

专题: 热传导及其相关交叉领域研究

复杂结构半导体材料热输运理论方法进展与展望*

杨进¹⁾²⁾ 赵若琳³⁾ ONG Wee-Liat³⁾⁴⁾ 皮孝东¹⁾²⁾⁵⁾杨德仁¹⁾²⁾⁵⁾ 邓天琪^{1)2)†}

1) (浙江大学材料科学与工程学院, 硅及先进半导体材料全国重点实验室, 杭州 310027)

2) (浙江大学杭州国际科创中心, 先进半导体研究院, 杭州 311215)

3) (浙江大学 ZJU-UIUC 联合学院能源工程学院, 海宁 314400)

4) (浙江大学能源高效清洁利用全国重点实验室, 杭州 310027)

5) (浙江大学上虞半导体材料研究中心, 绍兴 212399)

(2025 年 12 月 24 日收到; 2026 年 2 月 4 日收到修改稿)

半导体是现代电子工业的基石材料, 其热输运性能直接影响器件效率与可靠性. 相较于半导体电学性质研究的深入, 其热输运机理研究相对滞后, 传统理论在处理强非简谐与无序体系时面临挑战. 深入理解半导体热输运机理, 不仅对高性能热管理材料设计至关重要, 也对开发新型能量转换材料具有指导意义. 本文系统回顾了新型声子输运理论与机器学习势函数的发展历程, 重点综述了基于统一输运理论以及机器学习分子动力学模拟的强非简谐晶体、无序等复杂半导体体系热输运性质的研究, 并对未来理论发展方向进行了展望.

关键词: 热传导, 声子输运, 机器学习势函数, 分子动力学模拟**DOI:** 10.7498/aps.75.20251752**CSTR:** 32037.14.aps.75.20251752

1 引言

半导体材料在能源转换领域 (如热电材料^[1-3]和太阳能电池^[4]) 以及微电子领域 (如集成电路^[5]) 占据不可替代的地位. 尽管器件的电学特性直接决定其性能, 但其性能极限与可靠性归根结底受限于内部的热输运效率, 这在半导体材料中主要由晶格 (声子) 导热决定. 在能源转换领域, 热输运性质的精准调控是提升能量转换效率的核心. 例如, 热电器件需要低热导率的热电半导体材料以实现高效的热能-电能转换^[1-3]; 光伏器件中载流子通过非辐射复合释放能量, 激发晶格振动并产生焦耳热导致的热量累积会显著降低光电转换效率^[4]. 另一方面,

电子器件微型化与集成化趋势使得热流密度呈指数级增长, 三维堆叠芯片的热点温度每升高 10 °C, 其可靠性将下降 50%, 而 5G 基站的高频功率器件散热需求已超过传统热管理技术的极限^[5].

理解并调控材料体系的热输运性质对提升器件性能至关重要, 而理论计算在这一领域正发挥着不可替代的作用. 从第一性原理到机器学习势函数 (machine-learning potential, MLP), 从声子玻尔兹曼输运方程 (Boltzmann transport equation, BTE) 求解到分子动力学模拟 (molecular dynamics, MD), 理论方法为揭示热输运的微观机制提供了原子级精度的洞察力^[6-12]. 例如, Li 等^[13]采用 MLP 结合声子 BTE 方法系统性探究了几类窄带隙半导体的热输运性质, 阐明了高阶声子散射对热导率的

* 国家自然科学基金 (批准号: 62204218, 62574179)、杭州市领军型创新团队 (批准号: TD2022012) 和浙江省自然科学基金 (批准号: LJSZ26A040002) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: dengtq@zju.edu.cn

影响规律; Han 等^[14]发现在重带 NbFeSb 体系中仅通过 10% 的异价 Hf 掺杂, 可以实现 65% 的晶格热导率降低, 比 4 倍浓度的等电子 Ta 合金化更有效, 并基于第一性原理计算揭示了其机理; Pan 等^[15]通过声子 BTE 方法和双温度模型验证了声子靶向激发对六方 BN 热导率的显著调控作用, 为材料热管理提供了新的解决方案^[16]. 这些理论进展不仅加速了新型半导体材料体系的发现, 更通过建立“结构-声子输运-宏观热导率”的定量关联, 为热输运调控提供了普适性设计框架.

当前的研究焦点已从硅和锗等简单晶体, 扩展至具有复杂结构的新体系, 例如具有动态无序的强非简谐性晶体、离子液体等复杂晶胞材料, 以及具有静态无序的无定形和合金等材料体系. 随着对此类材料热输运性质更深入的研究, 声子输运理论也迎来了进一步发展. 2018 年, Mukhopadhyay 等^[17]在热电材料 Ti_3VSe_4 中发现, 由第一性原理声子 BTE 方法预测的室温热导率 ($0.16 \text{ W}/(\text{m}\cdot\text{K})$) 仅为

实验值 ($0.30 \text{ W}/(\text{m}\cdot\text{K})$) 的 1/2 左右 (见图 1(a)). 该差异意味着基于声子气体模型的声子 BTE 无法准确解析此类具有复杂晶体结构的强非简谐材料的热输运性质, 因此, 其在声子 BTE 的基础上引入了类似于无定形材料中热量随机行走方式的另一种非声子导热通道. Luo 等^[18]通过将声子区分为常规声子与扩散声子, 分别采用声子 BTE 与用于计算无定形材料扩散子的 AF (Allen-Feldman) 公式对其热导率进行计算 (见图 1(b)). 尽管理论值与实验值吻合良好, 但是上述方法依赖于两种独立理论框架的经验性结合, 缺乏第一性原理预测能力. 2019 年, Isaeva 等^[19]基于格林-久保线性响应理论提出了准简谐格林-久保 (quasi-harmonic Green-Kubo, QHGK) 理论, 并将其应用于无定形硅 (a-Si) 热输运性质的计算与分析 (见图 1(c)). 同年, Simoncelli 等^[20,21]从量子输运理论出发, 提出声子 Wigner 输运方程 (Wigner transport equation, WTE), 成功解释了无机钙钛矿 CsPbBr_3 热导率

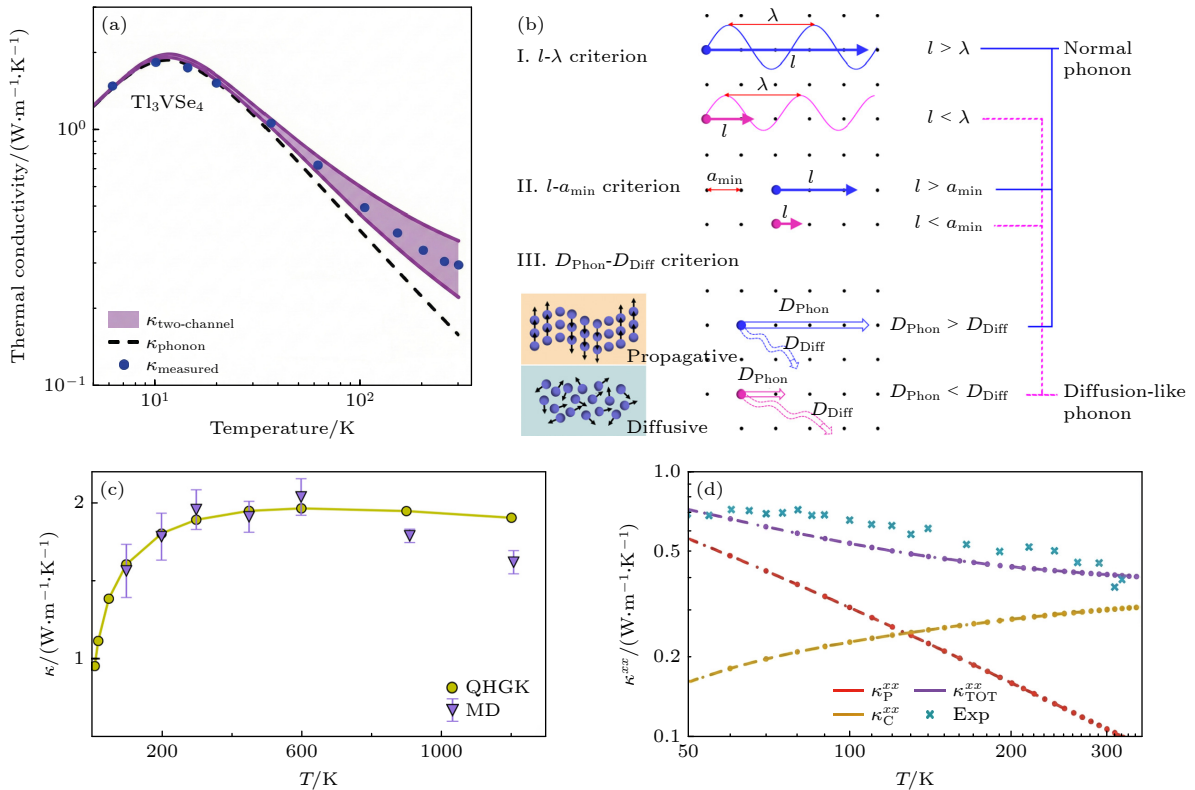


图 1 几类新型声子输运理论 (a) Ti_3VSe_4 的双通道热导率与实验值的对比^[17]; (b) 常规声子与扩散声子的分类^[18]; (c) 无定形硅的 QHGK 热导率与 MD 热导率的对比^[19]; (d) CsPbBr_3 的 WTE 热导率 (κ_P , κ_C 和 κ_{TOT} 分别表示粒子性热导率、波动性热导率和总热导率) 与实验值的对比^[20]

Fig. 1. Several types of novel phonon transport theories: (a) Comparison of the dual-channel thermal conductivity of Ti_3VSe_4 with experimental values^[17]; (b) classification of normal phonons and diffusion-like phonons^[18]; (c) comparison of the QHGK thermal conductivity and MD thermal conductivity for amorphous silicon^[19]; (d) comparison of the WTE thermal conductivity of CsPbBr_3 with experimental values (κ_P , κ_C , and κ_{TOT} represent the particle-like, wave-like, and total thermal conductivity, respectively)^[20].

的弱温度依赖性 (见图 1(d)). 这两种理论在形式上仅存在细微区别, 且实际计算结果的差异也可忽略不计, 因此, 统称为统一输运理论^[22,23]. 统一输运理论的优越性体现在: 从一致的理论框架出发, 兼顾声子的波粒二象性输运行为, 既能捕捉体系的非简谐作用, 又能考虑结构无序性的影响. 当体系为非简谐简单晶体时, 其退化为声子 BTE, 声子粒子性主导热输运; 而当体系简谐但高度无序时, 其还原为 AF 公式, 传热由声子波动性输运主导. 统一输运理论的诞生为简单晶体、复杂晶体和无序材料的热导率计算提供了普适性框架, 标志着声子 BTE 方法向更高阶理论的跨越.

