出了包含载热声子时间相干性的广义衰减定律,通过在热导率表达式中包含声子间散射引起的指数衰减并引入与相干时间的平方成正比的延迟项,可用于描述与经典粒子行为截然不同的声子弛豫特性。通过 MD 模拟验证,发现温度升高会抑制低频声子的“本征”相干行为<sup>[199]</sup>,而不同模式声子之间也由于相位相干而产生一种“相互”相干效应进而延缓声子的衰减,如图 8(c) 所示。这两种不同但共存的声子相干行为都会对声子衰减及其传导产生重要影响,并且也可用于解释其他物理过程中的声子相干性。在该理论框架下,Zhang 等<sup>[200]</sup>进一步发现晶格振动的相干图像在非晶材料中扩散子输运中起着重要作用。如图 8(d) 所示,在全面考虑晶格振动的波动特性后,非晶硅热导率预测值与实验测量结果很好地吻合。该工作也证实了载热声子波动相干性对包括晶体和非晶材料在内的多种固体热输运产生着重要影响。

#### 4.1.2 波动描述的拓展

基于声子波动图像的理论模型也被用于解释最小热导率现象。在纳米 PnCs 的 NEGF 方法中引入声子的非谐效应通常较为复杂<sup>[175,177,179,233]</sup>。因此,现有部分相干输运的 NEGF 研究通常未考虑声子间散射,而是通过将非相干输运与界面模式(粗糙度、原子混合或晶格失配等)相关联<sup>[122-124]</sup>。例如,Tian 等<sup>[174]</sup>将最小热导率归因于声子相干输运和粗糙界面漫散射引起的退相干的竞争。Ouyang 等<sup>[122]</sup>在对图 8(e) 中石墨烯同位素 SLs 的研究中发现,该结构的导热特性强烈依赖于周期厚度和同位素质量。而同位素质量对热导率的影响呈单调变化,较大的质量差异导致较小的热导率。随着 SLs 周期厚度的减小,热导率经历了从下降到增加的转变,出现了图 8(f) 所示的最小热导率现象,这归因于声子的界面散射和隧穿两种输运机制的竞争。与此类似地,LD 模型同样通过声子相干模式和界面漫散射的竞争解释最小热导率现象,但尚未考虑非谐声子散射<sup>[120,213]</sup>。

此外,Jiang 等<sup>[123]</sup>在对石墨烯和氮化硼 SLs 的 NEGF 研究中观察到 SLs 尺寸显著小于声子 MFP 时出现

了最小热导率,该结果难以用现有理论解释。例如,Simkin 等<sup>[120]</sup>理论预测最小热导率出现在声子 MFP 附近,表明声子弹道-扩散输运的转变。Jiang 等<sup>[123]</sup>将其发现的现象归因于 SLs 中局域化特性和受限模式数量的竞争关系。随周期厚度增加,受限模式的局域化增强,而受限模式的数量减少,两种机制的相互作用直接导致最小热导率出现在弹道输运相区。这也表明最小热导率出现在何种相区仍是开放问题。

#### 4.2 载热声子的相干性和波粒行为的划分

纳米 PnCs 中的相干和部分相干热传导研究可以采用粒子和波动等不同视角,这表明声子波粒行为的划分对于部分相干热传导的理解具有重要意义。在前面介绍的研究中,相干性的概念通常被引用来解释纳米 PnCs 的热导率趋势,但在这类热传导中载热声子相干性的定义尚不清晰。如图 1 所示,由于太赫兹载热声子的波长远长于声波或弹性波,在纳米 PnCs 相干热传导研究中应慎重使用后的相干性概念。在不同物理过程中,众多相干现象都可以形式化为一种相关性<sup>[229]</sup>。例如,光和电子的空间相干性源自波函数的空间相关性<sup>[234-241]</sup>。这些模型多基于二阶相干理论<sup>[242]</sup>。实际上,与输运过程的波动-粒子特征表现最直接相关的特征尺度为相干长度(或对应地,相干时间),其与系统中存在的退相干机制紧密相关。这里将简要梳理前人工作,初步探讨载热声子的波粒行为划分。

从波粒行为对热输运贡献的角度,Wang 等<sup>[230]</sup>从唯象的角度提出了将载热声子分为相干和非相干的双声子模型。在周期性 SLs 中相干和非相干声子都参与热传导。而在非周期性 SLs 中,相干声子发生局域化,仅非相干声子参与热传导。如图 9(a)所示,将模型与 MD 模拟拟合可得到相干和非相干声子在弹道输运极限情况下的热导、本征 MFP 和相干声子的局域化长度。界面密度相同的周期和非周期 SLs 中,非相干声子的散射率应大致相同,而相干声子在非周期 SLs 的长距离传播中产生局域化,对热导率的贡献可忽略不计。非周期 SLs 的热导率视为完全由非相干声子贡献,从而周期和非周期 SLs 的热导率差值被用于估计相干声子的贡献。同样,Hu 等<sup>[67]</sup>采用该双声子模型展示了石墨烯多孔纳米 PnCs 热导率的相同趋势,结构失序或随机性也易导致相干声子产生局域化<sup>[61,67,230]</sup>。此外,如图 7(d)所示,通过结合 NEGF 和 MC 模拟,可分别量化一维硅纳米声子超材料中声子的波粒行为的贡献<sup>[92]</sup>。该研究发现粒子行为对热导率降低的贡献也可达到 39%。这类工作通过宏观热导率的差异量化了声子波粒行为的贡献<sup>[61,67,92,230]</sup>。

在声子热输运相区划分方面,早期研究常采用声子退相干机制相关的散射特征尺度作为区分其波动和粒子行为的特征尺度。Chen<sup>[23]</sup>类比电子输运中的退相干机制,提出了声子热输运的相位破缺长度概念,即通过各种散射过程(如声子-声子和声子-电子散射)完全破坏热载流子的相位所需经历的长度,通常与 MFP 相当或略长。许多研究类似地通过声子 MFP 对波动和粒子相区进行划分<sup>[124,212]</sup>。Dechaumphai 等<sup>[127]</sup>沿用了 Yang 等<sup>[213]</sup>提出的部分相干模型,通过临界频率将声子分别视为波或粒子。如图 9(b)所示,临界频率由声子 MFP 和 PnCs 特征尺寸的大小关系决定。频率高于临界频率的粒子相区,使用体材料的声子色散并通过考虑边界散射修正弛豫时间;低频波动相区,采用 PnCs 的声子色散并考虑带折叠效应。通过新的声子谱计算体系的整体热导率。Liao 等<sup>[243]</sup>采用了类似方法,但使用了如图 9(c)所示的粗糙度相关的临界  $\omega_s$ <sup>[244]</sup>

$$\omega_s = \frac{2\pi V_s}{R} \sqrt{\frac{-\ln(P)}{16\pi^3}}, \quad (3)$$

其中, $V_s$  为声速, $R$  为粗糙度大小(包括表面粗糙度、孔壁粗糙度、晶格位移、无序等), $P$  为镜面散射系数。然而,严格来讲,量子相干输运和量子弹道输运尽管均属于介观体系的非平衡输运,但二者分别对应于声子的相位和动量,在各类输运过程中并不总是同时存在<sup>[48,230]</sup>。特别地,单次弹性散射不会损失相位信息,而随机多次弹性散射可能带来相位信息消失而造成退相干。

近年来,随着理论认识的进一步深入,陆续有学者从声子波包及其演化的角度考察载热声子部分相干输运的特征。Latour 等<sup>[229]</sup>提出了载热声子空间相干长度的微观定义,并通过跟踪平衡态下原子位移波动来计算频率相关的空间相干长度  $l_c(\omega)$ ,提供了区分相干输运与界面漫散射的判据。当声子波包的空间延展大于周期厚度,即  $l_c(\omega) \leq d_{SL}$  时,声子为相干输运且色散关系由带折叠效应决定,MFP 不受界面的影响。 $l_c(\omega) > d_{SL}$  时弹道声子经历界面散射,MFP 受到 SLs 厚度的限制。该工作还进一步讨论了图 9(d)所示的作为不同热输运机制划分判据的几个重要物理参数,并用于进一步解释前期研究报道的各类热导率趋势。另外,也有工作采用了图 9(e)所示的经典或载热声子波长的概念作为载热声子波粒行为划分的依据<sup>[34,97]</sup>。

