

GaN/AlN 异质结构界面热输运性质的分子动力学研究*

王治贺# 李雪洁# 高志斌†

(金属材料强度全国重点实验室, 金属多孔材料全国重点实验室, 西安交通大学材料科学与工程学院, 西安 710049)

(2026 年 1 月 2 日收到; 2026 年 2 月 25 日收到修改稿)

随着功率密度、工作频率和集成度的提高, 电子设备中的热流密度迅速增加, 散热问题成为制约氮化镓 (GaN) 基电子器件发展的瓶颈. 界面上材料微观结构和元素组成的变化严重阻碍了电子和声子的输运, 因此降低异质结构的界面热阻是提升微纳器件热管理性能的重要手段之一. 本文采用非平衡分子动力学方法, 系统研究了 GaN/AlN 异质结构界面热阻在不同温度、尺寸及空位缺陷条件下的变化规律. 结果表明, 随着温度从 300 K 提升至 700 K, GaN/AlN 异质界面的界面热阻随温度升高持续降低. 尺寸效应结果显示, 随着 GaN/AlN 异质结构中 AlN 层数由 3 层增加至 10 层, 界面热阻在 AlN 为 8 层时逐渐趋于稳定. 在 GaN 靠近界面区域引入空位缺陷后, 界面热阻呈现非单调变化特征: 当空位缺陷率由 0% 增加至 5% 时, 界面热阻略微减小; 随着缺陷率进一步增大至 25%, 界面热阻明显升高, 较无缺陷体系增加约 11%. 此外, 当空位缺陷区域逐渐远离界面时, 界面热阻随缺陷区域与界面之间距离 L 的增加而降低, 并在 $L \geq 5$ nm 后趋于稳定. 通过声子态密度及重叠因子的分析, 本研究阐明了温度、尺寸及缺陷变化分别对 GaN/AlN 异质结构界面传热的影响, 为 GaN 基器件界面热输运调控提供了理论依据.

关键词: 异质结构, 界面热阻, 尺寸效应, 空位缺陷

DOI: 10.7498/aps.75.20260003

CSTR: 32037.14.aps.75.20260003

1 引言

在对电气性能要求不断提高的驱动下, 电力电子学的发展要求更高的功率密度和工作频率, 这对半导体和电子设备的电气性能提出更高的要求^[1-3]. 作为一种具有代表性的共价晶体材料, GaN 已逐步取代硅和砷化镓, 成为新一代功率器件的首选材料. GaN 的宽禁带特性使半导体器件 (如高电子迁移率晶体管 (HEMTs)) 在保持优异载流子迁移率的同时, 能够承受更高的击穿电压, 从而适用于高频放大器和大功率快速充电系统^[4,5]. GaN HEMTs 的性能受到自热效应的限制^[6,7], 在高功率条件下, 温度可

能急剧升高, 影响 GaN 晶体管的长期稳定性. 为了提高器件的散热效率, 研究者采用高导热系数的衬底材料, 例如金刚石和碳化硅^[8-10], 有效增强了 GaN HEMTs 向外部环境的热传导能力. Cho 等^[11]利用时间域热反射 (TDTR) 等技术系统测量了 GaN/金刚石复合衬底中 GaN 与金刚石之间的热界面阻抗, 并结合有限元模拟研究了界面热阻 (ITR) 对器件热性能的影响, 结果表明 GaN/金刚石界面的热界面阻抗在室温下约为 $20\text{--}50\text{ m}^2\cdot\text{K}\cdot\text{GW}^{-1}$, 这在一定程度上制约了器件的热管理效率, 因此, 有必要开展系统的实验与理论研究, 以深入理解并优化 GaN/衬底界面的热输运特性.

尽管金刚石基衬底有较高的热导率, 能有效缓

* 国家自然科学基金 (批准号: 52595632) 和国家重点研发计划青年科学家项目 (批准号: 2023YFB4604100) 资助的课题.

同等贡献作者.

† 通信作者. E-mail: zhibin.gao@xjtu.edu.cn

解器件自加热限制, 但 AlN 与 GaN 具有更高的晶格匹配度, 一般作为器件散热结构中的过渡层. 由于界面两侧材料在声子色散关系、原子质量及力常数等方面存在差异, 声子在界面传播过程中会发生部分反射与散射, 从而产生额外的热流阻滞效应, 该附加热阻通常称为界面热阻. 随着微纳器件特征尺度的减小以及单位面积热流密度的提高, 界面热阻逐渐成为制约热扩散效率和器件长期可靠性的关键因素. 由此深入研究 GaN/AlN 异质结的界面热阻及其调控机制, 对于连接微观声子动力学行为与宏观热传导性能, 从而提升 GaN 基器件的散热效率, 保持其长期可靠性, 具有重要的科学意义 [12].

本文研究的 GaN/AlN 异质结构中, 界面热输运由声子贡献主导. 由于 GaN 和 AlN 均为宽禁带半导体, 自由载流子浓度极低, 电子热导率远小于声子热导率; 且半导体界面热阻的物理本质源于声子谱失配与界面散射, 电子贡献仅在金属/半导体界面中显著. 因此本文采用的非平衡分子动力学 (NEMD) 方法, 本质描述声子热输运, 重点研究声子对界面热阻的贡献.

Wang 等 [13] 通过改变 GaN/AlN 界面不同 AlN 相形态, 显著改善了界面热导率. 声子振动谱分析表明, 界面声子模态主导了不同晶体结构下的能量传输过程. 此外, 由于非弹性声子散射增强以及高温下额外声子模态的激发, 热边界导热率随温度升高而增加. 这些结果为优化 GaN/AlN 界面设计、降低界面热阻提供了新的理论依据. Li 等 [14] 测量了 GaN/AlN 界面的界面热导率, 发现由于晶体缺陷引起的声子散射较弱, 从而导致其随温度显著变化. 同时, 他们基于理论计算考虑声子谱计算界面热导率. 研究表明, 界面热导率的尺寸依赖性主要源于准弹道热传输及厚度受限对长平均自由程声子模态散射的抑制. 此外, Bao 等 [15] 直接计算了 GaN/AlN 的界面热导率, 发现其界面热导远大于 GaN/金属、GaN/Si 和 GaN/SiC. 通过结构相似性和界面声子模来揭示其形成机制. 文献 [16,17] 从界面工程角度研究了异质界面的热输运特性, 发现合理设计过渡层和界面结构能够有效改善界面声子传输效率, 进而提升界面热输运性能. 总之, 随着电子器件向小型化和更高功率密度发展, 界面热阻在总热阻中的比例显著增加 [18].