在研究复杂结构半导体材料热输运性质时, MD 模拟因其简便高效也成为常用工具. 其中, 3 种主流方法分别为: 基于傅里叶定律的非平衡法 (nonequilibrium MD, NEMD); 基于格林-久保理论的平衡法 (equilibrium MD, EMD); 均质非平衡法 (homogeneous nonequilibrium MD, HNEMD)^[8,24]. 然而, 传统经验势通常依赖于固定的函数形式和有限的参数, 难以同时兼顾高精度、计算效率与通用性. 随着机器学习技术的发展, 研究者开始尝试以数据驱动的方式直接从高精度量子力学数据中学习势能面, 从而提出了 MLP 的概念. 早在 1995 年已有将神经网络用于小分子势能面拟合的探索性工作^[25]. 2007 年, Behler 等^[26] 采用神经网络方法描述高维势能面, 通过将体系总能量表示为原子局域能量之和, 并利用对称函数作为输入描述符, 从而确保模型满足平移、旋转与置换不变性. 早期代表性工作还包括由 Bartók 等^[27] 于 2010 年提出的高斯近似势 (Gaussian approximation potential, GAP) 和由 Shapeev 等^[28] 于 2016 年提出的矩张量势 (moment tensor potential, MTP). 2018 年, Zhang 等^[29] 提出了深度势 (deep potential, DP) 框架, 利用深度神经网络直接建立结构到能量的非线性映射, 既保持了平移、旋转与置换对称性, 又具备出色的可扩展性, 能够在百万原子级体系中实现接近密度泛函理论 (density functional theory, DFT) 精度的 MD 模拟. 2021 年, Fan 等^[30] 提出了基于全局搜索神经网络的神经演化势函数 (neuroevolution potential, NEP). 在对 Si, Silicene 和 PbTe 的机器学习分子动力学 (MLMD) 模拟速度测试上, 该方法领先于先前发布的 MLPs (即 GAP, MTP 和 DP) 数个数量级. 此外, NEP 包含原子热流信息,

这为高效准确地模拟强非简谐材料或无序材料的热输运行为铺平了道路. 另一类基于等变图神经网络 (equivariant graph neural networks, EGNNs) 的机器学习势函数也逐渐兴起. 代表性方法包括 Batzner 等^[31] 于 2022 年提出的神经等变原子间势函数 (neural equivariant interatomic potential, NequIP) 和 Batatia 等^[32] 同年提出的消息传递原子簇展开 (message passing atomic cluster expansion, MACE). 这类方法在网络结构层面显式引入欧几里得群 $E(3)$ 对称性, 使得模型在输入结构发生旋转或反演时, 其输出的能量保持不变, 而力等矢量物理量则满足严格的等变变换关系, 因此具备更高的精度. 相比于传统的经验势 MD 模拟与第一性原理 MD 模拟, MLMD 模拟在保持高精度的同时具备极高的计算效率. 在 GPU 加速软件中, MLMD 可实现每秒单显卡数百万原子步的计算速度^[33,34], 使百万原子级别的长时间模拟成为可能, 因此正逐步成为研究复杂材料热传导、化学反应和相变过程的核心工具. 同时, MLP 不仅可用于 MD 模拟, 也可用于加速声子输运方程方法中的力常数计算^[13].

本文将介绍这两种理论方法在复杂结构半导体材料热输运领域的研究进展和最新成果, 并展望未来研究方向.

2 复杂半导体材料热输运性质的理论计算方法

2.1 统一输运理论

鉴于声子 WTE 与 QHGK 理论几乎一致^[22,23], 本文以声子 WTE 为例对统一输运理论的重要公式和物理意义展开介绍. 声子 WTE 的表达式一般写作^[20,21]:

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} n(\mathbf{R}, \mathbf{q}, t)_{s,s'} + i[\omega(\mathbf{q})_s n(\mathbf{R}, \mathbf{q}, t)_{s,s'} \\ & - n(\mathbf{R}, \mathbf{q}, t)_{s,s'} \omega(\mathbf{q})_{s'}] \\ & + \frac{1}{2} \sum_{s''} \mathbf{v}(\mathbf{q})_{s,s''} \cdot \nabla_{\mathbf{R}} n(\mathbf{R}, \mathbf{q}, t)_{s'',s'} \\ & + \frac{1}{2} \sum_{s''} \nabla_{\mathbf{R}} n(\mathbf{R}, \mathbf{q}, t)_{s,s''} \cdot \mathbf{v}(\mathbf{q})_{s'',s'} \\ & = \left. \frac{\partial n(\mathbf{R}, \mathbf{q}, t)_{s,s'}}{\partial t} \right|_{\text{col}}, \end{aligned} \quad (1)$$

其中 \mathbf{R} 为位置坐标, t 为时间, \mathbf{q} 为波矢, s, s' 与 s'' 代表不同的声子模式, $n(\mathbf{R}, \mathbf{q}, t)_{s,s'}$ 为非平衡 Wigner 分布函数矩阵, $\omega(\mathbf{q})_s$ 为声子频率, $\mathbf{v}(\mathbf{q})_{s,s'}$ 为声子群速度矩阵. 声子 WTE 对应的总热导率表达式为

$$\begin{aligned} \kappa_T^{\alpha,\beta} = & \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{q},s,s'} \frac{\omega(\mathbf{q})_s + \omega(\mathbf{q})_{s'}}{4} \left[\frac{C(\mathbf{q})_s}{\omega(\mathbf{q})_s} + \frac{C(\mathbf{q})_{s'}}{\omega(\mathbf{q})_{s'}} \right] \\ & \times \frac{[\Gamma(\mathbf{q})_s + \Gamma(\mathbf{q})_{s'}]/2}{[\omega(\mathbf{q})_s - \omega(\mathbf{q})_{s'}] + [\Gamma(\mathbf{q})_s + \Gamma(\mathbf{q})_{s'}]^2/4} \\ & \times v^\alpha(\mathbf{q})_{s,s'} v^\beta(\mathbf{q})_{s',s}, \end{aligned} \quad (2)$$

其中 V 为系统体积, $C(\mathbf{q})_s$ 为声子热容, $\Gamma(\mathbf{q})_s$ 为声子线宽 (即声子寿命的倒数), α 和 β 表示方向. (1) 式与 (2) 式的对角项 ($s = s'$) 代表带内声子粒子性运输的导热贡献, 通常称为 Peierls-Boltzmann 项; 而其非对角项 ($s \neq s'$) 则描述带间声子波动性的能量输运行为, 通常称为相干 (coherent) 项. 当仅考虑其对角项时, (1) 式与 (2) 式分别简化为声子 BTE 与其对应热导率:

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} n(\mathbf{R}, \mathbf{q}, t)_s + \mathbf{v}(\mathbf{q})_s \cdot \nabla_{\mathbf{R}} n(\mathbf{R}, \mathbf{q}, t)_s \\ & = \left. \frac{\partial n(\mathbf{R}, \mathbf{q}, t)_s}{\partial t} \right|_{\text{col}}, \end{aligned} \quad (3)$$

$$\kappa_P^{\alpha,\beta} = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{q},s} C(\mathbf{q})_s v^\alpha(\mathbf{q})_{s,s} v^\beta(\mathbf{q})_{s',s} \Gamma(\mathbf{q})_s. \quad (4)$$

声子粒子性与波动性的能量运输机理如图 2 所示. 当具有同一波矢的不同声子模式之间不存在线宽

重叠时, 各声子模式均可看作声子波包, 如同经典气体粒子一样以各自群速度在空间中传播; 而当不同声子模式之间的频率差较小且各自线宽较大时, 线宽重叠情况出现, 此时不同声子模式之间的能量可通过波动隧穿效应传递. 值得注意的是, 本文关于声子运输的全部讨论均建立于声子定义良好的基础上, 即声子处于非过阻尼状态 (满足 Ioffe-Regel 时间极限要求, 即 $\Gamma(\mathbf{q})_s > \omega(\mathbf{q})_s$), 此时声子的谱函数可以用洛伦兹函数近似; 而当不满足上述条件时, 声子不再被视为准粒子, 其性质描述需采用更为精确的全声子谱函数 [22], 这超出了本文中声子运输理论的研究范畴, 因此不予展开讨论. 然而, 采用 MD 模拟直接求解体系热导率时不依赖于声子的良好定义, 因此不受此限制影响.

2.2 机器学习分子动力学模拟

利用 MLMD 模拟求解晶格热导率的方法与传统的 MD 模拟一致, 一般有 NEMD, EMD 与 HNEMD 方法, 其热导率计算公式如 (5) 式—(7) 式 [8,24]. NEMD 基于傅里叶定律:

$$\kappa = -\frac{J}{\nabla T}, \quad (5)$$

其中, J 和 ∇T 分别为系统处于非平衡稳态时沿输运方向的热流与温度梯度; EMD 基于线性响应的格林-久保方程:

$$\kappa^{\alpha,\beta} = \frac{1}{k_B T^2 V} \int_0^\infty \langle J^\alpha(0) J^\beta(t) \rangle dt, \quad (6)$$

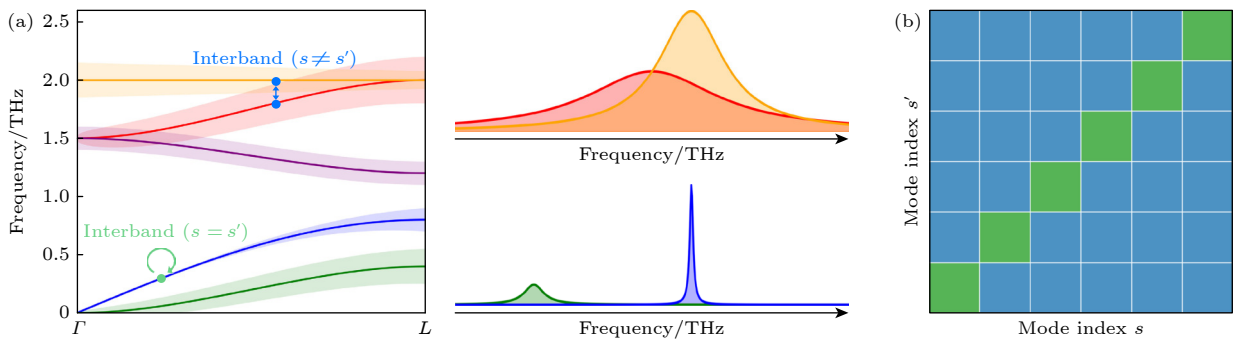


图 2 声子粒子性 (带内, 对角项, $s = s'$) 与波动性 (带间, 非对角项, $s \neq s'$) 运输机理示意 (a) 左图中实线为声子色散关系曲线, 阴影区域为声子线宽, 不同颜色代表不同声子支; 右图对应于左图粒子性与波动性运输过程中不同声子模式的谱函数形状以及两者的重叠状态; (b) 声子热导率矩阵中对角项 (绿色方格) 与非对角项 (蓝色方格) 分别源于声子粒子性运输与波动性运输的贡献
Fig. 2. Schematic of the phonon transport mechanisms: particle-like (intra-band, diagonal term, $s = s'$) and wave-like (inter-band, off-diagonal term, $s \neq s'$): (a) The solid curves represent the phonon dispersion relations, with the shaded areas indicating the phonon linewidths; different colors correspond to different phonon branches (left panel); the spectral function profiles for different phonon modes and their overlap, corresponding to the particle-like and wave-like transport processes illustrated in the left panel (right panel); (b) the contributions to the phonon thermal conductivity matrix from the diagonal terms (green squares, originating from particle-like transport) and the off-diagonal terms (blue squares, originating from wave-like transport).

其中 J^α 为沿 α 方向上的热流, k_B 为玻尔兹曼常数, T 为系统温度, 此时系统处于平衡态; HNEMD 形式类似于傅里叶定律:

$$\kappa = \frac{\langle J \rangle_{ne}}{TVF_e}, \quad (7)$$

其中, $\langle J \rangle_{ne}$ 为非平衡态下的平均热流, F_e 为驱动力. HNEMD 的核心思想为通过向系统施加一个不足以产生温度梯度的微小驱动力从而使系统处于非平衡但均质的状态. 相比于 EMD 方法, HNEMD 方法显著增强了数值稳定性, 极大提升了计算效率^[24].

MLP 的基本思想是将复杂体系的总能量表示为所有原子局域环境能量的总和. 每个原子的能量由周围原子在一定截断半径内的空间分布决定. 这种对原子能量的分解保证了模型可以扩展到任意规模的体系, 同时满足能量可加性和可微性.