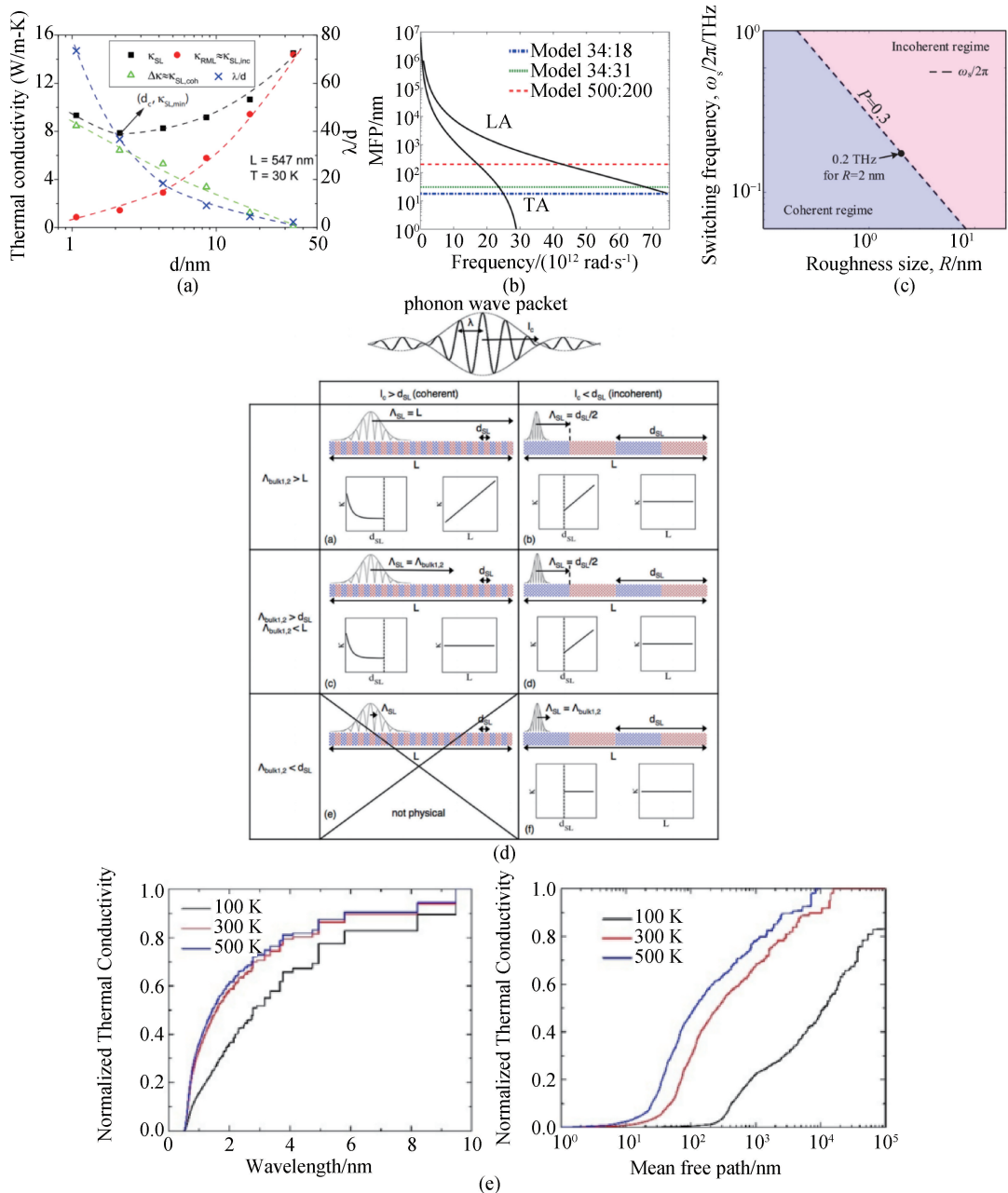


图 9 (a) 周期/非周期 SLs 的热导率和声子 MFP<sup>[230]</sup>; (b) 室温体硅材料的声子 MFP<sup>[127]</sup>; (c) 相干/非相干转换频率与粗糙度的依赖关系<sup>[243]</sup>; (d) SLs 中的声子特征长度<sup>[229]</sup>; (e) 硅的累积热导率随声子波长和 MFP 的变化<sup>[97]</sup>

Fig. 9 (a) Thermal conductivity and phonon MFP of periodic and aperiodic SLs<sup>[230]</sup>; (b) phonon mean free path of bulk Si at room temperature; (c) coherent/incoherent switching frequency as a function of roughness size<sup>[243]</sup>; (d) phonon characteristic lengths involved in SLs<sup>[229]</sup>; (e) accumulated thermal conductivity of silicon as a function of phonon wavelength and MFP<sup>[97]</sup>

实际上,在光的传播中,相干长度可以理解为一波源发出的波超出一定距离时,其携带的能量可以相互叠加而不用考虑相位信息。这里涉及的相干性可以通过物理光学和激光原理等角度理解,存在空间相干性(物理空间中声子扩展模式的波动传播)和时间相干性(频域的非单色性影响光子波包寿命)等概念。类似地,对于声子而言,不仅存在空间相干性,还有时间相干性的概念,后者与晶体或非晶材料内不同声子模式之间散射影响声子波包寿命有关<sup>[197-200,245]</sup>。

需要注意的是,不同工作对声子相干尺度的定义和确定方法仍然存在一定的差别,特别是不同相干或退相干机制在各类输运过程中的重要性也可能呈现一定的差异,其中的一些特征尺度还可能相互重叠而造成机制的耦合,因此声子波粒行为在具体划分方式上仍然有待于依托具体物理系统开展进一步研究。

## 5 总结与展望

本文主要关注纳尺度相干热传导中表现出的声子波动行为。概述了相干热传导的主要理论和模拟研究方法,并讨论了这些方法的优势和瓶颈。同时重点介绍了载热声子的干涉、隧穿、表界面散射和局域化等波动效应的微观产生机制和影响因素。现有方法从不同的尺度(连续介质和原子尺度)和物理图像(波动和粒子)出发,分别探索了低温相干、部分相干和非相干相区内的不同输运机制。当前工作在理论和模拟上对相干热传导的理解已取得了显著进展,但由于载热声子波粒耦合输运行为的复杂性,对载热声子相干性的定义和波粒行为的划分仍有待深入研究。纳米 PnCs 具有极低的热导率和较高的调控性,已在热电能量转换领域展现出巨大潜力。而在电声耦合(Bardeen-Cooper-Schrieffer 超导及超流等)和光声耦合(黄昆方程)等输运过程中波动行为的新机制也值得深入研究。