作为 GaN 基器件的关键部件, GaN/AlN 的 ITR 对热管理至关重要 [14,19,20]. 目前多数研究集中

在理想条件下 AlN/GaN 异质结构的界面热输运, 而关于尺寸效应及缺陷等因素对界面散热性能的影响尚缺乏系统性分析. 因此, 本文探讨了 GaN/AlN 异质结构在不同温度、尺寸、缺陷浓度及缺陷位置条件下的界面热输运特性. 这些发现为理解 GaN/AlN 异质结热传导特性提供了一个新的视角, 并为设计具有增强热管理性能的半导体器件提供了重要的理论指导.

2 模型构建与模拟过程

AlN 和 GaN 原子构型为纤锌矿相, 经 VASP^[21] 优化后, 本工作所用的 GaN 实际参数 a 和 c 分别为 3.186 Å 和 5.184 Å. AlN 实际参数 a 和 c 分别为 3.091 Å 和 4.947 Å. GaN 和 AlN 沿 [0001] (z 轴) 方向取向, 该方向具有 Ga 中最佳的导热性, 从而导致晶格失配应力可忽略不计 [22]. 为定量评估 GaN/AlN 异质结的晶格匹配程度, 引入面内晶格失配率 χ , 其定义为 $\chi = \frac{a_{\text{GaN}} - a_{\text{AlN}}}{a_{\text{GaN}}} = 2.98\%$. GaN 和 AlN 的初始结构均为 $6 \times 10 \times 1$. 通过先建立基本异质结构, 再在 z 方向上进行扩胞, 得到完整的 GaN/AlN 异质结构模型. 如图 1 所示.

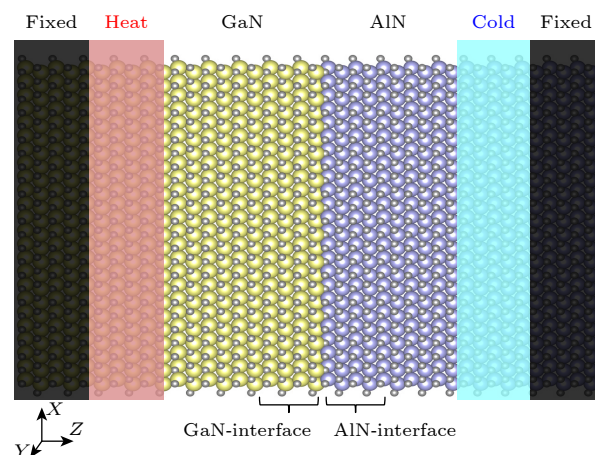


图 1 GaN/AlN 10 层异质结构
Fig. 1. 10-layer GaN/AlN heterostructure model.

本文采用大规模原子/分子大规模并行模拟器 (LAMMPS)^[23] 进行非平衡分子动力学模拟. 周期条件用于 x , y 和 z 方向. 热流的方向是沿 z 轴的. 为更准确地反映热输运特性, 沿 z 方向两端固定部分原子, 并分别将左端和右端指定为热源与冷源. 评估了一系列时间步长, 以在模拟框架内保持一致的总能量, 同时也将计算成本保持在最小.

通过平衡计算精度与计算时间, 选择了 0.5 fs 的时间步长, 并在所有 MD 模拟中统一应用. 对于平衡复杂界面体系而言, 采用较小的时间步长是必要的.

需要指出的是, 在本文所研究的 GaN/AlN 异质结构中, 块体区域与界面区域的原子相互作用具有不同的物理特征. 在 GaN 和 AlN 体材料内部, 原子间相互作用以共价键为主, Tersoff 势能够有效描述其多体相互作用特性及相应的声子动力学行为, 该势函数已被广泛应用于纤锌矿 GaN 和 AlN 的结构与热输运性质研究中. 因此, 本文采用 Tersoff 原子间相互作用势^[24,25]描述纤锌矿 GaN 和 AlN 块体区域中的 Ga-Ga, Ga-N, Al-Al, Al-N 及 N-N 原子间相互作用.

相比之下, 在 GaN/AlN 异质界面处, 界面原子间相互作用主要体现为界面耦合对声子透射行为的调制, 并不涉及新的稳定共价键形成. 鉴于目前尚缺乏能够同时准确描述体相与跨界面 Ga-N, Al-N 以及 Ga-Al 等多组分相互作用的统一多体势函数, 本文采用 Lennard-Jones (LJ) 势对 GaN/AlN 界面原子间相互作用进行参数化处理, 以刻画界面处的有效耦合强度. 该处理方法已在半导体异质结构界面热输运的分子动力学研究中得到广泛应用^[26]. LJ 势函数由 (1) 式定义:

$$V(r) = 4\chi\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right], \quad (1)$$

其中, r 为原子间距离, ϵ 为原子间相互作用强度的能量, σ 为势能为零的原子间距, χ 为比例因子. 表 1 列出了这些参数.

表 1 不同原子对之间的 LJ 势参数
Table 1. LJ potential parameters between different atomic pairs.