为了让机器学习模型能够识别这种局域环境, 必须先将原子结构转换成一组数值化特征, 这些特征称为“描述符”. 描述符的选择决定了模型是否能正确反映物理规律. 它们需具备平移、旋转不变/等变性与原子交换不变性等特点^[35]. 选择描述符前, 首先要明确体系的物理特征. 如果体系的相互作用主要是局域性的, 例如共价键主导的半导体或金属材料, 可以采用局域描述符, 如原子对称函数 (atom-centered symmetry function, ACSF)^[36] 和平滑原子位置重叠 (smooth overlap of atomic positions, SOAP)^[35] 或基于正交多项式的 Chebyshev 描述符^[30]. 而对于存在显著长程相互作用的体系 (如离子晶体、极性材料或范德瓦耳斯分子晶体), 一种做法是通过增大截断半径或引入消息传递等模型架构, 以扩大模型的有效相互作用范围, 从而隐式地刻画长程作用^[31,32]; 另一种做法是显式地将相互作用分解为短程项与长程项, 其中短程部分由机器学习模型描述, 而长程部分采用解析形式处理, 例如基于预测的原子电荷或者隐变量并结合 Ewald 求和来描述静电相互作用^[6,37]. 在众多局域描述符中, ACSF 形式简单, 参数物理意义清晰, 适合元素较少、结构较规则的体系^[36]; SOAP 描述符基于球谐展开与高斯平滑的邻域密度, 具有系统性强和可控收敛的优点, 常用于高精度小体系研究^[35]; 而 NEP 势中使用的 Chebyshev 多项式描述符则以正交多项式展开径向与角度分布, 形式封闭、计算效率极高, 非常适合在 GPU 平台上进行大体系 MD 模拟^[30]. 值得指出的是, 近年来发展的 EGNNs 在

网络结构中隐式学习局域描述符, 从而在一定程度上弱化了对人工设计描述符的依赖. 如 NequIP 和 MACE 采用嵌入神经网络内部的等变几何表示来代替显式描述符, 从而直接在架构层面强制执行物理对称性^[31,32].

在模型选择方面, 机器学习势主要分为 3 类: 基于核函数的方法 (如 GAP)、基于线性回归的方法 (如 MTP) 和基于神经网络的方法 (如 DP, NEP, NequIP 和 MACE)^[6]. 核方法通过计算不同原子环境之间的相似度来拟合能量分布, 具有解析求解和物理解释性强的优点, 但在大数据集上效率较低. 基于线性回归的方法通过预设一组基函数 (如多项式) 对原子环境进行描述, 并采用线性最小二乘进行拟合. 其在训练效率上通常高于核方法, 且能保持较好的可解释性, 但模型的表达能力受限于预设的基函数形式, 在处理高度复杂或非局域的原子相互作用时可能灵活性不足. 神经网络方法则以非线性映射的形式直接学习结构与能量的关系, 具有更强的灵活性与可扩展性, 它们的训练复杂度与样本量线性相关, 推理速度与数据量无关, 能充分利用 GPU 并行加速. 总体而言, 小样本问题且需强解释性时, 核函数方法较为适用; 对于中等规模数据或需平衡效率与表达能力的场景, 线性回归方法是一种实用选择; 而在大数据场景且追求高精度与泛化能力时, 则更推荐神经网络模型^[6].

模型训练的目标是让机器学习势在最小化能量与力的误差同时保持物理稳定. 训练过程通常使用包含数千至上万结构的 DFT 数据集, 覆盖目标温度、应变、缺陷、相变等关键构型. 数据的多样性直接决定了模型的转移性, 即其能否在未见过的结构或条件下仍然保持准确. 无论采用何种模型, 训练过程的核心目标都是最小化能量与力之间的综合误差. 常用的损失函数包括能量项 L_e 、力项 L_f 和应力项 L_v 的加权平均形式^[30]:

$$L(z) = \lambda_e L_e(z) + \lambda_f L_f(z) + \lambda_v L_v(z) + \lambda_1 L_1(z) + \lambda_2 L_2(z), \quad (8)$$

其中, λ 为权重系数. 为了防止过拟合, 训练时往往会加入 L_1 和 L_2 正则化项抑制权重发散, 提升平滑性与泛化能力. 机器学习势的性能评估通常通过在独立于训练过程的数据集 (测试集) 上进行, 以估计模型在未见过数据上的表现, 从而反映其泛化能力. 常用的性能度量包括平均绝对误差 (mean

absolute error, MAE) 和均方根误差 (root mean squared error, RMSE), 它们能够定量反映模型在能量、力等物理量预测上的总体偏差^[6].

2.3 两种方法的对比

基于声子输运方程 (即声子 BTE 与统一输运理论) 的方法一般依赖于微扰近似 (即假设非简谐作用显著弱于简谐作用) 以获取声子的简谐性质与非简谐性质^[38,39]. 当所处理的体系具有强非简谐性时, 该近似可能会失效, 因此需要采取重整化声子理论^[40-46] 以引入温度效应从而规避直接计算带来的错误结果, 此外, 强非简谐体系的高阶声子散射可能无法忽略^[47,48], 这导致采取声子输运方程方法研究此类体系过程复杂且计算量庞大. MLMD 模拟则在具有媲美 DFT 准确性的同时简单地考虑温度对热输运的影响, 且能够处理全部高阶非简谐作用. 另一方面, 在针对无序体系热输运性质的求解上, 由于结构平移对称性的缺乏, 材料原胞难以定义, 这阻碍了声子输运方程方法的应用, 而 MD 模拟不受此限制. 尽管 MLMD 模拟简便、准确且高效, 但也存在如下限制: 首先, 仅依靠 MD 模拟难以直接解析声子性质, 因此其也常与晶格动力学理论结合以提供振动模式层面上的深入分析, 如格林-久保模式分析 (Green-Kubo modal analysis, GKMA) 法^[49]、时域热流直接分解法 (time domain direct decomposition method, TDDDM)^[50] 和简正模分解 (normal mode decomposition, NMD) 法^[51-53]. 此外, MD 模拟通常基于牛顿经典力学, 其振动模式分布服从经典统计而非玻色-爱因斯坦统计^[54], 且未涵盖原子核量子效应, 这导致在部分情况 (如低温、包含轻质元素) 下的预测值与实验值存在显著偏差, 且目前学者尚未就适用于 MD 模拟的量子校正方法达成共识^[54,55]. 综上所述, 这两种方法均存在各自的优势与局限性, 因此受到了学者的同等关注.

3 几类复杂半导体材料热输运研究进展

3.1 强非简谐晶体

3.1.1 无机半导体

强非简谐无机半导体材料因其低热导率特征在热电领域应用广泛, 其热输运性质也备受研究关

注. 2020 年, Xia 等^[56] 重新审视了 Tl_3VSe_4 材料理论值与实验值的差异, 他们进一步考虑了声子非简谐重整化和四声子散射, 如图 3(a) 所示, 在 300 K 温度下, 声子粒子性热导率为 $0.29 \text{ W}/(\text{m}\cdot\text{K})$, 与实验值 ($(0.30\pm 0.05) \text{ W}/(\text{m}\cdot\text{K})$) 十分接近, 而采用 WTE 计算的声子波动性热导率仅为 $0.08 \text{ W}/(\text{m}\cdot\text{K})$, 因此他们认为 Tl_3VSe_4 热导率理论值的低估源于 Mukhopadhyay 等对非简谐重整化作用的忽视, 并非来自与声子波动性输运类似的热量随机行走导热通道. 同年, Jain^[57] 提出 Xia 等^[56] 的工作中未考虑晶格热膨胀和力常数温度依赖性的影响, 致使声子色散中部分模式的频率出现过度硬化, 并进而导致粒子性热导率的高估. 如图 3(b) 所示, Jain^[57] 采用目前最先进的理论预测的 300 K 温度下 Tl_3VSe_4 粒子性热导率的值为 $0.08 \text{ W}/(\text{m}\cdot\text{K})$, 而波动性热导率为 $0.15 \text{ W}/(\text{m}\cdot\text{K})$, 占据主导地位, 从而明确了声子波动性输运在 Tl_3VSe_4 传热过程中的重要性. 2021 年, Zeng 等^[58] 基于第一性原理构建了针对 Tl_3VSe_4 的 GAP, 并采用正弦近平衡分子动力学模拟 (sinusoidal approach-to-equilibrium MD, SAEMD) 获得了 300 K 温度下 Tl_3VSe_4 的热导率, 为 $0.31 \text{ W}/(\text{m}\cdot\text{K})$, 与实验值极其吻合 (见图 3(c)). 此外, 他们通过对比基于 MD 求解的声子散射率与基于微扰论 (即三声子与四声子散射) 求解的声子散射率发现前者显著高于后者 (见图 3(d)), 他们因此得出结论, 在强非简谐晶体如 Tl_3VSe_4 和 $Cmcm\text{-SnSe}$ 中, 四声子散射仍不足以涵盖全部非简谐作用, 需要考虑更高阶声子散射过程. 在这种情况下, 本征囊括全部非简谐作用的 MD 模拟是分析材料热输运性质的最佳选择.

2022 年, Simoncelli 等^[21] 进一步发展了 WTE, 通过将 CsPbBr_3 和 $\text{La}_2\text{Zr}_2\text{O}_7$ 声子模式的热导率贡献区分为波动性和粒子性, 他们发现随着温度升高, 更多的声子模式由粒子性主导转变为波动性主导. 此外, 他们提出了用空间 Ioffe-Regel 极限区分声子模式的波粒主导性, 具体而言, 当位于 Ioffe-Regel 空间极限之上 (即声子平均自由程大于原子间距) 时, 声子模式主要参与粒子性输运; 而当位于极限之下 (即声子平均自由程小于原子间距) 时, 声子模式热输运由波动性主导; 极限附近的声子模式则通过两种输运方式传热. 此外, 他们发现材料的声子粒子性热导率随温度仍然呈现 T^{-1} 的趋势 (仅考虑三声子散射), 总热导率的弱温

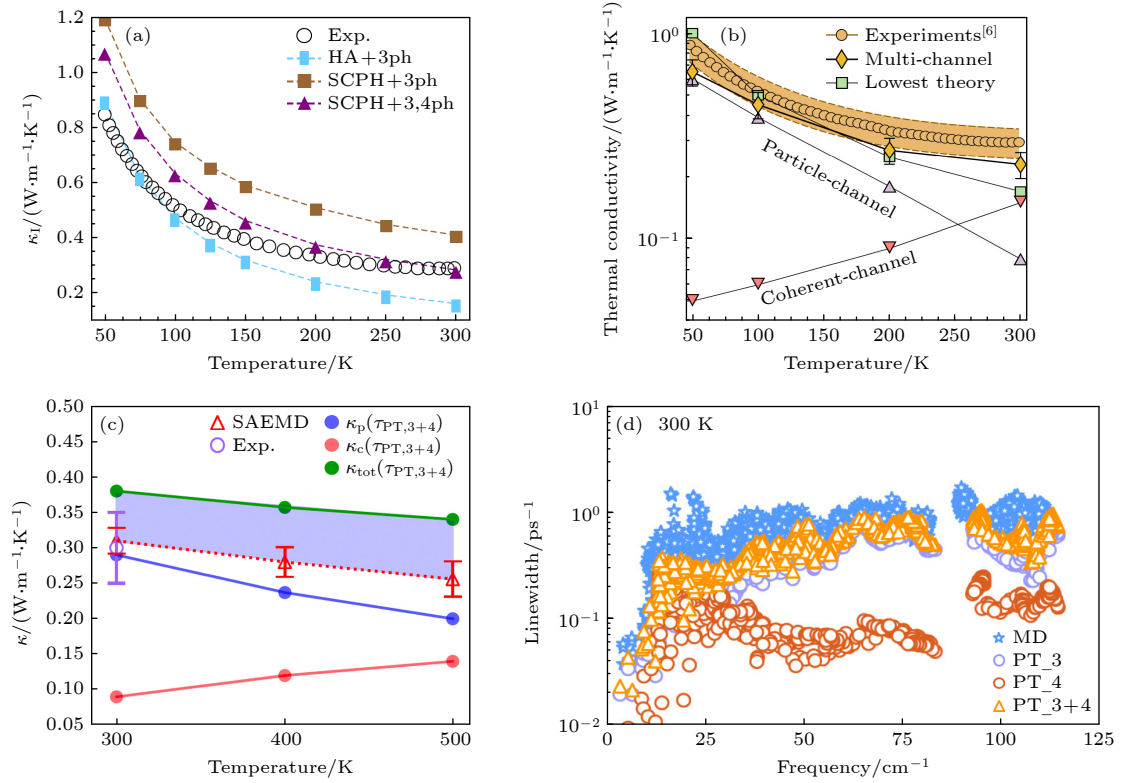


图 3 Tl_3VSe_4 的声子性质与热导率 (a) WTE 粒子性热导率与实验值的对比^[56], HA+3 ph 表示热导率计算采取简谐近似且仅考虑三声子散射, SCPH+3 ph(3, 4 ph) 表示热导率计算采用自洽声子理论且仅考虑三声子散射 (同时考虑三声子与四声子散射); (b) WTE 热导率与实验值的对比^[57], Lowest Theory 与图 (a) HA+3 ph 一致, Multi-channel 则在图 (a) SCPH+3, 4 ph 的基础上进一步考虑力常数温度依赖性与热膨胀效应; (c) MD 热导率、WTE 热导率与实验测量值的对比^[58]; (d) 300 K 温度下基于 MD 求解的声子散射率与基于微扰论 (即三声子与四声子散射) 求解的声子散射率的对比^[58]