### 参 考 文 献

- [ 1 ] CAHILL D G, FORD W K, GOODSON K E, et al. Nanoscale thermal transport[J]. *Journal of Applied Physics*, 2003, 93(2): 793-818.
- [ 2 ] CAHILL D G, BRAUN P V, CHEN G, et al. Nanoscale thermal transport. II. 2003-2012[J]. *Applied Physics Reviews*, 2014, 1(1): 011305.
- [ 3 ] 段文晖,张刚. 纳米材料热传导[M]. 北京:科学出版社,2017.
- [ 4 ] 中国科学院. 中国学科发展战略-电子设备热管理[M]. 北京:科学出版社,2022.
- [ 5 ] SWARTZ E T, POHL R O. Thermal boundary resistance[J]. *Reviews of Modern Physics*, 1989, 61(3): 605-668.
- [ 6 ] CHEN Jie, XU Xiangfan, ZHOU Jun, et al. Interfacial thermal resistance: Past, present, and future[J]. *Reviews of Modern Physics*, 2022, 94(2): 025002.
- [ 7 ] KOVÁCS R. Heat equations beyond Fourier: From heat waves to thermal metamaterials[J]. *Physics Reports*, 2024, 1048: 1-75.
- [ 8 ] GUO Yangyu, WANG Moran. Phonon hydrodynamics and its applications in nanoscale heat transport[J]. *Physics Reports*, 2015, 595: 1-44.
- [ 9 ] 郭洋裕,王沫然. 声子水动力学:进展、应用与展望[J]. *中国科学(物理学 力学 天文学)*, 2017, 47(7): 110-134.
- [ 10 ] ZHANG Zhongwei, GUO Yangyu, BESCOND M, et al. Coherent thermal transport in nano-phononic crystals: An overview[J]. *APL Materials*, 2021, 9(8): 081102.
- [ 11 ] ANUFRIEV R, MAIRE J, NOMURA M. Review of coherent phonon and heat transport control in one-dimensional phononic crystals at nanoscale[J]. *APL Materials*, 2021, 9(7): 070701.
- [ 12 ] MA Dengke, LI Xiuling, ZHANG Lifa. Tuning thermal transport via phonon localization in nanostructures[J]. *Chinese Physics B*, 2020, 29(12): 126502.
- [ 13 ] LUO Tianluo, DING Yafei, WEI Baojie, et al. Phononic thermal conduction and thermal regulation in low-dimensional micro-nano scale systems: Nonequilibrium statistical physics problems from chip heat dissipation[J]. *Acta Physica Sinica*, 2023, 72(23): 234401.
- [ 14 ] CHEN Gang. Non-Fourier phonon heat conduction at the microscale and nanoscale[J]. *Nature Reviews Physics*, 2021, 3(8): 555-569.
- [ 15 ] 曹炳阳. 纳米结构的非傅里叶导热[M]. 北京:科学出版社,2023.
- [ 16 ] GINGERICH D B, MAUTER M S. Quantity, quality, and availability of waste heat from United States thermal power generation[J]. *Environmental Science & Technology*, 2015, 49(14): 8297-8306.
- [ 17 ] GE Bangzhi, LEE H, JINO I M, et al. Engineering an atomic-level crystal lattice and electronic band structure for an extraordinarily high average thermoelectric figure of merit in n-type PbSe[J]. *Energy & Environmental Science*, 2023, 16(9): 3994-4008.
- [ 18 ] TAN Gangjian, ZHAO Lidong, G. KANATZIDIS M. Rationally designing high-performance bulk thermoelectric materials[J]. *Chemical Reviews*, 2016, 116(19): 12123-12149.
- [ 19 ] XIE Siqi, ZHU Hongxin, ZHANG Xing, et al. A brief review on the recent development of phonon engineering and manipulation at nanoscales[J]. *International Journal of Extreme Manufacturing*, 2024, 6(1): 012007.
- [ 20 ] LI Nianbei, REN Jie, WANG Lei, et al. Colloquium: Phononics: Manipulating heat flow with electronic analogs and beyond

- [J]. *Reviews of Modern Physics*, 2012, 84(3): 1045–1066.
- [21] ZIMAN J M. *Electrons and phonons; The theory of transport phenomena in solids*[M]. New York: Oxford University Press, 1960.
- [22] KITTEL C. *Introduction to solid state physics*[M]. Wiley: New York, 1996.
- [23] CHEN Gang. *Nanoscale energy transport and conversion; A parallel treatment of electrons, molecules, phonons, and photons* [M]. New York: Oxford University Press, 2005.
- [24] SRIVASTAVA G P. *The physics of phonons*[M]. 2nd ed. Boca Raton: Crc Press, 2022.
- [25] PEIERLS R. Zur kinetischen Theorie der Wärmeleitung in Kristallen[J]. *Annalen der Physik*, 1929, 395(8): 1055–1101.
- [26] CALLAWAY J. Model for lattice thermal conductivity at low temperatures[J]. *The Physical Review*, 1959, 113(4): 1046–1051.
- [27] HOLLAND M G. Phonon scattering in semiconductors from thermal conductivity studies[J]. *The Physical Review*, 1964, 134(2A): A471–A480.
- [28] HU Shiqian, CHEN Jie, YANG Nuo, et al. Thermal transport in graphene with defect and doping: Phonon modes analysis [J]. *Carbon*, 2017, 116: 139–144.
- [29] FENG Tianli, RUAN Xiulin, YE Zhenqiang, et al. Spectral phonon mean free path and thermal conductivity accumulation in defected graphene: The effects of defect type and concentration[J]. *Physical Review B*, 2015, 91(22): 224301.
- [30] MAURER L N, AKSAMIJA Z, RAMAYYA E B, et al. Universal features of phonon transport in nanowires with correlated surface roughness[J]. *Applied Physics Letters*, 2015, 106(13): 133108.
- [31] LIM J, HIPALGAONKAR K, ANDREWS S C, et al. Quantifying surface roughness effects on phonon transport in silicon nanowires[J]. *Nano Letters*, 2012, 12(5): 2475–2482.
- [32] MARTIN P, AKSAMIJA Z, POP E, et al. Impact of phonon-surface roughness scattering on thermal conductivity of thin si nanowires[J]. *Physical Review Letters*, 2009, 102(12): 125503.
- [33] HEPPLESTONE S P, SRIVASTAVA G P. Theory of interface scattering of phonons in superlattices[J]. *Physical Review B*, 2010, 82(14): 144303.
- [34] MALDOVAN M. Phonon wave interference and thermal bandgap materials[J]. *Nature Materials*, 2015, 14(7): 667–674.
- [35] XIE Guofeng, DING Dingding, ZHANG Gang. Phonon coherence and its effect on thermal conductivity of nanostructures[J]. *Advances in Physics: X*, 2018, 3(1): 1480417.
- [36] CHEN J, HE J, PAN D, et al. Emerging theory and phenomena in thermal conduction: A selective review[J]. *Science China Physics, Mechanics & Astronomy*, 2022, 65(11): 117002.
- [37] NOMURA M, ANUFRIEV R, ZHANG Zhongwei, et al. Review of thermal transport in phononic crystals[J]. *Materials Today Physics*, 2022, 22: 100613.
- [38] LANDAU L. Theory of the superfluidity of helium II[J]. *The Physical Review*, 1941, 60(4): 356–358.
- [39] YU Cuiqian, OUYANG Yulon, CHEN Jie. A perspective on the hydrodynamic phonon transport in two-dimensional materials [J]. *Journal of Applied Physics*, 2021, 130(1): 010902.
- [40] YU Cuiqian, SHAN Shuyue, LU Shuang, et al. Characteristics of distinct thermal transport behaviors in single-layer and multilayer graphene[J]. *Physical Review B*, 2023, 107(16): 165424.
- [41] LU S, ZHANG Z, LI Y, et al. Phononic metagrating for lattice wave manipulation[J]. *Physical Review B*, 2024, 109(7): 075404.
- [42] JIANG Jianhui, LU Shuang, OUYANG Yulou, et al. How hydrodynamic phonon transport determines the convergence of thermal conductivity in two-dimensional materials[J]. *Nanomaterials(Basel, Switzerland)*, 2022, 12(16): 2854.
- [43] GUO Yangyu, ZHANG Zhongwei, BESCOND M, et al. Size effect on phonon hydrodynamics in graphite microstructures and nanostructures[J]. *Physical Review B*, 2021, 104(7): 075450.
- [44] HOGLUND E R, BAO Deliang, O'HARA A, et al. Direct visualization of localized vibrations at complex grain boundaries [J]. *Advanced Materials*, 2023, 35(13): 2208920.
- [45] JIANG Xue, SHI Chengzhi, LI Zhenglu, et al. Direct observation of Klein tunneling in phononic crystals[J]. *Science*, 2020, 370(6523): 1447–1450.
- [46] LEGRAND R, HUYNH A, JUSSELAND B, et al. Direct measurement of coherent subterahertz acoustic phonons mean free path in GaAs[J]. *Physical Review B*, 2016, 93(18): 184304.