Atom 1	Atom 2	ϵ/meV	$\sigma/\text{\AA}$
Ga	Al	95.54	3.0818
Ga	N	12.14	3.645
N	Al	64.45	3.1368
N	N	8.19	3.7

在仿真初始阶段, 首先采用共轭梯度法将系统能量优化至最小, 以保证结构在能量最小化过程中保持稳定. 随后, 为了实现系统的动力学平衡, 在 NVT 系综 (恒原子数 N 、恒体积 V 、恒温度 T) 下对系统进行弛豫, 温度设定为 300 K. 接着, 将体系从 NVT 系综切换至 NVE 系综 (恒原子数 N 、恒体积 V 、恒总能量 E), 并采用朗之万方法运行 5×10^6

步, 以确保系统达到稳定状态. 完成弛豫后, 系统继续在朗之万方法下运行 5×10^6 步, 以进一步维持动力学稳定. 计算获得温度的数据如图 2 所示. 图 2(a) 显示了具有光滑界面的 GaN/AlN 异质结中沿热流方向的温度分布. 跨越 GaN/AlN 界面的热通量 q 通过拟合恒温器能量随时间变化的能量积累曲线获得, 如图 2(b) 所示. 在界面区有一个温度不连续的 ΔT , 这表明在 AlN 和 GaN 之间存在 ITR. 在系统达到非平衡稳态后, 热流密度和温度在额外的 5 ns 内进行了时间平均. 为了使统计误差最小化, 在同一模拟中进行多次测量, 然后求取平均值. 使用 ΔT 和热通量 q 的平均值来计算 AlN/GaN 的 ITR 值:

$$R_{\text{interface}} = \Delta T/q. \quad (2)$$

在 NEMD 模拟中, 恒温器被用来保持热源处 (hot source) 的较高温度和散热器处 (heat sink)

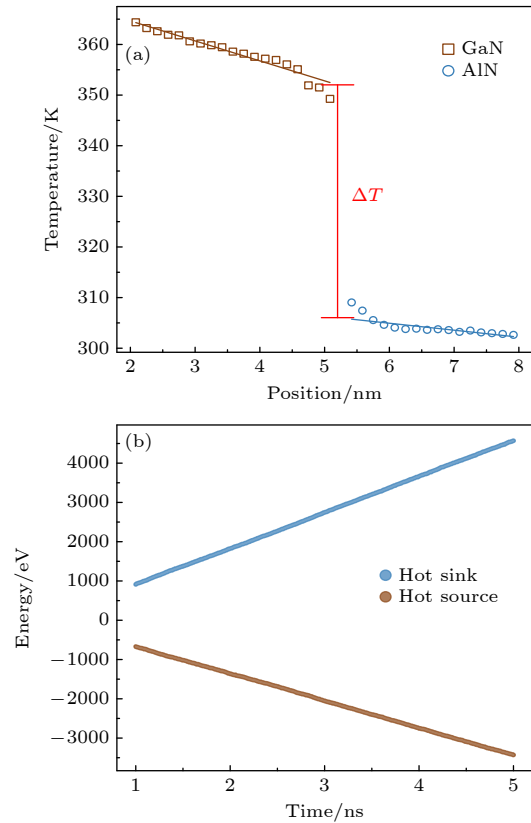


图 2 (a) GaN/AlN 异质结中沿热流方向的稳态温度分布; (b) 热源区与散热器区恒温器能量随时间变化的积累曲线, 通过线性拟合获得体系中的稳态热通量

Fig. 2. (a) Steady-state temperature profile along the heat transport direction in the smooth GaN/AlN heterojunction; (b) energy accumulation curves of the thermostats at the heat source and heat sink, the steady-state heat flux is obtained from linear fitting.

的较低温度, 从而产生热流量. (2) 式中, q 表示单位面积的热流量, 它是由下式定义:

$$q = \frac{\Delta E_{\text{heatsource}} + \Delta E_{\text{heatsink}}}{2A\Delta t}, \quad (3)$$

其中, $\Delta E_{\text{heatsource}}$ 和 $\Delta E_{\text{heatsink}}$ 分别表示在时间间隔 Δt 内恒温器向热源区输入的能量以及从散热器区移除的能量; A 为体系的横截面积; Δt 为用于统计能量交换的时间区间. 界面处的温度跃迁 ΔT 通过将界面两侧材料的稳态温度分布分别进行线性拟合, 并外推至界面位置来确定, 如图 2(a) 所示. 在进行线性拟合时, 通常忽略热源区和散热器区附近的温度点, 以及紧邻界面的温度点, 因为这些区域往往受到恒温器扰动或界面散射的影响, 呈现明显的非线性特征.

在异质结构中, 声子主要在界面中的平面内 (x 和 y 方向) 和平面外 (z 方向) 发生单一的非弹性散射, 扩散到附近的材料中. 在这个过程中, 声子碰撞的概率随着界面中相应的声子态密度 (PDOS) [27] 增长而增长. 此外, 平面外声子对 ITR 的影响明显高于平面内声子. 因此, 本文重点分析 z 方向上的 PDOS 来研究界面热输运特性, 分析 ITR 的变化. PDOS 是从平衡状态下的速度自相关函数 (VACF) 方程 (4) 的傅里叶变换得到:

$$V = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N [v_i(0) v_i(t)], \quad (4)$$

$$P = \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega t} V(t) dt, \quad (5)$$

其中, N 是系统中的原子数; $v_i(t)$ 是粒子 i 在 t 时刻的速度; ω 是声子频率; PDOS 的单位为 THz^{-1} , PDOS 指的是单位频率间隔内声子振动模数, 经常被用来描述声子的行为, 并在解释热传导机制中起着至关重要的作用. 两个界面之间的声子跃迁可以通过计算它们之间的 PDOS 的重叠来确定. 重叠积分因子 S [28,29] 定义为

$$S = \frac{\int P_1(\omega) P_2(\omega)}{\int P_1(\omega) \int P_2(\omega)}, \quad (6)$$

其中 P_1 和 P_2 是频率为 ω 的 GaN 和 AlN 的 PDOS. 如图 1 所示, GaN/AlN 异质结被分成几个不同的区域. 实际上, GaN 和 AlN 界面上的原子是分开描述的, 本研究选择靠近界面的固定距离的原子作为研究对象, 以便于更精确的计算分析. 接下来对

比分析 AlN 的整体 PDOS 与 GaN 的整体 PDOS, 以及 AlN 和 GaN 的界面附近的 PDOS 的重叠图. 这些分析有助于揭示界面上声子模的相互作用和耦合, 从而为优化异质结的导热性能提供理论依据.