Fig. 3. Phonon properties and thermal conductivity of Tl_3VSe_4 : (a) Comparison of the particle-like WTE thermal conductivity with experimental values^[56], “HA+3 ph” denotes calculations within the harmonic approximation considering only three-phonon scattering, while “SCPH+3 ph (3, 4 ph)” denotes calculations using the self-consistent phonon theory considering only three-phonon scattering (or both three- and four-phonon scattering); (b) comparison of the WTE thermal conductivity with experimental values^[57], “Lowest Theory” is consistent with “HA+3 ph” in panel (a), and “Multi-channel” further incorporates the temperature dependence of interatomic force constants and thermal expansion effects based on “SCPH+3, 4 ph” in panel (a); (c) comparison of the MD thermal conductivity, WTE thermal conductivity, and experimental measurements^[58]; (d) comparison between the phonon scattering rates obtained from MD simulations and those from perturbation theory (i.e., considering three- and four-phonon scattering) at 300 K^[58].

度依赖性则源于随温度上升而增大的声子波动性热导率. 近年来, 统一输运理论也被广泛应用于其他无机半导体材料, 如二维材料 KAg/CuSe ^[59]、硫属化物 $\text{BaAg}_2\text{SnSe}_4$ ^[60]、硫卤化物 CuBiSeCl_2 ^[61] 和笼状化合物 $\text{Ba}_8\text{Ga}_{16}\text{Sn}_{30}$ ^[62] 等以探究这些材料体系内的声子波动性输运行为, 并取得了重要的进展.

3.1.2 有机无机杂化半导体与有机半导体

作为有机无机杂化半导体的代表, 钙钛矿 MAPbI_3 被广泛应用于发光二极管^[63]、热电材料^[3] 和太阳能电池^[4] 等领域. Yang 等^[64-66] 系统性探究了 MAPbI_3 在不同外场包括温度、压力和电场下

的热输运性质. 相比于无机半导体材料, 该杂化晶体中有机分子 MA^+ 的运动方式除了常规的振动外还存在旋转等^[3], 导致其晶格动力学计算更加复杂. 传统的晶格动力学计算与声子的温度重整化计算依赖于特定温度下的系综平均结构 (即原子位于平均位置处)^[67], 而由于旋转运动的存在, MA^+ 分子中各原子的平均位置会坍塌至同一个中心点, 导致平均结构中的原子重叠. 为了处理该问题, 他们提出了一种基于动能耗散的超胞结构优化方法^[64], 由该方法得到的结构具有与实验样品相似的结构特征. 基于上述结构, 他们采用 WTE 计算了 MAPbI_3 的粒子性热导率与波动性热导率, 如图 4(a) 所示, 在 350 K 温度下 MAPbI_3 中仅有少量频率低于

1 THz 的声学声子参与粒子性输运, 而绝大多数光学声子则由波动性输运主导, 相应地, 其粒子性热导率仅为 $0.08 \text{ W}/(\text{m}\cdot\text{K})$, 而波动性热导率为 $0.25 \text{ W}/(\text{m}\cdot\text{K})$ ^[64]. 图 4(b) 表明当压力由 -0.8 GPa (负数代表拉伸) 增大至 2.0 GPa (正数代表压缩) 时, 粒子性热导率由 $0.03 \text{ W}/(\text{m}\cdot\text{K})$ 显著提升至 $0.12 \text{ W}/(\text{m}\cdot\text{K})$, 而波动性热导率几乎保持在 $0.30 \text{ W}/(\text{m}\cdot\text{K})$ 不变^[65], 这种不变性随后同样在 AgTlI_2 材料中观察到^[68]. 通过对比 MAPbI_3 与其他材料如 BAs , Si 和 MgO 等的热导率压力响应 (见图 4(c)), 他们发现 MAPbI_3 表现出反常的压力-热导率稳定性, 具体而言, 尽管 MAPbI_3 具有强非简谐性和低刚度, 但其总热导率在压力下的变化与弱非简谐和高刚度材料如 Si 一致, 这主要是因为其恒定且主导的声子波动性热导率有效抑制

了总热导率随压力升高而增大^[65]. 另一方面, 如图 4(d) 所示, 在 100 K 温度下随着电场由 $0.0 \text{ V}/\text{\AA}$ 增大至 $0.35 \text{ V}/\text{\AA}$, MAPbI_3 的粒子性热导率由 $1.23 \text{ W}/(\text{m}\cdot\text{K})$ 降低至 $0.58 \text{ W}/(\text{m}\cdot\text{K})$, 而波动性热导率在 $0.22 \text{ W}/(\text{m}\cdot\text{K})$ 附近波动, 同样表现出类似于压力下的稳定性^[66]. 上述结果表明传统的外场调控方法虽能显著改变声子的群速度与散射率, 但对波动性热导率的影响微乎其微, 因此综合调控声子粒子性热导率与波动性热导率对改善复杂结构半导体材料导热性能至关重要.

2025 年, Legenstein 等^[69] 结合密度泛函理论和主动学习训练了针对有机半导体晶体并苯的 MTP, 并计算了萘 (C_{10}H_8)、蒽 ($\text{C}_{14}\text{H}_{10}$)、并四苯 ($\text{C}_{18}\text{H}_{12}$) 和并五苯 ($\text{C}_{22}\text{H}_{14}$) 的声子性质与热导率. 结果表明, 与 MAPbI_3 类似, 萘和并五苯在 300 K 温度下波

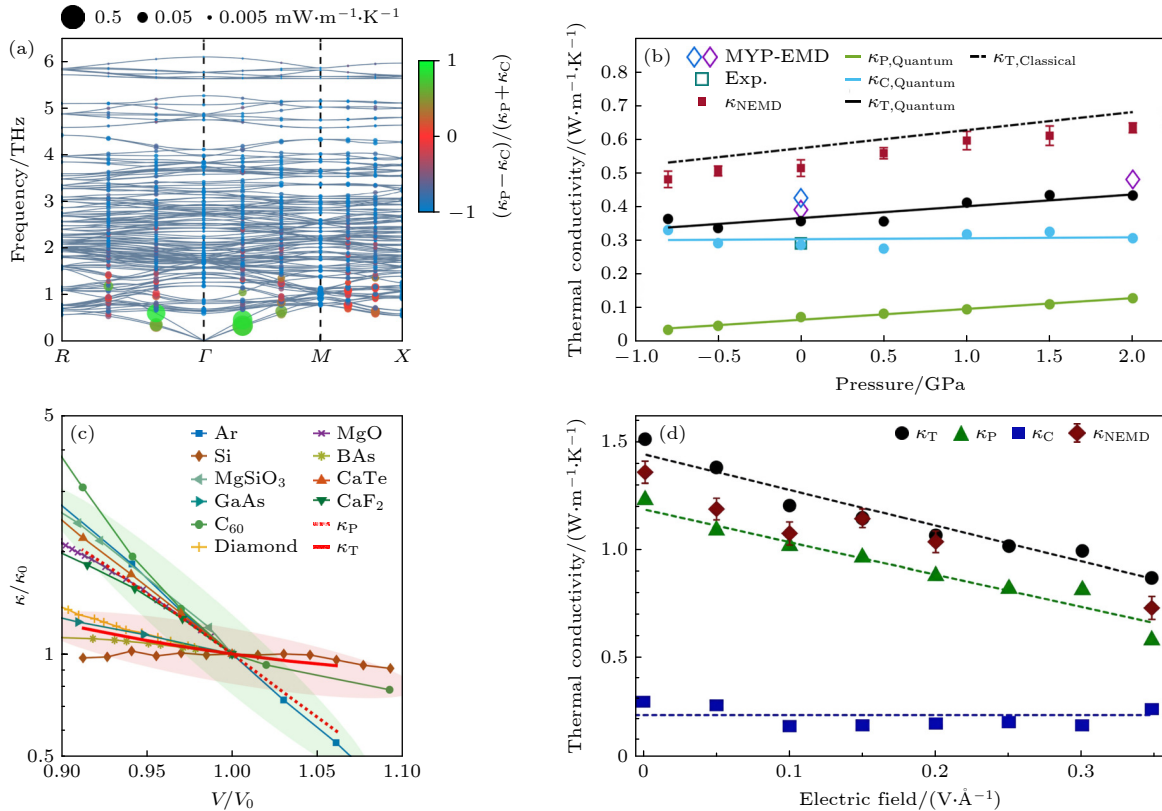


图 4 MAPbI_3 的声子性质与热导率 (a) 350 K 温度下的声子色散关系^[64], 圆圈代表声子模式, 其颜色代表粒子性热导率与波动性热导率的比例, 面积代表热导率的大小; (b) 350 K 不同压力下的 WTE 热导率与 NEMD 热导率^[65], MYP-EMD 代表 EMD 热导率, Exp 代表实验值; (c) MAPbI_3 与其他材料的归一化热导率与归一化体积变化曲线的对比^[65]; (d) 100 K 不同电场强度下的 WTE 热导率与 NEMD 热导率^[66].

Fig. 4. Phonon properties and thermal conductivity of MAPbI_3 : (a) Phonon dispersion relations at 350 K ^[64], the circles represent phonon modes, whose color indicates the ratio of particle-like to wave-like thermal conductivity, and area represents the magnitude of thermal conductivity; (b) a comparison of WTE thermal conductivity and NEMD thermal conductivity under different pressures at 350 K ^[65], “MYP-EMD” denotes the EMD thermal conductivity, and “Exp” represents experimental values; (c) comparison of the normalized thermal conductivity of MAPbI_3 with other materials as a function of normalized volume change^[65]; (d) WTE thermal conductivity and NEMD thermal conductivity under different electric field strengths at 100 K ^[66].

动性热导率的贡献不可忽视, 分别为 $0.09 \text{ W}/(\text{m}\cdot\text{K})$ 与 $0.14 \text{ W}/(\text{m}\cdot\text{K})$. 此外, 萘和并五苯的粒子性热导率随温度分别呈现出 $T^{-0.77}$ 与 $T^{-0.81}$ 的趋势 (仅考虑三声子散射), 偏离传统的 T^{-1} 趋势, 这主要是因为其大量光学声子参与粒子性导热. 值得注意的是, 通过计算不同晶格方向上的总热导率与波动性热导率, 他们发现, 4 种并苯的热导率各向异性均与波动性热导率的各向异性有直接关联. 上述工作不仅加深了学者对声子波动性运输机理的认识, 还为具有复杂结构的杂化/有机半导体材料声子层面的热输运性质计算与分析建立了范式.