- [47] RAWAT V, KOH Y K, CAHILL D G, et al. Thermal conductivity of (Zr,W)N/ScN metal/semiconductor multilayers and superlattices[J]. *Journal of Applied Physics*, 2009, 105(2): 024909.
- [48] LUCKYANOVA M N, GARG J, ESFARJANI K, et al. Coherent phonon heat conduction in superlattices[J]. *Science*, 2012, 338(6109): 936–939.
- [49] CHEN Peixuan, KATCHO N A, FESER J P, et al. Role of surface-segregation-driven intermixing on the thermal transport through planar Si/Ge superlattices[J]. *Physical Review Letters*, 2013, 111(11): 115901.
- [50] RAVICHANDRAN J, YADAV A K, CHEAITO R, et al. Crossover from incoherent to coherent phonon scattering in epitaxial oxide superlattices[J]. *Nature Materials*, 2014, 13(2): 168–172.
- [51] HOŁUJ P, EULER C, BALKE B, et al. Reduced thermal conductivity of TiNiSn/HfNiSn superlattices[J]. *Physical Review B*, 2015, 92(12): 125436.
- [52] SAHA B, KOH Y R, COMPARAN J, et al. Cross-plane thermal conductivity of (Ti,W)N/(Al,Sc)N metal/semiconductor superlattices[J]. *Physical Review B*, 2016, 93(4): 045311.
- [53] SAHA B, KOH Y R, FESER J P, et al. Phonon wave effects in the thermal transport of epitaxial Tin/(Al,Sc)N metal/semiconductor superlattices[J]. *Journal of Applied Physics*, 2017, 121(1): 015109.
- [54] CHEAITO R, POLANCO C A, ADDAMANE S, et al. Interplay between total thickness and period thickness in the phonon thermal conductivity of superlattices from the nanoscale to the microscale: Coherent versus incoherent phonon transport[J]. *Physical Review B*, 2018, 97(8): 085306.
- [55] BUGALLO D, LANGENBERG E, CARBÓ-ARGIBAY E, et al. Tuning coherent-phonon heat transport in LaCoO<sub>3</sub>/SrTiO<sub>3</sub> superlattices[J]. *The Journal of Physical Chemistry Letters*, 2021, 12(49): 11878–11885.
- [56] MEYER D, METTERNICH D, HENNING P, et al. Coherent phonon transport and minimum of thermal conductivity in LaMnO<sub>3</sub>/SrMnO<sub>3</sub> superlattices[DB/OL]. arXiv, 2021(2021-08-12). <https://arxiv.org/abs/2108.05860>.
- [57] CHO Haijun, WU Yuzhuang, KWON Y, et al. Anisotropic heat conduction of coherently transported phonons in InGaO<sub>3</sub>(ZnO)<sub>m</sub> single crystal films with superlattice structures[DB/OL]. arXiv, 2021(2021-08-11). <https://arxiv.org/abs/2108.04970>.
- [58] VENKATASUBRAMANIAN R. Lattice thermal conductivity reduction and phonon localizationlike behavior in superlattice structures[J]. *Physical Review B*, 2000, 61(4): 3091–3097.
- [59] MALDOVAN M, THOMAS E L. Simultaneous localization of photons and phonons in two-dimensional periodic structures[J]. *Applied Physics Letters*, 2006, 88(25): 251907.
- [60] MENDOZA J, CHEN Gang. Anderson localization of thermal phonons leads to a thermal conductivity maximum[J]. *Nano Letters*, 2016, 16(12): 7616–7620.
- [61] HU Shiqian, ZHANG Zhongwei, JIANG Pengfei, et al. Randomness-induced phonon localization in graphene heat conduction[J]. *The Journal of Physical Chemistry Letters*, 2018, 9(14): 3959–3968.
- [62] LUCKYANOVA M N, MENDOZA J, LU H, et al. Phonon localization in heat conduction[J]. *Science Advances*, 2018, 4(12): eaat9460.
- [63] JUNTUNEN T, VÄNSKÄ O, TITTONEN I. Anderson localization quenches thermal transport in aperiodic superlattices[J]. *Physical Review Letters*, 2019, 122(10): 105901.
- [64] YOSHIHIRO T, NISHIGUCHI N. Mode-conversion effects of phonons on Anderson localization[J]. *Physical Review B*, 2019, 100(23): 235441.
- [65] HU Renjiu, TIAN Zhiting. Direct observation of phonon Anderson localization in Si/Ge aperiodic superlattices[J]. *Physical Review B*, 2021, 103(4): 045304.
- [66] NI Yuxiang, VOLZ S. Evidence of phonon Anderson localization on the thermal properties of disordered atomic systems[J]. *Journal of Applied Physics*, 2021, 130(19): 190901.
- [67] HU Shiqiang, ZHANG Zhongwei, JIANG Pengfei, et al. Disorder limits the coherent phonon transport in two-dimensional phononic crystal structures[J]. *Nanoscale*, 2019, 11(24): 11839–11846.
- [68] YANG Nuo, ZHANG Gang, LI Baowen. Ultralow thermal conductivity of isotope-doped silicon nanowires[J]. *Nano Letters*, 2008, 8(1): 276–280.
- [69] YANG Lina, YANG Nuo, LI Baowen. Extreme low thermal conductivity in nanoscale 3D Si phononic crystal with spherical pores[J]. *Nano Letters*, 2014, 14(4): 1734–1738.

- [70] HU Shiqian, FENG Leng, SHAO Cheng, et al. Two-path phonon interference resonance induces a stop band in a silicon crystal matrix with a multilayer array of embedded nanoparticles[J]. *Physical Review B*, 2020, 102(2): 024301.
- [71] HAN Haoxue, FENG Lei, XIONG Shiyun, et al. Effects of phonon interference through long range interatomic bonds on thermal interface conductance[J]. *Low Temperature Physics*, 2016, 42(8): 711–716.
- [72] HAN H, POTYOMINA L G, DARINSKII A A, et al. Phonon interference and thermal conductance reduction in atomic-scale metamaterials[J]. *Physical Review B*, 2014, 89(18): 180301.
- [73] JIANG Pengfei, OUYANG Yulou, REN Weijun, et al. Total-transmission and total-reflection of individual phonons in phononic crystal nanostructures[J]. *APL Materials*, 2021, 9(4): 040703.
- [74] YU J K, MITROVIC S, THAM D, et al. Reduction of thermal conductivity in phononic nanomesh structures[J]. *Nature Nanotechnology*, 2010, 5(10): 718–721.
- [75] HOPKINS P E, REINKE C M, SU M F, et al. Reduction in the thermal conductivity of single crystalline silicon by phononic crystal patterning[J]. *Nano Letters*, 2011, 11(1): 107–112.
- [76] JAIN A, YU Yingju, MCGAUGHEY A J H. Phonon transport in periodic silicon nanoporous films with feature sizes greater than 100 nm[J]. *Physical Review B*, 2013, 87(19): 195301.
- [77] YANG Nuo, XU Xiangfan, ZHANG Gang, et al. Thermal transport in nanostructures[J]. *AIP Advances*, 2012, 2(4): 041410.
- [78] GU Xiaokun, YANG Ronggui. Phonon transport and thermal conductivity in two-dimensional materials[J]. *Annual Reviews heat transfer*, 2016, 19(1): 1–65.
- [79] CAPINSKI W S, MARIS H J. Thermal conductivity of GaAs/AlAs superlattices[J]. *Physica B: Condensed Matter*, 1996, 219–220: 699–701.
- [80] LEE S M, CAHILL D G, VENKATASUBRAMANIAN R. Thermal conductivity of Si–Ge superlattices[J]. *Applied Physics Letters*, 1997, 70(22): 2957–2959.
- [81] CAPINSKI W S, MARIS H J, RUF T, et al. Thermal-conductivity measurements of GaAs/AlAs superlattices using a picosecond optical pump-and-probe technique[J]. *Physical Review B*, 1999, 59(12): 8105–8113.
- [82] BORCA-TASCIUC T, LIU Weili, LIU Jianlin, et al. Thermal conductivity of symmetrically strained Si/Ge superlattices[J]. *Superlattices and Microstructures*, 2000, 28(3): 199–206.
- [83] BORCA-TASCIUC D A, LIU Weili, CHEN H W, et al. Thermal conductivity of InAs/AlSb superlattices[J]. *Microscale Thermophysical Engineering*, 2001, 5(3): 225–231.
- [84] LIU W L, BORCA-TASCIUC T, CHEN G, et al. Anisotropic thermal conductivity of Ge quantum-dot and symmetrically strained Si/Ge superlattices[J]. *Journal of Nanoscience and Nanotechnology*, 2001, 1(1): 39–42.
- [85] KOH Y K, CAO Yu, CAHILL D G, et al. Heat-transport mechanisms in superlattices[J]. *Advanced Functional Materials*, 2009, 19(4): 610–615.
- [86] ANUFRIEV R, NOMURA M. Thermal conductance boost in phononic crystal nanostructures[J]. *Physical Review B*, 2015, 91(24): 245417.
- [87] MALDOVAN M. Narrow low-frequency spectrum and heat management by thermocrystals[J]. *Physical Review Letters*, 2013, 110(2): 025902.
- [88] MA Dengke, WAN Xiao, YANG Nuo. Unexpected thermal conductivity enhancement in pillared graphene nanoribbon with isotopic resonance[J]. *Physical Review B*, 2018, 98(24): 245420.
- [89] DAVIS B L, HUSSEIN M I. Nanophononic metamaterial; Thermal conductivity reduction by local resonance[J]. *Physical Review Letters*, 2014, 112(5): 055505.
- [90] HONARVAR H, HUSSEIN M I. Spectral energy analysis of locally resonant nanophononic metamaterials by molecular simulations[J]. *Physical Review B*, 2016, 93(8): 081412.
- [91] XIONG Shiyun, SÄÄSKILAHTI K, KOSEVICH Y A, et al. Blocking phonon transport by structural resonances in alloy-based nanophononic metamaterials leads to ultralow thermal conductivity[J]. *Physical Review Letters*, 2016, 117(2): 025503.
- [92] MA D, ARORA A, DENG S, et al. Quantifying phonon particle and wave transport in silicon nanophononic metamaterial with cross junction[J]. *Materials Today Physics*, 2019, 8: 56–61.
- [93] TAMURA S, HURLEY D C, WOLFE J P. Acoustic-phonon propagation in superlattices[J]. *Physical Review. B Condensed Matter*, 1988, 38(2): 1427–1449.