3 结果与分析

3.1 温度对 GaN/AlN 异质结构 ITR 影响

图 3 显示了从 MD 模拟获得的 ITR 的温度依赖性. Wang 等 [13] 研究了具有三种不同界面形貌的 GaN/AlN 异质结的 ITR, 发现 ITR 随温度升高而降低. 这一趋势可以归因于非弹性声子散射的增强和更高温度下附加激发声子模的参与. Bao 等 [15] 提出利用 NEMD 和基于第一性原理的蒙特卡罗模拟进一步研究了 GaN/AlN 界面的 ITR 与温度的关系, 发现 ITR 与温度呈负相关. Xue 等 [22] 采用 NEMD 方法, 研究结果同样显示 ITR 随温度升高而持续下降. 本研究基于 NEMD 计算得到的 ITR 与上述文献结果在同一数量级, 温度变化规律保持一致 [30], 进一步验证了模型和计算方法的可靠性.

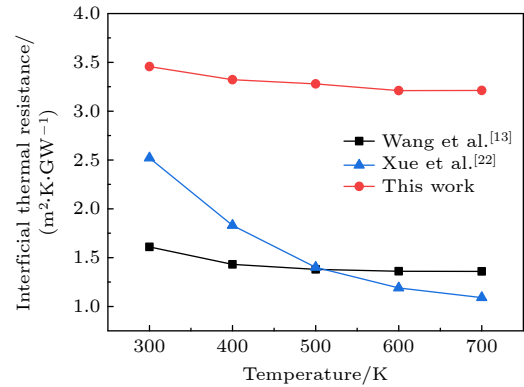


图 3 GaN/AlN 异质结 ITR 的温度依赖性

Fig. 3. Temperature dependence of the ITR in a smooth GaN/AlN heterojunction.

本研究计算的 ITR 的温度变化趋势与文献报道的一致. 需要指出的是, 不同研究获得的 ITR 绝对数值存在一定差异, 这主要源于模拟体系尺寸、界面原子结构以及边界条件的不同. 在纳米尺度下, 界面热阻对体系尺度高度敏感, 有限尺寸效应会显著影响声子输运特性. 然而, 这些差异并不影响不同研究中一致观察到的 ITR 随温度升高而降低的基本物理规律.

3.2 尺寸对 GaN/AlN 异质结构 ITR 影响

本研究通过 NEMD 模拟研究了尺寸效应对 GaN/AlN 异质 ITR 的影响. GaN/AlN 异质结在 z 方向 (垂直于界面) 展开, 并计算了相应的 ITR. 图 4 显示了尺寸变化对 GaN/AlN 的 ITR 的影响. 图 4(a) 给出了 GaN 和 AlN 在与厚度方向对应的 z 方向上同时展开后的计算结果. 随着 GaN/AlN 异质结中的层数从 3 增加到 8, ITR 显著降低, 从 $3.922 \text{ m}^2 \cdot \text{K} \cdot \text{GW}^{-1}$ 下降到约 $3.445 \text{ m}^2 \cdot \text{K} \cdot \text{GW}^{-1}$, 减少了约 12.2%. 刘东静等^[31] 通过分子动力学模拟研究表明, 随着 AlN 层数由 2 层增加至 11 层, GaN/AlN 界面热阻逐渐降低并在约 10 层后趋于稳定. Shi 等^[32] 以碳纳米管/石墨烯异质结构为研究对象, 发现当体系尺寸在 0—100 nm 范围内变化时, 界面热阻随尺寸增加逐渐降低并最终趋于稳定. 尽管不同研究中异质结构的界面组成存在差异, 但尺寸效应对界面热阻的影响呈现出一致的变

化趋势. 这种变化突出了尺寸效应对 ITR 的影响, 并揭示了随尺寸的变化, 界面上声子散射和热传递更加复杂.

为了阐明 GaN/AlN 异质结界面热阻变化的机制, 本研究计算了界面材料和块体材料的重叠因子 S (如图 4(b) 所示), 并分析了不同厚度条件下 GaN 和 AlN 界面的 PDOS 重叠区. 图 4(c) 显示, 随着界面层厚度的增加, AlN 界面处的 PDOS 分布变化不明显, 说明 AlN 界面层的声子态密度在厚度变化下保持相对稳定. 相比之下, GaN 界面层的 PDOS 随着界面层厚度的增加而下降, 尤其在 15—20 THz 和 25 THz 附近的频率范围内. 界面处 GaN 的 PDOS 面积逐渐减小表明其声子态密度降低, 界面声子散射效应随厚度增加而减弱. 散射效应的减弱有助于增强 GaN 和 AlN 界面声子的耦合, 从而提高声子传输效率, 降低界面热阻.