3.2 无序体系

3.2.1 无定形材料

尽管无定形材料在微电子器件^[70]和太阳能电池^[71]等关键科技领域中具有重要应用价值, 对其热输运性质的主流理解目前仍停留在数十年前提出的基于简谐假设的 AF 理论^[72,73]. 相比于晶体, 基于传统“声子”概念描述无定形材料热输运行为时面临根本性的挑战. 具体而言, 由于结构长程有序性的缺失, 以及大量振动模式的平均自由程小于对应的波长或原子间距, 声子经典定义的适用性存在争议. 因此, 学者提出了不同于声子的振动模式分类体系——“传播子”(propagon, 遵循声子气体模型的低频振动模)、“扩散子”(diffuson, 兼具非传播性和非局域特征的中频振动模式)和“局域子”(locon, 在简谐近似下不参与导热的高频振动模式)^[74-78]. 基于此分类框架, 计算无定形材料总热导率之前需完成振动模式分类, 进而量化各类热载流子的具体贡献. 然而, 由于上述 3 类热载流子的界定标准存在分歧, 导致学者对其热导率贡献比例的评估产生显著偏差, 例如在 300 K 温度下 a-Si 中传播子占总热导率比值由 25%—90% 不等^[76-81]. 统一输运理论的提出则为无定形材料热导率的计算与分析提供了适合的框架.

2023 年, Simoncelli 等^[82]将无定形材料近似为具有较大超胞的常规晶体, 从而在布里渊区中进行 q 点网格采样并结合 WTE 以获得收敛热导率. 基于该方法, 他们发现对于无定形 SiO_2 (a- SiO_2), 仅需 192 个原子的超胞结合 $3\times 3\times 3$ 的 q 点网格即可复现实验热导率 (图 5(a)). 随后他们将该方法拓展至无定形 Al_2O_3 (a- Al_2O_3), 发现仅 120 个原子的

超胞结合 $5\times 5\times 5$ 的 q 点网格即可达到热导率收敛值^[83] (图 5(b)). 通过将 a- SiO_2 与 a- Al_2O_3 的 WTE 计算值与 AF 计算值进行对比, 他们发现两者结果几乎一致, 这意味着在这两种无定形材料中非简谐性作用可忽略不计, 然而 Zhu 等^[84]的计算结果表明 a- SiO_2 中非简谐作用会导致热导率的上升. 尽管上述方法可规避传统 AF 理论中热载流子分类及其贡献独立计算的复杂性, 但部分学者坚信无定形材料与晶体在理论处理层面存在本质差异. Fiorentino 等^[85]认为采用 q 点网格法会引入虚假的长寿命低频振动模式, 从而导致热导率被高估, 所以应当仅考虑 Gamma 点振动模式的贡献. 因此, 他们继承了 AF 理论中的热载流子框架, 采用 QHGK 方法计算扩散子与局域子的非简谐热导率贡献, 同时额外引入独立公式计算传播子的贡献以在有限尺寸超胞下获得收敛热导率 (即流体动力长波外推法)^[85,86]. 通过对 a-Si, a- SiO_2 和无定形 SiC (a-SiC) 的热导率进行计算, 他们发现当结构显著无序时 (如 a- SiO_2), 热导率的尺寸效应并不明显且传播子贡献较小; 而在 s-Si 等结构无序性相对较弱的材料中, 采用流体动力长波外推法引入传播子贡献可使尺寸收敛热导率对应的超胞原子数降低一个数量级^[85] (见图 5(c)). 此外, 他们强调在准确考虑尺寸效应的情况下, 忽视非简谐作用会导致收敛热导率发散^[86]. 2025 年, Yang 等^[87]通过理论计算验证了 Fiorentino 等对 q 点网格法的观点, 如图 5(d) 所示. 此外, 他们基于 WTE 中的双模式项提出了一种针对无定形材料热导率计算的新方法^[87], 其核心思想为将双模式项赋予热容、群速度、寿命与平均自由程, 从而直接将双模式项视为一种“粒子”以对其热输运性质进行分析. 基于该方法, 他们建立了双模式项与 AF 热载流子的关联, 并且更为重要的是, 他们提出的低频振动模式热导率贡献外推法彻底规避了引入传播子的需求, 实现了在统一框架下对无定形材料热导率的精准预测.

另一方面, Wang 等^[88]训练了针对 a-Si 的 NEP 并结合 HNEMD 探究了其热输运性质, 结果表明, 当超胞包含 64000 个原子时 (对应于超胞尺寸达到 11 nm), a-Si 的热导率趋近于收敛值. 此外, 他们发现用于生成无定形超胞的熔融淬火方法中的淬火速率会通过影响 a-Si 的结构性质从而改变其热导率, 因此选择合适的淬火速率对热输运性质的模拟同样至关重要. 通过计算 a-Si 在 10—1000 K

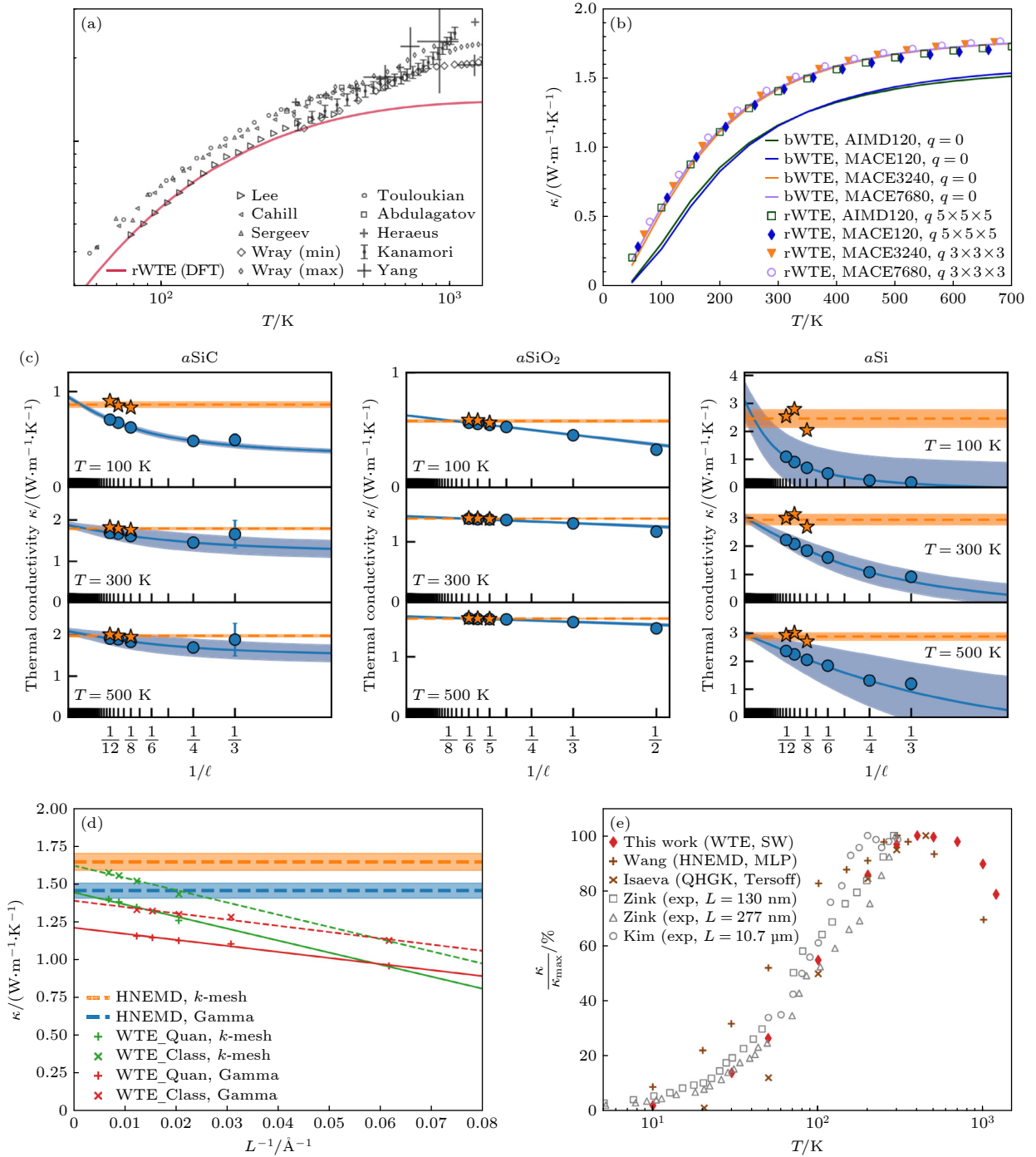


图5 无定形材料的热导率 (a) 基于192个原子的超胞和 $3\times 3\times 3$ 的 q 点网格计算的 $a\text{-SiO}_2$ 的WTE热导率与实验值的对比^[82]; (b) 基于不同尺寸超胞与不同尺寸 q 点网格计算的 $a\text{-Al}_2\text{O}_3$ 的WTE热导率的对比^[83]; (c) 不同温度下 $a\text{-SiC}$ 、 $a\text{-SiO}_2$ 和 $a\text{-Si}$ 的热导率尺寸收敛测试, 蓝色圆圈为QH GK热导率, 橘色五角星为QH GK+流体动力学外推法的热导率^[85]; (d) 300 K温度下基于 q 点网格和仅Gamma点计算的 $a\text{-Si}$ 的WTE热导率对比与HNEMD热导率对比^[87]; (e) 基于不同方法获得的 $a\text{-Si}$ 的热导率温度变化曲线^[87]

Fig. 5. Thermal conductivity of amorphous materials: (a) Comparison of the WTE thermal conductivity for $a\text{-SiO}_2$, calculated using a 192-atom supercell and a $3\times 3\times 3$ q -point grid, with experimental values^[82]; (b) WTE thermal conductivity of $a\text{-Al}_2\text{O}_3$ computed with supercells of different sizes and q -point grids of varying densities^[83]; (c) size-convergence tests of the thermal conductivity for $a\text{-SiC}$, $a\text{-SiO}_2$, and $a\text{-Si}$ at different temperatures, the blue circles represent the QH GK thermal conductivity, and the orange pentagrams represent the QH GK thermal conductivity with hydrodynamic extrapolation^[85]; (d) comparison of the WTE thermal conductivity for $a\text{-Si}$ at 300 K calculated using a q -point grid and at the Gamma-point only, alongside the HNEMD results^[87]; (e) temperature-dependent thermal conductivity of $a\text{-Si}$ obtained from different methods^[87].

的热导率变化,如图 5(e) 所示,他们观察到 a-Si 在 300 K 左右呈现明显的热导率峰值. Zhang 等^[89] 基于 NEP 方法训练了针对 a-HfO₂ 的机器学习势函数,通过 HNEMD 模拟,他们在 600 K 左右同样观察到了该材料的热导率峰值. 由于该热导率趋势与基于简谐假设的 AF 理论预测(单调递增至收敛)相悖,因此他们强调这是由高温下无定形材料的非简谐作用导致. 然而值得注意的是,在考虑非简谐作用后, a-SiO₂/a-Al₂O₃ 的热导率随温度上升至 1200 K/700 K 时依然呈现单调递增至收敛的趋势^[82-84], 尽管 Simoncelli 等^[82] 认为这两种材料的非简谐作用可忽视,但该观点有待商榷. Yang 等^[87] 基于双模式项框架的 a-Si 热导率计算验证了 Wang 等^[88] 的 HNEMD 结果,图 5(e) 表明 400 K 时同样存在热导率峰值. 此外,他们提出的有效双模式项比例与双模式项寿命的竞争效应成功解释了 a-Si 高温热导率下降的机理,并有望为 a-SiO₂ 和 a-Al₂O₃ 的热导率变化提供合理的解释.