- [94] CHEN G. Phonon wave heat conduction in thin films and superlattices[J]. ASME Journal of Heat Transfer, 1999, 121(4): 945–953.
- [95] TAMURA S I, TANAKA Y, MARIS H J. Phonon group velocity and thermal conduction in superlattices[J]. Physical Review B, 1999, 60(4): 2627–2630.
- [96] VOLZ S, SHIOMI J, NOMURA M, et al. Heat conduction in nanostructured materials[J]. Journal of Thermal Science and Technology, 2016, 11(1): JTST0001–JTST0001.
- [97] BAO Hua, CHEN Jie, GU Xiaokun, et al. A review of simulation methods in micro/nanoscale heat conduction[J]. ES Energy&Environment, 2018, 1: 16–55.
- [98] YANG Ronggui, CHEN Gang, DRESSELHAUS M S. Thermal conductivity of simple and tubular nanowire composites in the longitudinal direction[J]. Physical Review B, 2005, 72(12): 125418.
- [99] HSIEH T Y, LIN H, HSIEH T J, et al. Thermal conductivity modeling of periodic porous silicon with aligned cylindrical pores[J]. Journal of Applied Physics, 2012, 111(12): 124329.
- [100] TANG G H, BI C, FU B. Thermal conduction in nano-porous silicon thin film[J]. Journal of Applied Physics, 2013, 114(18): 184302.
- [101] RAN Xin, WANG Moran. Efficiency improvement of discrete-ordinates method for interfacial phonon transport by gauss-legendre integral for frequency domain[J]. Journal of Computational Physics, 2019, 399: 108920.
- [102] GUO Yangyu, ZHANG Zhongwei, Nomura M, et al. Phonon vortex dynamics in graphene ribbon by solving Boltzmann transport equation with *ab initio* scattering rates[J]. International Journal of Heat and Mass Transfer, 2021, 169: 120981.
- [103] GUO Y, WANG M. Heat transport in two-dimensional materials by directly solving the phonon Boltzmann equation under Callaway's dual relaxation model[J]. Physical Review B, 2017, 96(13): 134312.
- [104] WOLF S, NEOPHYTOU N, KOSINA H. Thermal conductivity of silicon nanomeshes; Effects of porosity and roughness[J]. Journal of Applied Physics, 2014, 115(20): 204306.
- [105] RAVICHANDRAN N K, MINNICH A J. Coherent and incoherent thermal transport in nanomeshes[J]. Physical Review B, 2014, 89(20): 205432.
- [106] JEAN V, FUMERON S, TERMENTZIDIS K, et al. Monte Carlo simulations of phonon transport in nanoporous silicon and germanium[J]. Journal of Applied Physics, 2014, 115(2): 024304.
- [107] KAVIANY M. Introduction to heat transfer physics[R]. University of Michigan, 2024.
- [108] RAN Xin, GUO Yangyu, HU Zhiyu, et al. Interfacial phonon transport through Si/Ge multilayer film using Monte Carlo scheme with spectral transmissivity[J]. Frontiers in Energy Research, 2018, 6: 1–9.
- [109] RAN Xin, GUO Yangyu, WANG Moran. Interfacial phonon transport with frequency-dependent transmissivity by Monte Carlo simulation[J]. International Journal of Heat and Mass Transfer, 2018, 123: 616–628.
- [110] RAN Xin, WANG Moran. Manipulation of effective thermal conductivity of multilayer thin film by varying thickness ratio of layers using Monte Carlo simulation[J]. Physics Letters A, 2019, 383(1): 58–62.
- [111] RAN Xin, WANG Moran. Abnormal thermal boundary resistance of thin films with heat source[J]. International Journal of Heat and Mass Transfer, 2020, 147: 118941.
- [112] RAN Xin, WANG Moran. In-plane interfacial phonon transport through multi-layer thin films by theoretical analyses and Monte Carlo simulations[J]. International Journal of Heat and Mass Transfer, 2021, 176: 121438.
- [113] RAN Xin, WANG Moran. A steady-state energy-based Monte Carlo method for phonon transport with arbitrary temperature difference[J]. Journal of Heat Transfer, 2022, 144(8): 082502.
- [114] MIAO Wuli, WANG Moran. Importance of electron-phonon coupling in thermal transport in metal/semiconductor multilayer films[J]. Int J Heat Mass Transf, 2023, 200: 123538.
- [115] MIAO Wuli, WANG Moran. Nonequilibrium effects on the electron-phonon coupling constant in metals[J]. Phys Rev B, 2021, 103(12): 125412.
- [116] MIAO Wuli, WANG Moran. Reexamination of electron-phonon coupling constant in continuum model by comparison with Boltzmann transport theory[J]. Int J Heat Mass Transf, 2021, 174: 121309.
- [117] MIAO Wuli, GUO Yangyu, RAN Xin, et al. Deviation Monte Carlo scheme for thermal and electrical transport in metal nanostructures[J]. Phys Rev B, 2019, 99(20): 205433.
- [118] CHEN G. Size and interface effects on thermal conductivity of superlattices and periodic thin-film structures[J]. Journal of