结合图 4(b) 和图 4(d) 可以看出, 随着 GaN/

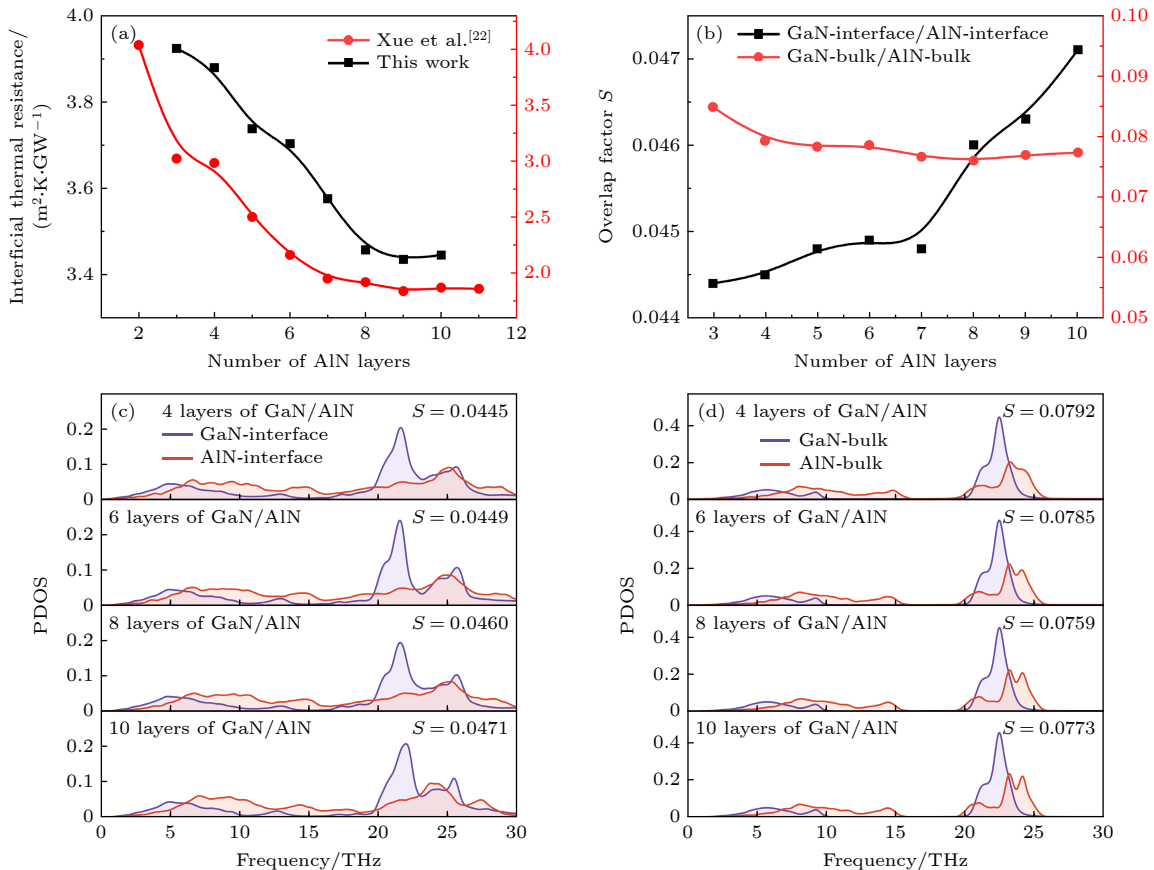


图 4 (a) ITR 与异质结构 AlN 层数的关系; (b) 不同厚度下 GaN/AlN 界面层及块体重叠因子 S 变化趋势; (c), (d) 不同厚度下界面材料和块体材料的 PDOS 重叠区域及重叠因子 S

Fig. 4. (a) ITR as a function of the number of AlN layers in the heterojunction; (b) variation of the overlap factor S for both interface and bulk layers of GaN/AlN with different thicknesses; (c), (d) PDOS overlap regions and overlap factor S of interface and bulk materials for different thicknesses.

AlN 异质结层数从 3 层增加至 10 层, 界面材料的重叠因子 S 逐渐上升, 而块体材料整体变化趋势较弱, 仅呈现一定波动. 界面 S 的持续升高说明界面两侧振动态匹配程度增强, 界面声子耦合强度随之提高, 从而促进跨界面声子的有效传输, 是界面热阻降低的主要原因. 相比之下块体区域对界面热阻变化的直接贡献较小. 块体分析主要作为对照组, 用于区分界面调制效应与整体材料本征特性的差异, 而非界面热阻变化的主导因素. 这表明随着层数增加, 界面声子的耦合强度增强, 但整体材料的声子态密度并未受到明显影响. 总体而言, 界面 PDOS 的变化以及界面材料重叠因子 S 的上升共同促进了界面声子的有效传输, 从而降低了 GaN/AlN 异质结的界面热阻. 相比之下, 块体材料的 S 变化不明显, 说明整体材料声子态密度相对稳定, 对界面热阻的直接影响较小, 但可作为界面效应变化的对照参考.

3.3 缺陷对 GaN/AlN 异质结构 ITR 影响

在实际晶体材料和器件制备过程中, 由于生长条件、晶格失配以及热应力等因素的影响, 界面及其邻近区域中不可避免地会引入各类结构缺陷. 这些缺陷的存在会改变声子的传播通道并调制界面耦合强度, 从而对界面热输运效率产生重要影响. 此前, 刘东静等^[31]采用非平衡分子动力学方法, 对石墨烯/GaN 异质结构的界面热输运行为进行了研究, 并从微观机制层面探讨了缺陷对界面热边界导热率的影响. 揭示了适度缺陷对界面热传输的促进作用, 为理解异质界面声子输运提供了理论依据.

为进一步揭示缺陷对 GaN/AlN 异质界面热输运的影响机制, 本文在 GaN/AlN 异质结构中引入不同浓度 (0%—25%) 的空位缺陷, 在 GaN 侧界面附近通过随机去除 Ga 与 N 原子构建空位缺陷, 而 AlN 层始终保持为无缺陷的理想晶体结构. 在固定 GaN/AlN 异质结层数为 10 的条件下, 系统考察了 GaN 空位缺陷浓度变化对 ITR 的影响. 如图 5(a) 所示, GaN/AlN 异质结构的界面热阻随 GaN 空位缺陷率呈现明显的非单调变化特征. 当缺陷率由 0% 增加至 5% 时 ITR 略微降低; 当缺陷率进一步提高时 ITR 明显上升. 适当的 GaN 空位缺陷有助于降低 GaN/AlN 异质结构的界面热阻; 相比之下, 无缺陷体系的 ITR 为 $3.45 \text{ m}^2 \cdot \text{K} \cdot \text{GW}^{-1}$; 当缺陷率增加至 5% 时, ITR 降至最小值 $3.39 \text{ m}^2 \cdot \text{K} \cdot \text{GW}^{-1}$.

然而, 随着缺陷率进一步提高, ITR 出现显著上升趋势. 当缺陷率达到 25% 时, 界面热阻较无缺陷体系增加约 11%.