3.2.2 化学无序体系

半导体材料的性能通常受制于其本征性质,因此掺杂、缺陷和合金化等手段常被用于精准改善材料性质以满足相应需求. 经上述手段调控后,材料的晶格周期性被破坏,具体而言,合金化和原子替代通常导致原子位点被两种或多种原子随机占据,呈现化学无序状态,这种无序性主要表现为原子质量无序与力常数无序(即化学键强度波动);而空位和位错会导致强烈的晶格畸变与原子占位缺失,这些原因使得上述体系声子输运性质计算远比纯晶体复杂^[9-11]. 目前该领域声子热导率计算主要基于声子 BTE,而声子-无序散射通常采用基于微扰论的 Tamura 公式或基于格林函数的 T 矩阵近似(T-matrix approximation, TMA) 方法进行处理,其中 Tamura 公式仅能考虑原子质量无序效应.

2017 年, Katre 等^[90] 基于 TMA-BTE 方法探究了立方 SiC 中的 4 类点缺陷(原子替代 Al_{Si}, N_C, B_C 和空位 Vac_C) 对其热导率的影响,如图 6(a) 所示,在同样的缺陷浓度下, B_C 对热导率有异常高的抑制作用,这主要是因为 B_C 导致晶格对称性破缺从而进一步引发了显著的声音共振散射. 2024 年, Li 等^[91] 采用相同方法在立方 BN 中同样观察到由点缺陷引起的声子共振散射行为,并发现由 Vac_N 引起的声子共振散射会导致其热导率呈现反常的温度

依赖趋势,即在约 150 K 时呈现热导率谷值(图 6(b)). 为衡量力常数无序效应的重要性, Polanco 等^[92] 通过对比由 TMA 和 Tamura 公式求解的含点缺陷 InN 半导体的声子散射率发现,忽视力常数无序效应会导致低频声子(2 THz 以下)和光学声子的散射率分别被低估 1 个和高估 3 个数量级.

近年来, Thébaud 等^[93] 研究表明,上述方法仅适用于无序程度较低的体系,而在重掺杂半导体或半导体合金等高度无序体系中,即使仅考虑质量无序效应, TMA 和 Tamura 公式也仅在低频部分有效(图 6(c)). 传统的虚拟晶体近似(virtual crystal Approximation, VCA) 方法将化学无序晶体近似地看作一种具有虚拟平均原子的完美有序晶体,这种方法虽能极大地简化计算,但代价是忽略了原子尺度上的局域涨落和散射效应^[9-11]. 为解决上述问题, Thébaud 等^[94] 提出了一种非微扰的 Chebyshev 多项式格林函数(Chebyshev polynomials Green's function, CPGF) 方法,该方法基本等价于 QHGK 和 WTE,同样包括波动性输运的贡献,但更适合大尺寸模型的计算. 通过对比 CPGF 与 VCA 方法的结果,他们得出结论,当体系力常数无序效应显著且高频光学声子贡献不可忽略时, VCA 方法将不再有效. 基于 CPGF,他们发现在质量无序合金模型中引入空间关联会打破低频振动模式 Rayleigh 散射规律,如图 6(d) 所示,引入形式为 $C(r) = 1/r$ 的空间关联形式会使散射率与频率的关系由 $\Gamma \propto \omega^4$ 改变为 $\Gamma \propto \omega^2$,从而降低热导率^[95]. 此外,他们发现波动性输运对热导率的贡献可以忽略不计. 随后, Fiorentino 等^[96] 采用 QHGK 与流体动力长波外推法在 Si_{1-x}Ge_x 验证了质量无序空间关联对热导率的抑制作用,具体而言,在 300 K 下 Si_{0.5}Ge_{0.5} 的热导率降低可达 4.5 倍(图 6(e)). Arrigoni 等^[97] 采用特殊准随机结构法和格林函数进一步探究了力常数无序对半导体合金的热输运影响,图 6(f) 表明,尽管在 Si_{1-x}Ge_x 中,声子-无序散射由质量无序主导,但在 III-V 族和 II-VI 族合金如 In_{1-x}Ga_xAs 中,力常数无序效应对正确求解热导率至关重要. 值得注意的是,由于合金体系规模(原子数高达十万)的限制,上述研究对力常数和简谐散射率的计算均采取了近似的方法,其对热输运性质的影响有待进一步考量.

与此同时, Conley 等^[98] 采取神经网络方法训练了针对 PbTe_{1-x}Se_x 合金的机器学习势函数并用

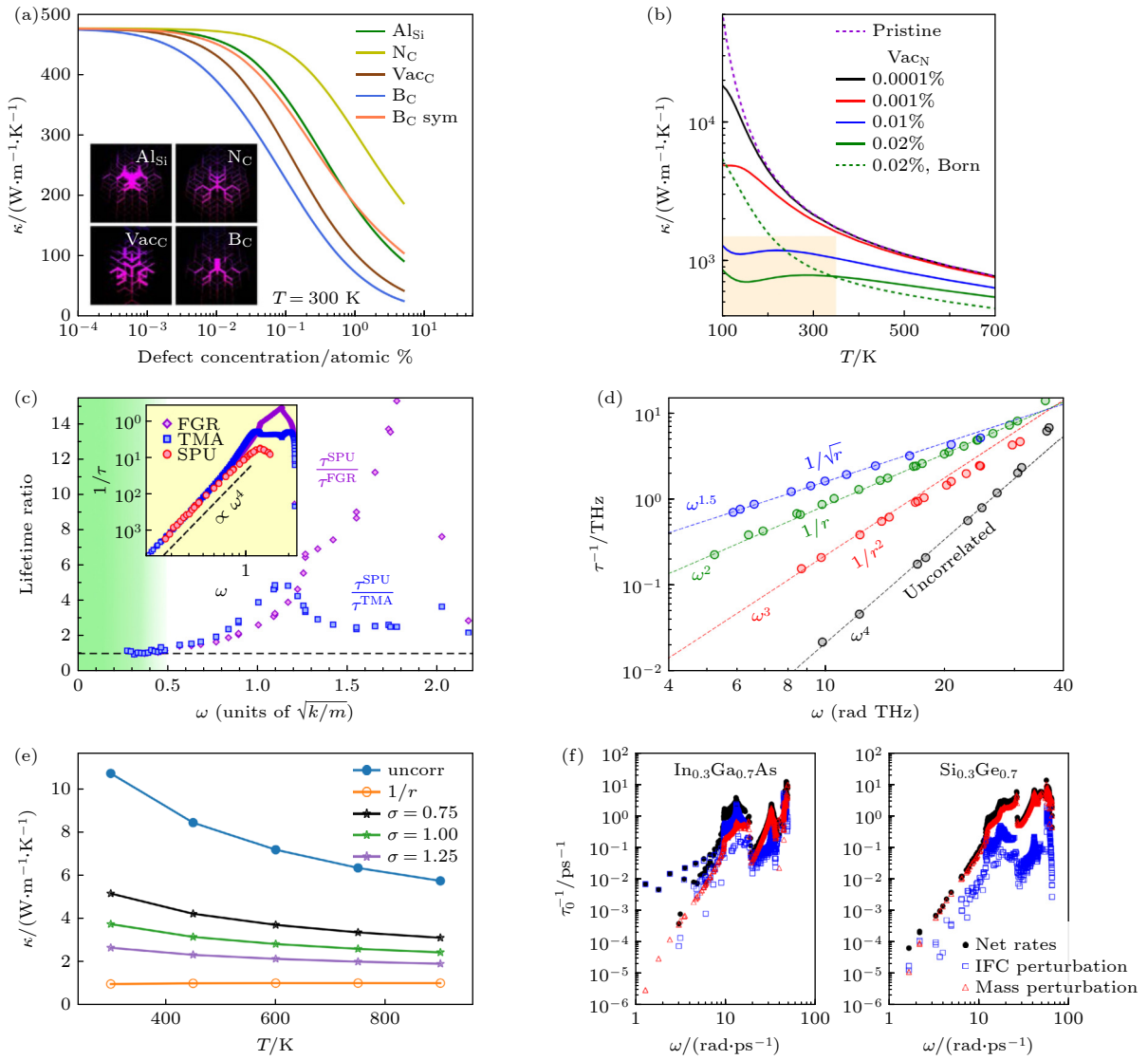


图 6 无序体系的声子性质与热导率 (a) 300 K 温度下不同缺陷种类对方 SiC 热导率影响的对比^[90]; (b) 不同缺陷浓度下的 Vac_N 对方 BN 热导率的影响^[91]; (c) 质量无序合金模型中基于 TMA 和 Tamura 公式 (FGR) 求解的声子寿命与基于超胞声子展开 (SPU) 方法求解的声子寿命的对比^[93]; (d) 质量无序合金模型中不同空间关联形式对声子散射率的频率依赖函数形式的影响^[95]; (e) 质量无序 $Si_{0.5}Ge_{0.5}$ 中不同空间关联形式对热导率的影响^[96]; (f) 合金 $In_{0.3}Ga_{0.7}As$ 与 $Si_{0.3}Ge_{0.7}$ 中力常数无序效应与质量无序效应对声子散射率的影响^[97]

Fig. 6. Phonon properties and thermal conductivity of disordered systems: (a) Comparison of the influence of different defect types on the thermal conductivity of cubic SiC at 300 K^[90]; (b) effect of nitrogen vacancies (Vac_N) concentration on the thermal conductivity of cubic BN^[91]; (c) comparison of phonon lifetimes in a mass-disordered alloy model calculated using the TMA and Tamura's model (FGR) with those obtained from the supercell phonon unfolding (SPU) method^[93]; (d) influence of different spatial correlation forms on the frequency dependence of phonon scattering rates in a mass-disordered alloy model^[95]; (e) impact of different spatial correlation forms on the thermal conductivity of mass-disordered $Si_{0.5}Ge_{0.5}$ ^[96]; (f) contributions of force-constant disorder and mass disorder to the phonon scattering rates in the alloys $In_{0.3}Ga_{0.7}As$ and $Si_{0.3}Ge_{0.7}$ ^[97].

EMD 模拟了其热导率, 结果表明, 力常数无序效应是合金化导致热导率下降的主要原因. Huang 等^[99] 通过训练针对 $Mg_3(Sb_{1-x}Bi_x)_2$ 的 NEP, 并结合 NEMD 与 HNEMD, 发现了 $Mg_3(Sb_{0.75}Bi_{0.25})_2$ 热导率的反常晶界尺寸依赖性. 然而, 他们用于计算热导率的超胞仅含一万个原子左右, 可能仍未达到收敛尺寸.

4 结论与展望

得益于新理论新方法的诞生以及算力的提升, 现阶段对半导体热输运性质的研究进展迅速. 本文简要梳理了新型声子输运理论和机器学习势函数的发展历程, 介绍了统一输运理论和机器学习分子动力学模拟的基本内容, 并重点讨论了这两种方法

在几类半导体材料体系热输运性质计算中的应用.

在强非简谐晶体中, 声子散射作用较强, 因此其总热导率较低 (300 K 温度下通常在 $2 \text{ W}/(\text{m}\cdot\text{K})$ 以下), 同时, 不同声子模式容易发生线宽重叠, 导致声子波动性输运对热导率贡献不可忽略, 甚至在部分材料如 CsPbBr_3 和 MAPbI_3 中超过 50%, 主导热输运过程. 另一方面, 此类材料体系原胞中的原子数通常要多于 Si 等简单晶体, 如无机半导体 Tl_3VSe_4 原胞有 8 个原子, 而有机半导体并五苯原胞可达 72 个原子, 更多原子数对应着更多的声子模式, 意味着在同样线宽下重叠更容易发生. 借助统一输运理论结合声子温度重整化理论和高阶声子散射理论, 学者目前已经能够充分地研究此类体系中的声子输运性质, 既能够对实验上观察到的反常现象 (如声子热导率的弱温度依赖性) 予以合理解释, 又能用于寻找符合要求的新材料体系. 值得注意的是, 在计算四声子散射和有限温度力常数时, 通常需要对大量超胞做单点 DFT 计算以求解力常数, 通过借助 MLP 可大大减小该过程的计算量. 此外, 当更高阶声子散射过程 (如五声子散射) 无法被忽视时, MLMD 模拟则为研究热输运性质提供了良好的替代方案.