- Heat Transfer, 1997, 119(2) : 220–229.
- [ 119 ] CHEN G. Thermal conductivity and ballistic-phonon transport in the cross-plane direction of superlattices [ J ]. Physical Review B, 1998, 57(23) : 14958.
- [ 120 ] SIMKIN M V, MAHAN G D. Minimum thermal conductivity of superlattices [ J ]. Physical Review Letters, 2000, 84(5) : 927–930.
- [ 121 ] GARG J, CHEN Gang. Minimum thermal conductivity in superlattices; A first-principles formalism [ J ]. Physical Review B, 2013, 87(14) : 140302.
- [ 122 ] OUYANG Tao, CHEN Yuanping, YANG K K, et al. Thermal transport of isotopic-superlattice graphene nanoribbons with zigzag edge [ J ]. Europhysics Letters, 2009, 88(2) : 28002.
- [ 123 ] JIANG Jinwu, WANG Jiansheng, WANG Bingshen. Minimum thermal conductance in graphene and boron nitride superlattice [ J ]. Applied Physics Letters, 2011, 99(4) : 043109.
- [ 124 ] WU Xin, HAN Qiang. Transition from incoherent to coherent phonon thermal transport across graphene/h-BN van der Waals superlattices [ J ]. International Journal of Heat and Mass Transfer, 2022, 184 : 122390.
- [ 125 ] ZHANG Gang. Nanoscale energy transport and harvesting; A computational study [ M ]. New York: Jenny Stanford Publishing, 2015.
- [ 126 ] ZHANG Zhuomin. Nano/microscale heat transfer [ M ]. Cham: Springer International Publishing, 2020.
- [ 127 ] DECHAUMPHAI E, CHEN Renkun. Thermal transport in phononic crystals; The role of zone folding effect [ J ]. Journal of Applied Physics, 2012, 111(7) : 073508.
- [ 128 ] MALDOVAN M. Sound and heat revolutions in phononics [ J ]. Nature, 2013, 503(7475) : 209–217.
- [ 129 ] VASILEIADIS T, VARGHESE J, BABACIC V, et al. Progress and perspectives on phononic crystals [ J ]. Journal of Applied Physics, 2021, 129(16) : 160901.
- [ 130 ] BORN M, WOLF E. Principles of optics; 60th anniversary edition [ M ]. 7rd ed. Cambridge: Cambridge University Press, 2019.
- [ 131 ] LI Chunmin, ZHANG Shengyuan, CHEN Haibo, et al. On the generalized snell's law for the design of elastic metasurfaces [ J ]. Journal of Applied Physics, 2023, 133(9) : 095104.
- [ 132 ] NIE B D, CAO Bingyang. Reflection and refraction of a thermal wave at an ideal interface [ J ]. International Journal of Heat and Mass Transfer, 2018, 116 : 314–328.
- [ 133 ] SHAO Cheng, RONG Qingyuan, LI Nianbei, et al. Understanding the mechanism of diffuse phonon scattering at disordered surfaces by atomistic wave-packet investigation [ J ]. Physical Review B, 2018, 98(15) : 155418.
- [ 134 ] JI Linxin, HUANG Aaqi, HUO Yiqi, et al. Influence of four-phonon scattering and wavelike phonon tunneling effects on the thermal transport properties of TlBiSe<sub>2</sub> [ J ]. Physical Review B, 2024, 109(21) : 214307.
- [ 135 ] DING Ding, YIN Xiaobo, LI Baowen. Sensing coherent phonons with two-photon interference [ J ]. New Journal of Physics, 2018, 20(2) : 023008.
- [ 136 ] ZHANG Xiao, ZHAO Lidong. Thermoelectric materials; Energy conversion between heat and electricity [ J ]. Journal of Materiomics, 2015, 1(2) : 92–105.
- [ 137 ] ZHU Zhenyu, TIWARI J, FENG Tianli, et al. High thermoelectric properties with low thermal conductivity due to the porous structure induced by the dendritic branching in n-type PbS [ J ]. Nano Research, 2022, 15(5) : 4739–4746.
- [ 138 ] WHITEWAY E, LEE M, HILKE M. Graphene isotope superlattices with strongly diminished thermal conductivity for thermoelectric applications [ J ]. ACS Applied Nano Materials, 2020, 3(9) : 9167–9173.
- [ 139 ] CHEN Renkun, LEE J, LEE W, et al. Thermoelectrics of nanowires [ J ]. Chemical Reviews, 2019, 119(15) : 9260–9302.
- [ 140 ] O'DWYER C, CHEN Renkun, HE J H, et al. Scientific and technical challenges in thermal transport and thermoelectric materials and devices [ J ]. ECS Journal of Solid State Science, 2017, 6(3) : N3058.
- [ 141 ] OUYANG Yulou, ZHANG Zhongwei, LI Dengfeng, et al. Emerging theory, materials, and screening methods; New opportunities for promoting thermoelectric performance [ J ]. Annalen der Physik, 2019, 531(4) : 1800437.
- [ 142 ] MUSLAND L, FLAGE L E. Thermoelectric effect in superlattices; applicability of coherent and incoherent transport models [ J ]. Computational Materials Science, 2018, 153 : 88–96.
- [ 143 ] KHELIF A, ADIBI A. Phononic crystals; Fundamentals and applications [ M ]. New York: Springer, 2016.
- [ 144 ] WEI Han, HU Yue, BAO Hua, et al. Quantifying the diverse wave effects in thermal transport of nanoporous graphene [ J ].

- Carbon, 2022, 197: 18–26.
- [145] YANG Lina, CHEN Jie, YANG Nuo, et al. Significant reduction of graphene thermal conductivity by phononic crystal structure[J]. International Journal of Heat and Mass Transfer, 2015, 91: 428–432.
- [146] NOMURA M, SHIOMI J, SHIGA T, et al. Thermal phonon engineering by tailored nanostructures[J]. Japanese Journal of Applied Physics, 2018, 57(8): 080101.
- [147] CHEN G, NEAGU M, BORCA-TASCIUC T. Thermal conductivity and heat transfer in superlattices[J]. Applied Physics Letters, 1997, 478(1): 85–90.
- [148] HYLDEGAARD P, MAHAN G D. Phonon superlattice transport[J]. Physical Review B, 1997, 56(17): 10754–10757.
- [149] NARAYANAMURTI V, STÖRMER H L, CHIN M A, et al. Selective transmission of high-frequency phonons by a superlattice: The “dielectric” phonon filter[J]. Physical Review Letters, 1979, 43(27): 2012–2016.
- [150] MIZUNO S, TAMURA S. Theory of acoustic-phonon transmission in finite-size superlattice systems[J]. Physical Review B, 1992, 45(2): 734–741.
- [151] KATO H, MARIS H J, TAMURA S. Resonant-mode conversion and transmission of phonons in superlattices[J]. Physical Review B, 1996, 53(12): 7884–7889.
- [152] TAMURA S I, WATANABE H, KAWASAKI T. Acoustic-phonon cavity modes in one-dimensional multilayered elastic structures[J]. Physical Review B, 2005, 72(16): 165306.
- [153] YANG Bao, CHEN Gang. Lattice dynamics study of anisotropic heat conduction in superlattices [J]. Microscale Thermophysical Engineering, 2000, 626(1): 83.
- [154] KISELEV A A, KIM K W, STROSCIO M A. Thermal conductivity of Si/Ge superlattices: A realistic model with a diatomic unit cell[J]. Physical Review B, 2000, 62(11): 6896–6899.
- [155] BIES W E, RADTKE R J, EHRENREICH H. Phonon dispersion effects and the thermal conductivity reduction in GaAs/AIAs superlattices[J]. Journal of Applied Physics, 2000, 88(3): 1498–1503.
- [156] NAYFEH A H. Wave propagation in layered anisotropic media: With application to composites[M]. New York: Elsevier Science, 1995.
- [157] RAN Xin, HUANG Yunfan, WANG Moran. A hybrid Monte Carlo-discrete ordinates method for phonon transport in micro/nanosystems with rough interfaces[J]. International Journal of Heat and Mass Transfer, 2023, 201, Part 2: 123624.
- [158] LIU B, KHVESYUK V I, BARINOV A A, et al. Effect of interfacial roughness on thermal boundary conductance: An elastic wave model using the Kirchhoff approximation[J]. International Journal of Mechanical Sciences, 2022, 218: 106993.
- [159] WANG Jingwei, ZHANG Zhongwei, SHI Run, et al. Impact of nanoscale roughness on heat transport across the solid–solid interface[J]. Advanced Materials Interfaces, 2020, 7(4): 1901582.
- [160] ZHANG Yingying, MA Dengke, ZANG Yi, et al. A modified theoretical model to accurately account for interfacial roughness in predicting the interfacial thermal conductance[J]. Frontiers in Energy Research, 2018, 6: 48.
- [161] JIA Lin, JU Shenghong, LIANG Xingang, et al. Tuning phonon transmission and thermal conductance by roughness at rectangular and triangular Si/Ge interface[J]. Materials Research Express, 2016, 3(9): 095024.
- [162] SHAO Cheng, BAO Hua. A molecular dynamics investigation of heat transfer across a disordered thin film[J]. International Journal of Heat and Mass Transfer, 2015, 85: 33–40.
- [163] HASLINGER S G, LOWE M J S, HUTHWAITE P, et al. Appraising kirchhoff approximation theory for the scattering of elastic shear waves by randomly rough defects[J]. Journal of Sound and Vibration, 2019, 460: 114872.
- [164] SCOTT E A, HATTAR K, ROST C M, et al. Phonon scattering effects from point and extended defects on thermal conductivity studied via ion irradiation of crystals with self-impurities[J]. Physical Review Materials, 2018, 2(9): 095001.
- [165] YU Zhizhou, XIONG Guohuan, ZHANG Lifa. A brief review of thermal transport in mesoscopic systems from nonequilibrium Green’s function approach[J]. Frontiers of Physics, 2021, 16(4): 43201.
- [166] ZENG Yujia, DING Zhongke, PAN Hui, et al. Nonequilibrium green’s function method for phonon heat transport in quantum system[J]. Journal of Physics. Condensed Matter: An Institute of Physics Journal, 2022, 34(22): 223001.
- [167] CAROLI C, COMBESCOT R, NOZIERES P, et al. Direct calculation of the tunneling current[J]. Journal of Physics C: Solid State Physics, 1971, 4(8): 916.
- [168] MEIR Y, WINGREEN N S. Landauer formula for the current through an interacting electron region[J]. Physical Review Letters, 1992, 68(16): 2512–2515.