为阐明图 5(a) 中界面热阻随空位缺陷率呈现的非单调变化规律, 进一步分析了不同缺陷率下 GaN/AlN 界面层及块体区域的 PDOS 及其重叠因子 S , 结果如图 5(b)—(d) 所示. 界面热阻本质上取决于声子在界面处的透射特性, 因此界面层 PDOS 直接反映界面声子耦合强度, 而块体 PDOS 则决定到达界面的声子供给能力. 综合分析表明, 空位缺陷对界面热输运的影响表现为两种相互竞争的物理机制: 1) 界面两侧声子态密度变化机制; 2) 缺陷诱导的散射与局域化增强机制.

当空位缺陷率较低 (0%—5%) 时, 界面热输运主要受声子谱重构效应控制. 少量空位引入力常数扰动, 使部分高频振动模式受到抑制, GaN 界面层在 20—25 THz 区间的 PDOS 明显降低. 该变化表明高频散射声子态减少, 界面两侧在中频区间的谱匹配程度相对提高. 尽管整体重叠因子 S 略有下降, 但有效参与输运的传播声子频率窗口得到优化, 从而提高声子透射效率, 导致 ITR 略有降低^[30,31].

随着缺陷率进一步增加 (>5%), 缺陷诱导的无序散射机制逐渐占主导^[33]. 大量空位显著破坏晶格周期性, 导致声子弹性散射增加、声子平均自由程缩短, 从而降低有效透射通道数量. GaN 界面层在 15—20 THz 区间的 PDOS 增强, 表明局域振动模数量增加, 而这些局域模难以有效参与跨界面输运. 同时界面层与块体区域的重叠因子 S 明显减小, 界面耦合强度持续下降.

从块体区域来看, PDOS 随缺陷率呈现先增加后降低的趋势. 在低缺陷率下, 适度缺陷引入的局域振动模增加了可参与输运的声子态密度, 增强声子向界面的供给能力; 而在高缺陷率下, 强无序导致传播声子数量显著减少, 声子从块体向界面的输运能力明显削弱. 界面耦合减弱与声子供给能力下降的协同作用最终导致 ITR 显著升高.

综上, ITR 的非单调变化源于声子谱重构与缺陷散射增强两种机制的竞争: 低缺陷率下谱匹配优化促进界面热输运, 而高缺陷率下无序散射与局域化效应占主导, 抑制声子跨界面传输.

本文还研究了空位缺陷区域的位置对 GaN/AlN 异质界面热阻的影响. 空位缺陷区域宽度设置为 5 Å, 缺陷浓度为 20%, 并定义了一个长度 L , 表

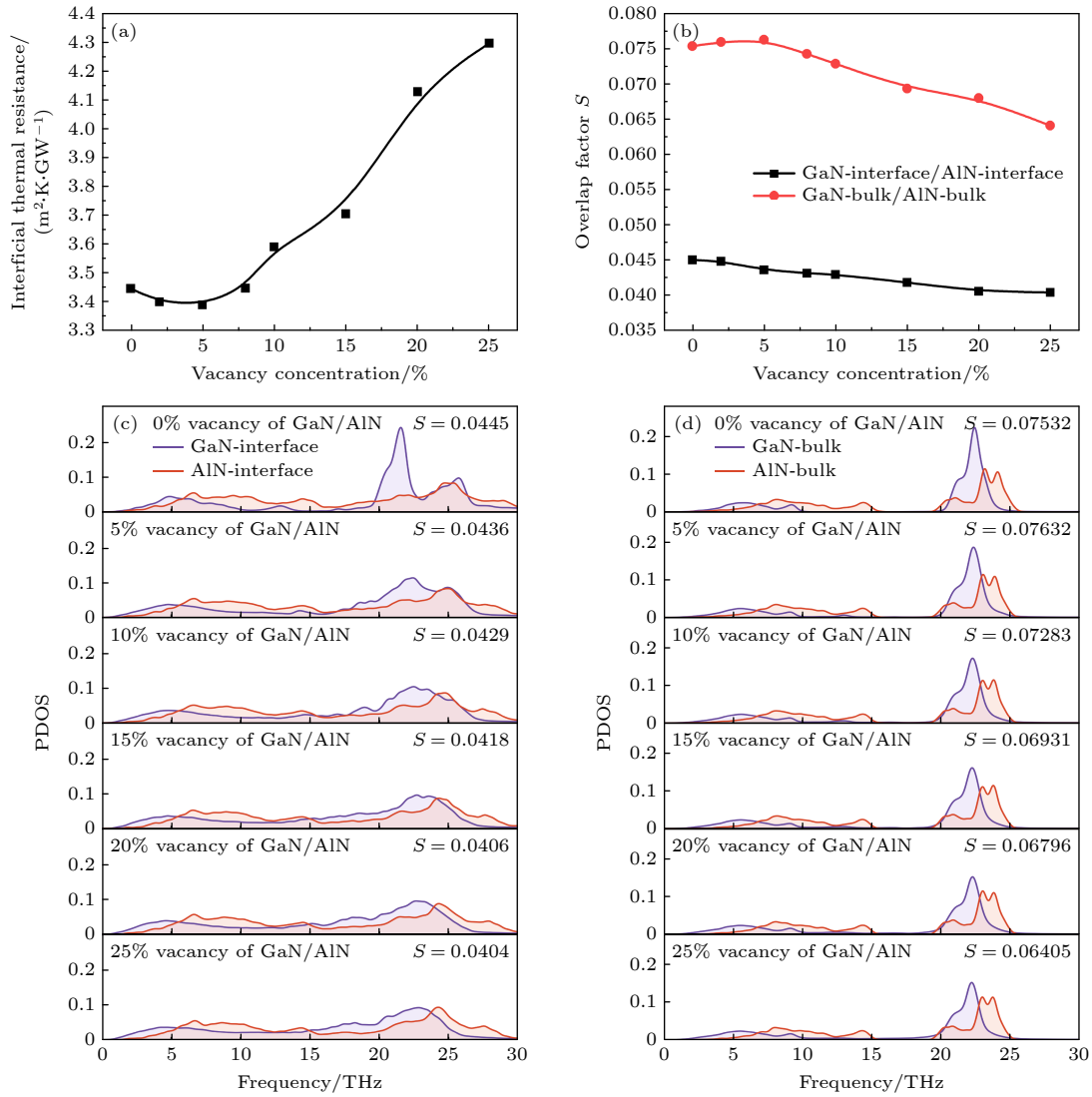


图 5 (a) GaN/AlN 异质结构 ITR 随 GaN 空位缺陷率的变化; (b) 不同 GaN 空位缺陷率下, 界面层与块体区域的 PDOS 重叠因子 S 的变化趋势; (c), (d) 不同 GaN 空位缺陷率下, 界面层与块体区域的 PDOS 重叠区域及其对应的重叠因子 S