无序体系主要分为无定形材料和化学无序体系两类. 无定形材料由于缺乏长程有序结构导致声子无法被良好定义, 因此其热输运性质研究主要依赖于传统的基于简谐近似的 AF 理论. 近年来, 有少数学者展开了利用统一输运理论研究无机半导体如 a-Si, a-SiO₂ 和 a-SiC 热输运性质的探索性工作. 此外, 无定形材料的计算热导率与超胞尺寸紧密相关, 一般来说, 至少需成千上万个原子才有可能收敛, 因此, 学者提出了各种方法用于处理无定形材料热导率尺寸效应, 如 WTE 结合 q 点网格法、QH GK 结合流体动力外推法和 WTE 结合双模式项外推法. 这些研究目前均处于起步阶段, 关于非简谐效应是否会显著影响热导率尚存有争议, 且这些新方法的适用性有待进一步验证. 在化学无序体系中, 由于缺陷和合金化的引入, 晶格周期性被破坏, 导致其热导率计算难度大大增加. 传统的 Tamura 公式和 TMA 方法仅适用于低浓度缺陷的情况, 对于重掺杂体系和高浓度合金并不适用, 而 VCA 方法又存在严重的局限性. 近年来有学者基于统一输运理论准确考虑了质量无序效应的影响, 发现其空间关联会显著改变声子散射率从而进一

步降低热导率, 为合金体系的热输运性质调控提供了新的方案. 然而由于计算量的限制, 现有研究往往忽视了力常数无序效应, 并普遍采用力常数和简谐散射率的近似求解, 这些问题有待深入探究. 此外, 关于缺陷和合金化对声子粒子性与波动性输运的影响机制目前几乎为空白, 有待进一步探索.

相比于输运方程方法, MLMD 模拟在保持第一性原理精度的同时能够完整地考虑各类无序效应的影响, 且实际操作过程也简单直接——建立相应的模拟超胞即可. 由于上述优点, 尽管 MLMD 提供的振动模式性质分析有限, 但其在计算化学无序体系热导率时具有显而易见的优势. 通过 MLMD 模拟, 多个研究组观察到了无定形材料 (如 a-Si 和 a-HfO₂) 高温热导率的反常下降, 另一方面, 有团队验证了在 $\text{PbTe}_{1-x}\text{Se}_x$ 合金中, 力常数无序效应是合金化导致热导率下降的主要原因. 不过值得强调的是, 即使采用 MLMD 模拟也需要仔细处理尺寸效应对热导率的影响以得到正确的结果. 综上所述, 针对复杂结构半导体材料的热输运理论研究, MLMD 模拟与输运方程方法优势互补. 具体而言, MLMD 模拟提供了可靠的基准结果, 而输运方程方法则能深入阐释其背后的微观物理过程.

展望未来, 计算方法的进一步发展将致力于突破现有瓶颈并拓展应用边界. 一方面, 输运方程方法算法复杂度通常与体系尺寸呈多项式关系增长, 而模型尺寸效应已成为复杂材料输运性质计算准确性的重要限制因素. 因此, 对于包含成千上万原子的大尺寸模型, 如何提升计算效率成为当下最紧要的问题. 未来可结合机器学习方法和 GPU 运算进一步加速力常数和声子散射率计算. 另一方面, 当前经典的分子动力学模拟无法完全捕捉振动中的量子效应, 这在涉及轻元素或低温环境的研究中尤为突出. 为弥补这一不足, 引入诸如 Ring-Polymer 分子动力学等路径积分方法, 能够有效地在 MD 框架中融入核量子效应的影响. 将该类量子校正方法与机器学习方法相结合, 有望在保持计算效率的同时, 更精确地描述量子效应主导下的热输运行为, 从而为理解与预测低温热导率等量子现象提供强有力的理论工具. 值得注意的是, 理论预测与实验测量之间仍存在需弥合的差距. 例如, 纳米异质结的界面效应与量子尺寸效应对热输运行为影响显著, 而现有模型对这类复杂边界的描述精度仍有待提升; 同时, 实验制备中难以精准控制的缺陷、

掺杂与表面态等因素, 也增加了实验结果与理想化理论模型直接对比的复杂性. 因此, 发展同时兼具计算效率、物理精度和真实体系描述能力的新一代理论计算框架, 仍是该领域面临的核心挑战.

参考文献

- [1] Zhu T J 2019 *J. Inorg. Mater.* **34** 233
- [2] Basu R, Singh A 2021 *Mater. Today Phys.* **21** 100468
- [3] Haque M A, Kee S, Villalva D R, Ong W L, Baran D 2020 *Adv. Sci.* **7** 1903389
- [4] Brenner T M, Egger D A, Kronik L, Hodes G, Cahen D 2016 *Nat. Rev. Mater.* **1** 15007
- [5] Luo T L, Ding Y F, Wei B J, Du J Y, Shen X Y, Zhu G M, Li B W 2023 *Acta Phys. Sin.* **72** 234401 (in Chinese) [罗天麟, 丁亚飞, 韦宝杰, 杜建迎, 沈翔瀛, 朱桂妹, 李保文 2023 *物理学报* **72** 234401]
- [6] Unke O T, Chmiela S, Sauceda H E, Gastegger M, Poltavsky I, Schütt K T, Tkatchenko A, Müller K R 2021 *Chem. Rev.* **121** 10142
- [7] Behler J 2016 *J. Chem. Phys.* **145** 170901
- [8] Bao H, Chen J, Gu X K, Cao B Y 2018 *ES Energy Environ.* **1** 16
- [9] Lindsay L, Katre A, Cepellotti A, Mingo N 2019 *J. Appl. Phys.* **126** 050902
- [10] McGaughey A J H, Jain A, Kim H Y, Fu B 2019 *J. Appl. Phys.* **125** 011101
- [11] Lindsay L, Hua C, Ruan X L, Lee S 2018 *Mater. Today Phys.* **7** 106
- [12] Gu X K, Fan Z Y, Bao H 2021 *J. Appl. Phys.* **130** 210902
- [13] Li W, Liu Y, Li Z, Zhang P, Li X, Ouyang T 2025 *Chin. Phys. B* **34** 096302
- [14] Han S, Dai S N, Ma J, Ren Q Y, Hu C L, Gao Z H, Duc Le M, Sheptyakov D, Miao P, Torii S, Kamiyama T, Felser C, Yang J, Fu C G, Zhu T J 2023 *Nat. Phys.* **19** 1649
- [15] Pan D K, Li T H, Wan X, Zong Z C, Qin Y J, Yang N 2025 *Chin. Phys. Lett.* **42** 070801
- [16] Zhang H M, Jiang X Y, Zhang H, Pi X D, Yang D R, Deng T Q 2025 *Appl. Phys. Lett.* **126** 142202
- [17] Mukhopadhyay S, Parker D S, Sales B C, Puzos A A, McGuire M A, Lindsay L 2018 *Science* **360** 1455
- [18] Luo Y X, Yang X L, Feng T L, Wang J Y, Ruan X L 2020 *Nat. Commun.* **11** 2554
- [19] Isaeva L, Barbalinardo G, Donadio D, Baroni S 2019 *Nat. Commun.* **10** 3853
- [20] Simoncelli M, Marzari N, Mauri F 2019 *Nat. Phys.* **15** 809
- [21] Simoncelli M, Marzari N, Mauri F 2022 *Phys. Rev. X* **12** 041011
- [22] Caldarelli G, Simoncelli M, Marzari N, Mauri F, Benfatto L 2022 *Phys. Rev. B* **106** 024312
- [23] Fiorentino A, Baroni S 2023 *Phys. Rev. B* **107** 054311
- [24] Fan Z Y, Dong H K, Harju A, Ala-Nissila T 2019 *Phys. Rev. B* **99** 064308
- [25] Blank T B, Brown S D, Calhoun A W, Doren D J 1995 *J. Chem. Phys.* **103** 4129
- [26] Behler J, Parrinello M 2007 *Phys. Rev. Lett.* **98** 146401
- [27] Bartók A P, Payne M C, Kondor R, Csányi G 2010 *Phys. Rev. Lett.* **104** 136403
- [28] Shapeev A V 2016 *Multiscale Model. Simul.* **14** 1153
- [29] Zhang L F, Han J Q, Wang H, Car R, E W N 2018 *Phys. Rev. Lett.* **120** 143001
- [30] Fan Z Y, Zeng Z Z, Zhang C Z, Wang Y Z, Song K K, Dong H K, Chen Y, Ala-Nissila T 2021 *Phys. Rev. B* **104** 104309
- [31] Batzner S, Musaelian A, Sun L, Geiger M, Mailoa J P, Kornbluth M, Molinari N, Smidt T E, Kozinsky B, 2022 *Nat. Commun.* **13** 2453
- [32] Batatia I, Kovacs D P, Simm G, Ortner C, Csányi G 2022 *Adv. Neural Inf. Process Syst.* **35** 11423
- [33] Fan Z Y, Wang Y, Ying P, Song K, Wang J, Wang Y, Zeng Z, Xu K, Lindgren E, Rahm J M, Gabourie A J, Liu J, Dong H, Wu J, Chen Y, Zhong Z, Sun J, Erhart P, Su Y, Ala-Nissila T 2022 *J. Chem. Phys.* **157** 114801
- [34] Xu K, Bu H, Pan S N, Lindgren E, Wu Y C, Wang Y, Liu J H, Song K K, Xu B, Li Y F, et al. 2025 *Mater. Genome Eng. Adv.* **3** e70028
- [35] Bartók A P, Kondor R, Csányi G 2013 *Phys. Rev. B* **87** 184115
- [36] Behler J 2011 *J. Chem. Phys.* **134** 074106
- [37] Cheng B Q 2025 *Npj Comput. Mater.* **11** 80
- [38] Dove M T 1993 *Introduction to Lattice Dynamics* (Cambridge: Cambridge University Press)
- [39] Srivastava G P 2022 *The Physics of Phonons* (Boca Raton: CRC Press)
- [40] Monacelli L, Bianco R, Cherubini M, Calandra M, Errea I, Mauri F 2021 *J. Phys. Condens. Matter* **33** 363001
- [41] Tadano T, Tsuneyuki S 2015 *Phys. Rev. B* **92** 054301
- [42] Hellman O, Steneteg P, Abrikosov I A, Simak S I 2013 *Phys. Rev. B* **87** 104111
- [43] Hellman O, Abrikosov I A 2013 *Phys. Rev. B* **88** 144301
- [44] Shulumba N, Hellman O, Minnich A J 2017 *Phys. Rev. B* **95** 014302
- [45] Ravichandran N K, Broido D 2018 *Phys. Rev. B* **98** 085205
- [46] Xia Y 2018 *Appl. Phys. Lett.* **113** 073901
- [47] Feng T L, Ruan X L 2016 *Phys. Rev. B* **93** 045202
- [48] Feng T L, Lindsay L, Ruan X L 2017 *Phys. Rev. B* **96** 161201
- [49] Lv W, Henry A 2016 *New J. Phys.* **18** 013028
- [50] Zhou Y G, Zhang X L, Hu M 2015 *Phys. Rev. B* **92** 195204
- [51] Turney J E, Landry E S, McGaughey A J H, Amon C H 2009 *Phys. Rev. B* **79** 064301
- [52] Thomas J A, Turney J E, Iutz R M, Amon C H, McGaughey A J H 2010 *Phys. Rev. B* **81** 081411
- [53] Feng T L, Qiu B, Ruan X L 2015 *J. Appl. Phys.* **117** 195102
- [54] Turney J E, McGaughey A J H, Amon C H 2009 *Phys. Rev. B* **79** 224305
- [55] Bedoya-Martínez O N, Barrat J L, Rodney D 2014 *Phys. Rev. B* **89** 014303
- [56] Xia Y, Pal K, He J, Ozoliņš V, Wolverton C 2020 *Phys. Rev. Lett.* **124** 065901
- [57] Jain A 2020 *Phys. Rev. B* **102** 201201
- [58] Zeng Z Z, Zhang C Z, Xia Y, Fan Z Y, Wolverton C, Chen Y 2021 *Phys. Rev. B* **103** 224307
- [59] Zhao Y M, Zhang X W, Zhang C, Shin S M, Shen L 2025 *Phys. Rev. B* **112** 125406
- [60] Chang Z, Zheng J Z, Ma J, Zhang X L, Gao Y F, Tang D W 2024 *Int. J. Heat Mass Transf.* **219** 124863
- [61] Hao Y Z, Che J W, Wang X Y, Li X J, Lookman T, Sun J, Ding X D, Gao Z B 2025 *Phys. Rev. B* **111** 195207
- [62] Ohnishi M, Tadano T, Tsuneyuki S, Shiomoto J 2022 *Phys. Rev. B* **106** 024303
- [63] Lian Y X, Wang Y X, Yuan Y C, Ren Z X, Tang W D, Liu Z, Xing S Y, Ji K Y, Yuan B, Yang Y C, Gao Y X, Zhang S, Zhou K, Zhang G, Stranks S D, Zhao B D, Di D W 2025 *Nature* **640** 62
- [64] Yang J, Jain A, Ong W L 2022 *Mater. Today Phys.* **28**