- [169] WANG Jiansheng, WANG Jian, ZENG Nan. Nonequilibrium green's function approach to mesoscopic thermal transport[J]. *Physical Review B*, 2006, 74(3): 033408.
- [170] WANG Jiansheng, ZENG Nan, WANG Jian, et al. Nonequilibrium green's function method for thermal transport in junctions [J]. *Physical Review E, Statistical, Nonlinear, and soft Matter Physics*, 2007, 75(6 Pt1): 061128.
- [171] TAYLOR J, GUO Hong, WANG Jianwang. Ab initio modeling of quantum transport properties of molecular electronic devices [J]. *Physical Review B*, 2001, 63(24): 245407.
- [172] BRANDBYGE M, MOZOS J L, ORDEJÓN P, et al. Density-functional method for nonequilibrium electron transport[J]. *Physical Review B*, 2002, 65(16): 165401.
- [173] TIAN Zhiting, ESFARJANI K, CHEN Gang. Enhancing phonon transmission across a Si/Ge interface by atomic roughness: First-principles study with the Green's function method[J]. *Physical Review B*, 2012, 86(23): 235304.
- [174] TIAN Zhiting, ESFARJANI K, CHEN Gang. Green's function studies of phonon transport across Si/Ge superlattices[J]. *Physical Review B*, 2014, 89(23): 235307.
- [175] MINGO N. Anharmonic phonon flow through molecular-sized junctions[J]. *Physical Review B*, 2006, 74(12): 125402.
- [176] FANG Junxin, QIAN Xin, ZHAO C Y, et al. Monitoring anharmonic phonon transport across interfaces in one-dimensional lattice chains[J]. *Physical Review E*, 2020, 101(2/1): 022133.
- [177] GUO Yangyu, BESCOND M, ZHANG Zhongwei, et al. Quantum mechanical modeling of anharmonic phonon-phonon scattering in nanostructures[J]. *Physical Review B*, 2020, 102(19): 195412.
- [178] LUISIER M. Atomistic modeling of anharmonic phonon-phonon scattering in nanowires[J]. *Physical Review B*, 2012, 86(24): 245407.
- [179] DAI Jinghang, TIAN Zhiting. Rigorous formalism of anharmonic atomistic Green's function for three-dimensional interfaces [J]. *Physical Review B*, 2020, 101(4): 041301.
- [180] MIROSHNICHENKO A E, FLACH S, KIVSHAR Y S. Fano resonances in nanoscale structures[J]. *Reviews of Modern Physics*, 2010, 82(3): 2257–2298.
- [181] CAO Xuanhao, WU Dan, FENG Yexin, et al. Effect of electrophilic substitution and destructive quantum interference on the thermoelectric performance in molecular devices[J]. *Journal of Physics. Condensed Matter: An Institute of Physics Journal*, 2019, 31(34): 345303.
- [182] KLÖCKNER J C, CUEVAS J C, PAULY F. Transmission eigenchannels for coherent phonon transport[J]. *Physical Review B*, 2018, 97(15): 155432.
- [183] GU Xiaokun, FAN Z, BAO Hua. Thermal conductivity prediction by atomistic simulation methods: Recent advances and detailed comparison[J]. *Journal of Applied Physics*, 2021, 130(21): 210902.
- [184] CHAKRABORTY S, KLEINT C A, HEINRICH A, et al. Thermal conductivity in strain symmetrized Si/Ge superlattices on Si(111)[J]. *Applied Physics Letters*, 2003, 83(20): 4184–4186.
- [185] ZHAN H, ZHANG G, ZHANG Y, et al. Thermal conductivity of a new carbon nanotube analog: The diamond nanothread [J]. *Carbon*, 2016, 98: 232–237.
- [186] GU Xiao, WEI Yujie, YIN Xiaobo, et al. Colloquium: Phononic thermal properties of two-dimensional materials[J]. *Reviews of Modern Physics*, 2018, 90(4): 041002.
- [187] ZHANG Zhongwei, CHEN Jie. Thermal conductivity of nanowires \* [J]. *Chinese Physics B*, 2018, 27(3): 035101.
- [188] LIU Bin, GUO Yangyu, KHVESYUK V I, et al. Heat conduction of multilayer nanostructures with consideration of coherent and incoherent phonon transport[J]. *Nano Research*, 2022, 15(10): 9492–9497.
- [189] 魏培君. 弹性波理论[M]. 北京: 科学出版社, 2021.
- [190] BREKHOVSKIKH L M, GODIN O A. Acoustics of layered media II: Point sources and bounded beams [M]. Berlin, Heidelberg: Springer, 1999.
- [191] GENG Zhuoran, MAASILTA I J. Acoustic wave tunneling across a vacuum gap between two piezoelectric crystals with arbitrary symmetry and orientation[J]. *Physical Review Research*, 2022, 4(3): 033073.
- [192] GENG Zhuoran, MAASILTA I J. Complete tunneling of acoustic waves between piezoelectric crystals[J]. *Communications Physics*, 2023, 6(1): 178.
- [193] GUO Yangyu, GÓMEZ V M, MESSINA R, et al. Atomistic modeling of extreme near-field heat transport across nanogaps between two polar dielectric materials[J]. *Physical Review B*, 2023, 108(8): 085434.

- [194] GUO Yangyu, ADESSI C, COBIAN M, et al. Atomistic simulation of phonon heat transport across metallic vacuum nanogaps [J]. *Physical Review B*, 2022, 106(8): 085403.
- [195] ALLEN P B, FELDMAN J L. Thermal conductivity of glasses: Theory and application to amorphous Si[J]. *Physical Review Letters*, 1989, 62(6): 645–648.
- [196] ISAEVA L, BARBALINARDO G, DONADIO D, et al. Modeling heat transport in crystals and glasses from a unified lattice-dynamical approach[J]. *Nature Communications*, 2019, 10(1): 3853.
- [197] SIMONCELLI M, MARZARI N, MAURI F. Unified theory of thermal transport in crystals and glasses[J]. *Nature Physics*, 2019, 15(8): 809–813.
- [198] SIMONCELLI M, MARZARI N, MAURI F. Wigner formulation of thermal transport in solids[J]. *Physical Review X*, 2022, 12(4): 041011.
- [199] ZHANG Zhongwei, GUO Yangyu, BESCOND M, et al. Heat conduction theory including phonon coherence[J]. *Physical Review Letters*, 2022, 128(1): 015901.
- [200] ZHANG Zhongwei, GUO Yangyu, BESCOND M, et al. How coherence is governing diffuson heat transfer in amorphous solids [J]. *npj Computational Materials*, 2022, 8(1): 96.
- [201] SUN Lin, MURTHY J Y. Molecular dynamics simulation of phonon scattering at Silicon/Germanium interfaces[J]. *Journal of Heat Transfer*, 2010, 132(10): 102403.
- [202] HOPKINS P E, DUDA J C, CLARK S P, et al. Effect of dislocation density on thermal boundary conductance across GaSb/GaAs interfaces[J]. *Applied Physics Letters*, 2011, 98(16): 161913.
- [203] HOPKINS P E, DUDA J C, PETZ C W, et al. Controlling thermal conductance through quantum dot roughening at interfaces [J]. *Physical Review B*, 2011, 84(3): 035438.
- [204] DUDA J C, HOPKINS P E. Systematically controlling Kapitza conductance via chemical etching [J]. *Applied Physics Letters*, 2012, 100(11): 111602.
- [205] DUDA J, YANG C Y, FOLEY B, et al. Influence of interfacial properties on thermal transport at gold: Silicon contacts[J]. *Applied Physics Letters*, 2013, 102(8): 081902.
- [206] ANDERSON P W. Absence of diffusion in certain random lattices[J]. *The Physical Review*, 1958, 109(5): 1492–1505.
- [207] ROY CHOWDHURY P, REYNOLDS C, GARRETT A, et al. Machine learning maximized Anderson localization of phonons in aperiodic superlattices[J]. *Nano Energy*, 2020, 69: 104428.
- [208] CHEN Yunfei, LI Deyu, LUKES J R, et al. Minimum superlattice thermal conductivity from molecular dynamics [J]. *Physical Review B*, 2005, 72(17): 174302.
- [209] CHALOPIN Y, ESFARJANI K, HENRY A, et al. Thermal interface conductance in Si/Ge superlattices by equilibrium molecular dynamics[J]. *Physical Review B*, 2012, 85(19): 195302.
- [210] HU Ming, POULIKAKOS D. Si/Ge superlattice nanowires with ultralow thermal conductivity[J]. *Nano Letters*, 2012, 12(11): 5487–5494.
- [211] MU X, ZHANG Teng, GO D B, et al. Coherent and incoherent phonon thermal transport in isotopically modified graphene superlattices[J]. *Carbon*, 2015, 83: 208–216.
- [212] CHEN Xunkun, XIE Zhongxiang, ZHOU Wuxing, et al. Phonon wave interference in graphene and boron nitride superlattice [J]. *Applied Physics Letters*, 2016, 109(2): 023101.
- [213] YANG B, CHEN G. Partially coherent phonon heat conduction in superlattices [J]. *Physical Review B*, 2003, 67(19): 195311.
- [214] YE E, MINNICH A J. Ab initio based investigation of thermal transport in superlattices using the Boltzmann equation: Assessing the role of phonon coherence[J]. *Journal of Applied Physics*, 2019, 125(5): 055107.
- [215] DALY B C, MARIS H J, IMAMURA K, et al. Molecular dynamics calculation of the thermal conductivity of superlattices [J]. *Phys Rev B*, 2002, 66(2): 024301.
- [216] IMAMURA K, TANAKA Y, NISHIGUCHI N, et al. Lattice thermal conductivity in superlattices: molecular dynamics calculations with a heat reservoir method [J]. *J Phys Condens Matter*, 2003, 15(50): 8679.
- [217] CHEN J, ZHANG G, LI B. Tunable thermal conductivity of Si<sub>1-x</sub>Ge<sub>x</sub> nanowires [J]. *Appl Phys Lett*, 2009, 95(7): 073117.
- [218] TERMENTZIDIS K, MERABIA S, CHANTRENNE P, et al. Cross-plane thermal conductivity of superlattices with rough