Fig. 5. (a) ITR of GaN/AlN heterostructures as a function of GaN vacancy concentration; (b) variation of the PDOS overlap factor S for the interface layer and bulk region at different GaN vacancy concentrations; (c), (d) PDOS overlap regions and the corresponding overlap factor S for the interface layer and bulk region under different GaN vacancy concentrations.

示空位缺陷区域与界面之间的距离. 缺陷区域逐渐远离界面并在 GaN 中引入空位缺陷, 计算结果如图 6 所示. 结果表明, 随着缺陷区域距离界面 L 的增加, 界面热阻逐渐下降并趋于稳定, 这说明缺陷对界面热阻的影响随距离减弱. 进一步分析发现, 该过程存在一个特征临界距离 $L_d \approx 5 \text{ nm}$. 当 $L < L_d$ 时, 界面热阻随着缺陷区域远离界面的增加而显著下降; 当 $L \geq L_d$ 时, 界面热阻变化趋缓, 说明界面热运输对远离界面的缺陷的敏感性明显降低. 这是因为在声子到达缺陷区域之前, 可以通过缺陷前的缓冲区进行固有声子-声子散射. 当缓冲区足够厚时, 即使空位缺陷位于界面较远的位置, 声子经过

缺陷散射后仍可能通过缓冲区重新散射到本征态, 从而界面热阻不再显著增加. 由于本研究中设置的空位缺陷区域较短 ($5 \text{ \AA}$), 即使较短的缓冲区也足以降低缺陷对界面热阻的影响, 但并不意味着界面热阻完全恢复到无缺陷水平.

这一结果进一步证实, 界面前声子-空位散射是 GaN/AlN 异质界面热阻增加的主要原因, 而非界面本身的效应. 以往研究表明, 在界面引入空位或其他适宜质量原子可增强界面热运输 [30,33], 与该结论相比, 本研究强调了缺陷位置对界面热阻的关键作用.

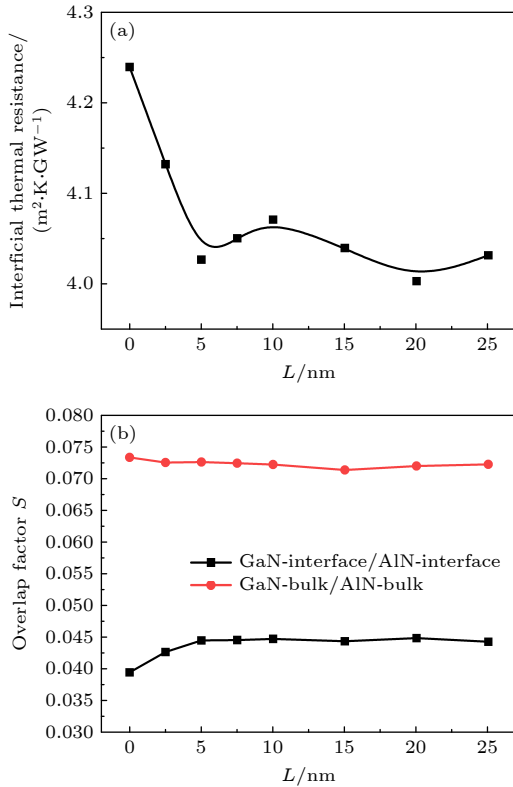


图6 (a) ITR与不同空位缺陷区域距离 L 的关系; (b)不同空位缺陷区域距离下, 界面层与块体区域的PDOS重叠因子 S 的变化趋势

Fig. 6. (a) Relationship between the ITR and the distance L of the vacancy defect region from the interface; (b) variation of the PDOS overlap factor S between the interface layer and bulk region with different distances of the vacancy defect region from the interface.

4 结 论

本文基于非平衡分子动力学方法, 系统研究了 GaN/AlN 异质结构界面热阻在不同温度、尺寸及 GaN 侧空位缺陷条件下的演化规律, 并结合声子态密度以及重叠因子 S 等物理量对界面热输运机制进行了深入分析, 主要结论如下.

1) 温度效应: 随着温度升高, ITR 显著降低, 表明高温下非弹性声子散射增强及更多高频声子模参与, 有助于提高界面声子透射能力. 该趋势与已有理论与模拟结果一致, 验证了模型与方法的可靠性.

2) 尺寸效应: 随着 AlN 层数增加, ITR 明显下降并在 AlN 为 8 层时趋于稳定. 界面层 PDOS 重构及重叠因子 S 的升高表明界面声子耦合增强, 而块体 PDOS 变化有限, 对界面热阻的影响主要体现在声子供给层面.

3) 缺陷效应: 在 GaN 侧靠近界面引入适量空位缺陷 (约 5%) 可降低 ITR, 而高缺陷率显著增加界面热阻. 低缺陷率下, 局域振动模增强了界面声子耦合; 高缺陷率下, 强无序导致声子散射增强, 显著抑制界面热输运. 并且研究了空位缺陷区域的位置对 GaN/AlN 异质界面热阻的影响. 随着缺陷区域距离界面 L 的增加, 界面热阻逐渐下降并在一个特征临界距离 $L_d \approx 5$ nm 趋于稳定. 当 $L < L_d$ 时, 界面热阻随着缺陷区域远离界面的增加而显著下降; 当 $L \geq L_d$ 时, 界面热阻变化趋缓, 说明界面热输运对远离界面的缺陷的敏感性明显降低.