- 100892
- [65] Yang J, Jain A, Fan L W, Ang Y S, Li H Y, Ong W L 2023 *Chem. Mater.* **35** 5185
- [66] Yu Y T, Yang J, Jain A, Chen M, Li H Y, Ong W L 2025 *Small* **21** 2500407
- [67] Della Valle R G, Venuti E 1998 *Phys. Rev. B* **58** 206
- [68] Ju Z, Ma D K, Chang Z 2025 *Phys. Rev. B* **111** 134302
- [69] Legenstein L, Reicht L, Wieser S, Simoncelli M, Zojer E 2025 *Npj Comput. Mater.* **11** 29
- [70] Geng D, Wang K, Li L, Myny K, Nathan A, Jang J, Kuo Y, Liu M 2023 *Nat. Electron.* **6** 963
- [71] Liu W Z, Shi J H, Zhang L P, et al. 2022 *Nat. Energy* **7** 427
- [72] Zhou W X, Cheng Y, Chen K Q, Xie G F, Wang T, Zhang G 2020 *Adv. Funct. Mater.* **30** 1903829
- [73] DeAngelis F, Muraleedharan M G, Moon J, Seyf H R, Minnich A J, McGaughey A J H, Henry A 2019 *Nanoscale Microscale Thermophys. Eng.* **23** 81
- [74] Allen P B, Feldman J L 1989 *Phys. Rev. Lett.* **62** 645
- [75] Allen P B, Feldman J L 1993 *Phys. Rev. B* **48** 12581
- [76] Feldman J L, Kluge M D, Allen P B, Wooten F 1993 *Phys. Rev. B* **48** 12589
- [77] Feldman J L, Allen P B, Bickham S R 1999 *Phys. Rev. B* **59** 3551
- [78] Allen P B, Feldman J L, Fabian J, Wooten F 1999 *Philos. Mag. B* **79** 1715
- [79] He Y P, Donadio D, Galli G 2011 *Appl. Phys. Lett.* **98** 144101
- [80] Larkin J M, McGaughey A J H 2014 *Phys. Rev. B* **89** 144303
- [81] Moon J, Latour B, Minnich A J 2018 *Phys. Rev. B* **97** 024201
- [82] Simoncelli M, Mauri F, Marzari N 2023 *Npj Comput. Mater.* **9** 106
- [83] Harper A F, Iwanowski K, Witt W C, Payne M C, Simoncelli M 2024 *Phys. Rev. Mater.* **8** 043601
- [84] Zhu X Y, Shao C 2022 *Phys. Rev. B* **106** 014305
- [85] Fiorentino A, Pegolo P, Baroni S 2023 *Npj Comput. Mater.* **9** 157
- [86] Fiorentino A, Drigo E, Baroni S, Pegolo P 2024 *Phys. Rev. B* **109** 224202
- [87] Yang J, Zhu X Y, McGaughey A J H, Ang Y S, Ong W L 2025 *Phys. Rev. B* **111** 094206
- [88] Wang Y Z, Fan Z Y, Qian P, Caro M A, Ala-Nissila T 2023 *Phys. Rev. B* **107** 054303
- [89] Zhang H G, Gu X K, Fan Z Y, Bao H 2023 *Phys. Rev. B* **108** 045422
- [90] Katre A, Carrete J, Dongre B, Madsen G K H, Mingo N 2017 *Phys. Rev. Lett.* **119** 075902
- [91] Li G T, Zheng J Z, Cui Z, Guo R Q 2024 *Phys. Rev. B* **110** L060101
- [92] Polanco C A, Lindsay L 2018 *Phys. Rev. B* **98** 014306
- [93] Thébaud S, Polanco C A, Lindsay L, Berlijn T 2020 *Phys. Rev. B* **102** 094206
- [94] Thébaud S, Berlijn T, Lindsay L 2022 *Phys. Rev. B* **105** 134202
- [95] Thébaud S, Lindsay L, Berlijn T 2023 *Phys. Rev. Lett.* **131** 026301
- [96] Fiorentino A, Pegolo P, Baroni S, Donadio D 2025 *Phys. Rev. B* **111** 134205
- [97] Arrigoni M, Carrete J, Mingo N, Madsen G K H 2018 *Phys. Rev. B* **98** 115205
- [98] Conley K, Gerber C, Novick A, Berriodi T, Toberer E S, Karttunen A J 2025 *Mater. Horiz.* **12** 8084
- [99] Huang X F, Li C Z, Yuan M H, Shuai J, Li X G, Hou Y L 2024 *Mater. Today Phys.* **43** 101386

SPECIAL TOPIC — Heat conduction and its related interdisciplinary areas

Advances and prospects in thermal transport theory for complex semiconductors*

YANG Jin¹⁾²⁾ ZHAO Ruolin³⁾ ONG Wee-Liat³⁾⁴⁾ PI Xiaodong¹⁾²⁾⁵⁾

YANG Deren¹⁾²⁾⁵⁾ DENG Tianqi^{1)2)†}

1) (State Key Laboratory of Silicon and Advanced Semiconductor Materials and School of Materials Science and Engineering,

Zhejiang University, Hangzhou 310027, China)

2) (Institute of Advanced Semiconductors, ZJU-Hangzhou Global Scientific and Technological Innovation Center,

Zhejiang University, Hangzhou 311215, China)

3) (ZJU-UIUC Institute, College of Energy Engineering, Zhejiang University, Haining 314400, China)

4) (State Key Laboratory of Clean Energy Utilization, Zhejiang University, Hangzhou 310027, China)

5) (Shangyu Institute of Semiconductor Materials, Zhejiang University, Shaoxing 212399, China)

(Received 24 December 2025; revised manuscript received 4 February 2026)

Abstract

Semiconductors serve as the cornerstone of modern electronics, where their thermal transport properties directly impact device efficiency and reliability. Compared to the in-depth understanding of their electrical properties, research on thermal transport mechanisms has progressed more slowly, with traditional theories

facing challenges in handling systems with strong anharmonicity and disorder. A deeper insight into semiconductor thermal transport is not only crucial for designing high-performance thermal management materials but also instrumental in developing novel materials for energy conversion applications. This article systematically reviews the development of novel phonon transport theories and machine-learning potentials, with a focus on the study of thermal transport properties in complex semiconductor systems such as strongly anharmonic crystals and disordered materials using unified transport theory and machine-learning molecular dynamics simulations. In strongly anharmonic crystals, intense phonon scattering leads to low intrinsic thermal conductivity. The significant overlap of phonon linewidths in these systems results in a substantial contribution from wave-like thermal transport. Unified transport theory, combined with phonon renormalization and high-order scatterings, now enables a thorough investigation of these systems, providing explanations for experimental anomalies and aiding in the discovery of new materials. Disordered systems are categorized into amorphous materials and chemically disordered alloys. The absence of long-range order in amorphous materials challenges the conventional phonon picture, traditionally addressed by the Allen-Feldman theory. Exploratory studies are now applying unified transport theories to amorphous semiconductors like a-Si and a-SiO₂. In chemically disordered systems, traditional methods like the Tamura's model and virtual crystal approximation have their own limitations. Unified transport theory has recently been used to incorporate mass disorder effects, revealing that their spatial correlation can further suppress thermal conductivity. However, force-constant disorder is often neglected due to computational cost, and the fundamental influence of defects on particle-like versus wave-like transport remains largely unexplored. Machine-learning molecular dynamics (MLMD) simulations offer a complementary approach, capturing various disorder effects with first-principles accuracy simply by constructing representative supercells. While providing limited modal analysis, MLMD's advantage in studying disordered systems is clear. Overall, MLMD and transport equation methods are highly complementary; MLMD provides reliable benchmark results, while transport theories offer deep microscopic insights. In addition, this review also provides an outlook on future directions for theoretical development.

Keywords: heat conduction, phonon transport, machine-learning potential, molecular dynamics

DOI: [10.7498/aps.75.20251752](https://doi.org/10.7498/aps.75.20251752)

CSTR: [32037.14.aps.75.20251752](https://cstr.cn/32037.14.aps.75.20251752)

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 62204218, 62574179), the Leading Innovative and Entrepreneur Team Introduction Program of Hangzhou, China (Grant No. TD2022012), and the Natural Science Foundation of Zhejiang Province, China (Grant No. LJXSZ26A040002).

† Corresponding author. E-mail: dengtq@zju.edu.cn

复杂结构半导体材料热输运理论方法进展与展望

杨进 赵若琳 ONGWee-Liat 皮孝东 杨德仁 邓天琪

Advances and prospects in thermal transport theory for complex semiconductors

YANG Jin ZHAO Ruolin ONG Wee-Liat PI Xiaodong YANG Deren DENG Tianqi

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 75, 070707 (2026) DOI: 10.7498/aps.75.20251752

CSTR: 32037.14.aps.75.20251752

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.75.20251752>

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

类石墨烯氮化碳结构(C_3N)热传导机理研究

Thermal conduction mechanism of graphene-like carbon nitride structure (C_3N)

物理学报. 2023, 72(1): 013102 <https://doi.org/10.7498/aps.72.20221441>

基于深度学习势函数的 $[EMIm]^+Cl+AlCl_3$ 离子液体扩散动力学性质的分子动力学模拟

Molecular dynamics simulation of diffusion dynamic behavior in $[EMIm]^+Cl+AlCl_3$ ionic liquid based on deep learning potential function

物理学报. 2025, 74(19): 198201 <https://doi.org/10.7498/aps.74.20250818>

二元氧化物 Yb_3TaO_7 的非晶状热传导机理

Mechanism of amorphous-like thermal conductivity in binary oxide Yb_3TaO_7

物理学报. 2023, 72(5): 056101 <https://doi.org/10.7498/aps.72.20221581>

$Au-TiO_2$ 光电极界面声子热输运特性的分子动力学模拟

Molecular dynamics simulation of thermal transport properties of phonons at interface of $Au-TiO_2$ photoelectrode

物理学报. 2024, 73(10): 103105 <https://doi.org/10.7498/aps.73.20240026>

碳纳米管和碳化硅纳米管热导率的分子动力学研究

Molecular dynamics study of thermal conductivity of carbon nanotubes and silicon carbide nanotubes

物理学报. 2022, 71(3): 030202 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20210969>

界面工程调控GaN基异质结界面热传导性能研究

Interface engineering moderated interfacial thermal conductance of GaN-based heterointerfaces

物理学报. 2023, 72(22): 226301 <https://doi.org/10.7498/aps.72.20230791>