- interfaces using equilibrium and non-equilibrium molecular dynamics [J]. *Int J Heat Mass Transf*, 2011, 54(9): 2014–2020.
- [219] TERMENTZIDIS K, CHANTRENNE P, KEBLINSKI P. Nonequilibrium molecular dynamics simulation of the in-plane thermal conductivity of superlattices with rough interfaces [J]. *Phys Rev B*, 2009, 79(21): 214307.
- [220] JI P, ZHANG Y, YANG M. Structural, dynamic, and vibrational properties during heat transfer in Si/Ge superlattices: A Car-Parrinello molecular dynamics study [J]. *J Appl Phys*, 2013, 114(23): 234905.
- [221] ROY CHOWDHURY P, SHI J, FENG T, et al. Prediction of Bi<sub>2</sub>Te<sub>3</sub>-Sb<sub>2</sub>Te<sub>3</sub> Interfacial Conductance and Superlattice Thermal Conductivity Using Molecular Dynamics Simulations [J]. *ACS Appl Mater Interfaces*, 2021, 13(3): 4636–4642.
- [222] ZHU T, ERTEKIN E. Phonon transport on two-dimensional graphene/boron nitride superlattices [J]. *Phys Rev B*, 2014, 90(19): 195209.
- [223] DA SILVA C, SAIZ F, ROMERO D A, et al. Coherent phonon transport in short-period two-dimensional superlattices of graphene and boron nitride [J]. *Phys Rev B*, 2016, 93(12): 125427.
- [224] FELIX I M, PEREIRA L F C. Thermal Conductivity of Graphene-hBN Superlattice Ribbons [J]. *Scientific Reports*, 2018, 8(1): 2737.
- [225] SHIOMI J, MARUYAMA S. Heat conduction of single-walled carbon nanotube isotope superlattice structures: A molecular dynamics study [J]. *Phys Rev B*, 2006, 74(15): 155401.
- [226] CHEN Y, LI D, YANG J, et al. Molecular dynamics study of the lattice thermal conductivity of Kr/Ar superlattice nanowires [J]. *Physica B: Condensed Matter*, 2004, 349(1): 270–280.
- [227] WANG X, WANG M, HONG Y, et al. Coherent and incoherent phonon transport in a graphene and nitrogenated holey graphene superlattice [J]. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 2017, 19(35): 24240–24248.
- [228] LI Q, YE W. An interfering Monte Carlo method for partially coherent phonon transport in superlattices [J]. *Int J Heat Mass Transf*, 2017, 107: 534–543.
- [229] LATOUR B, VOLZ S, CHALOPIN Y. Microscopic description of thermal-phonon coherence: From coherent transport to diffuse interface scattering in superlattices [J]. *Phys Rev B*, 2014, 90(1): 014307.
- [230] WANG Y, HUANG H, RUAN X. Decomposition of coherent and incoherent phonon conduction in superlattices and random multilayers [J]. *Phys Rev B*, 2014, 90(16): 165406.
- [231] VOLZ S, SAULNIER J B, CHEN G, et al. Computation of thermal conductivity of Si/Ge superlattices by molecular dynamics techniques [J]. *Microelectron J*, 2000, 31(9): 815–819.
- [232] XIE G, JU Z, ZHOU K, et al. Ultra-low thermal conductivity of two-dimensional phononic crystals in the incoherent regime [J]. *npj Comput Mater*, 2018, 4(1): 21.
- [233] GUO Y, ZHANG Z, BESCOND M, et al. Anharmonic phonon-phonon scattering at the interface between two solids by nonequilibrium Green's function formalism [J]. *Phys Rev B*, 2021, 103(17): 174306.
- [234] WOLF E. New theory of partial coherence in the space - frequency domain. Part I: spectra and cross spectra of steady-state sources [J]. *J Opt Soc Am*, 1982, 72(3): 343–351.
- [235] WOLF E. New theory of partial coherence in the space-frequency domain. Part II: Steady-state fields and higher-order correlations [J]. *Journal of the Optical Society of America A*, 1986, 3(1): 76–85.
- [236] CARMINATI R, GREFFET J-J. Near-Field Effects in Spatial Coherence of Thermal Sources [J]. *Phys Rev Lett*, 1999, 82(8): 1660–1663.
- [237] TERVO J, SETÄLÄ T, FRIBERG A T. Theory of partially coherent electromagnetic fields in the space - frequency domain [J]. *Journal of the Optical Society of America A*, 2004, 21(11): 2205–2215.
- [238] SINGER A, VARTANYANTS I A, KUHLMANN M, et al. Transverse-Coherence Properties of the Free-Electron-Laser FLASH at DESY [J]. *Phys Rev Lett*, 2008, 101(25): 254801.
- [239] SONJA F-A, GUILLAUME H, STEPHEN M B. Measures of coherence for trapped matter waves [J]. *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, 2001, 34(5): 945.
- [240] STEPHEN M B, SONJA F-A, AIDAN S A, et al. Coherence length for a trapped Bose gas [J]. *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, 2000, 33(19): 4177.
- [241] BEZETT A, TOTH E, BLAKIE P B. Two-point correlations of a trapped interacting Bose gas at finite temperature [J]. *Phys Rev A*, 2008, 77(2): 023602.

- [ 242 ] MANDEL L, WOLF E. *Optical Coherence and Quantum Optics*, F, 1995 [ C ]. Cambridge University Press.
- [ 243 ] LIAO Y, SHIGA T, KASHIWAGI M, et al. Akhiezer mechanism limits coherent heat conduction in phononic crystals [ J ]. *Phys Rev B*, 2018, 98(13): 134307.
- [ 244 ] WAGNER M R, GRACZYKOWSKI B, REPARAZ J S, et al. Two-Dimensional Phononic Crystals; Disorder Matters [ J ]. *Nano Lett*, 2016, 16(9): 5661–5668.
- [ 245 ] ZHANG Z, GUO Y, BESCOND M, et al. Generalized decay law for particlelike and wavelike thermal phonons [ J ]. *Phys Rev B*, 2021, 103(18): 184307.

## Physics and Modeling of Phonon Wave Behaviors in Nanoscale Heat Conduction

LIU Bin, HUANG Yunfan, WANG Moran

(*Department of Engineering Mechanics, Tsinghua University, Beijing 100084, China*)

**Abstract:** Nanoscale heat conduction has attracted considerable attention due to the unique transport behaviors exhibited by its intrinsic heat-carrying phonons, as well as its significant potential in addressing thermal management issues in electronic devices and enhancing thermoelectric conversion efficiency. This paper reviews the research progress in nanoscale heat conduction theory and simulations over the past three decades. It particularly introduces and discusses methods based on both wave and particle perspectives, focusing on nanoscale coherent thermal conduction mechanisms. Finally, the paper analyzes the challenges facing the field of nanoscale heat conduction research and outlines potential future directions, aiming to deepen the understanding of the wave-particle duality of heat-carrying phonons and promote their application in critical areas.

**Key words:** nanoscale heat conduction; coherent heat conduction; phonon thermal transport; wave effects