本研究揭示了 GaN/AlN 异质结构中界面声子耦合、尺寸效应及缺陷调控对热输运的内在机制, 为高热导 GaN 基器件的界面设计与缺陷工程优化提供了理论依据.

参考文献

- [1] Garimella S V, Persoons T, Weibel J A, Gektin V 2017 *IEEE Trans. Compon. Pack. Manuf. Technol.* **7** 1191
- [2] Moriya A K, Gardner M C, Anvari B, Liu L, Yepes A G, Doval-Gandoy J, Toliyat H A 2019 *IEEE Trans. Transp. Electr.* **5** 3
- [3] Tsao J Y, Chowdhury S, Hollis M A, Jena D, Johnson N M, Jones K A, Kaplar R J, Rajan S, Van de Walle C G, Bellotti E, Chua C L, Collazo R, Coltrin M E, Cooper J A, Evans K R, Graham S, Grotjohn T A, Heller E R, Higashiwaki M, Islam M S, Juodawlkis P W, Khan M A, Koehler A D, Leach J H, Mishra U K, Nemanich R J, Pilawa-Podgurski R C N, Shealy J B, Sitar Z, Tadjer M J, Witulski A F, Wraback M, Simmons J A 2018 *Adv. Electron. Mater.* **4** 1600501
- [4] Mishra U, Parikh P, Wu Y F 2002 *Proc. IEEE* **90** 1022
- [5] Husna Hamza K, Nirmal D 2020 *AEU-Int. J. Electron. Commun.* **116** 153040
- [6] Zhang H, Guo Z 2022 *Int. J. Heat Mass Transf.* **186** 122476
- [7] Meneghini M, De Santi C, Abid I, Buffolo M, Cioni M, Khadar R A, Nela L, Zagni N, Chini A, Medjdoub F, Meneghesso G, Verzellesi G, Zanoni E, Matioli E 2021 *J. Appl. Phys.* **130** 181101
- [8] Hu X, Ge L, Liu Z, Li M, Wang Y, Han S, Peng Y, Xu M, Hu X, Tang G, Wang S, Wang X, Xu X 2024 *Carbon* **218** 118755
- [9] Cho J, Li Z, Bozorg-Grayeli E, Kodama T, Francis D, Ejeckam F, Faili F, Asheghi M, Goodson K E 2013 *IEEE Trans. Compon. Packag. Manuf. Technol.* **3** 79
- [10] Cho J, Francis D, Altman D H, Asheghi M, Goodson K E 2017 *J. Appl. Phys.* **121** 055105
- [11] Cho J, Won Y, Francis D, Asheghi M, Goodson K E 2014 *IEEE Compound Semiconductor Integrated Circuit Symposium (CSICS) (IEEE)* La Jolla, CA, USA, October 19–22, 2014 p1
- [12] Swartz E T, Pohl R O 1989 *Rev. Mod. Phys.* **61** 605
- [13] Wang Q, Wang X, Liu X, Zhang J 2021 *J. Appl. Phys.* **129** 235102
- [14] Li M, Pan K, Ge Y, Huynh K, Goorsky M S, Fisher T S, Hu

- Y 2024 *Appl. Phys. Lett.* **125** 032104
- [15] Bao W, Wang Z, Tang D 2022 *Int. J. Heat Mass Transf.* **183** 122090
- [16] Li R, Hussain K, Liao M E, et al. 2024 *ACS Appl. Mater. Interfaces* **16** 8109
- [17] Yates L, Anderson J, Gu X, et al. 2018 *ACS Appl. Mater. Interfaces* **10** 24302
- [18] Mohanty S K, Chen Y Y, Yeh P H, Horng R H 2019 *Sci. Rep.* **9** 19691
- [19] Wang L, Zhang Z, Su X, et al. 2025 *Appl. Surf. Sci.* **686** 162106
- [20] Zhan T, Xu M, Cao Z, et al. 2023 *Micromachines* **14** 2076
- [21] Kresse G, Furthmüller J 1996 *Phys. Rev. B* **54** 11169
- [22] Xue J, Li F, Fan A, Ma W, Zhang X 2025 *Int. J. Heat Mass Transf.* **239** 126629
- [23] Plimpton S 1995 *J. Comput. Phys.* **117** 1
- [24] Albe K, Nordlund K, Nord J, Kuronen A 2002 *Phys. Rev. B* **66** 035205
- [25] Tungare M, Shi Y, Tripathi N, Suvarna P, Shahedipour-Sandvik F 2011 *Phys. Status Solidi(a)* **208** 1569
- [26] Rappé A K, Casewit C J, Colwell K, Goddard III W A, Skiff W M 1992 *J. Am. Chem. Soc.* **114** 10024
- [27] Yang Y, Ma J, Yang J, Zhang Y 2022 *ACS Appl. Mater. Interfaces* **14** 45742
- [28] Han D, Wang X, Ding W, Chen Y, Zhang J, Xin G, Cheng L 2018 *Nanotechnology* **30** 075403
- [29] Wang X, Zhang J, Chen Y, Chan P K 2017 *Nanoscale* **9** 2262
- [30] Liu D J, Wang P B, Hu Z L, Lu J Q, Xiao Y, Huang J Q 2025 *Acta Phys. Sin.* **74** 210201 (in Chinese) [刘东静, 王鹏博, 胡志亮, 陆佳琪, 肖煜, 黄家强 2025 物理学报 **74** 210201]
- [31] Liu D J, Zhou F, Hu Z L, Huang J Q 2024 *Acta Phys. Sin.* **73** 137901 (in Chinese) [刘东静, 周福, 胡志亮, 黄家强 2024 物理学报 **73** 137901]
- [32] Shi J, Zhong Y, Fisher T S, Ruan X 2018 *ACS Appl. Mater. Interfaces* **10** 15226
- [33] Yang C, Wang J, Ma D, Li Z, He Z, Liu L, Fu Z, Yang J Y 2023 *Int. J. Heat Mass Transf.* **214** 124433

Molecular dynamics study of interfacial thermal transport in GaN/AlN heterostructures^{*}

WANG Zhihe[#] LI Xuejie[#] GAO Zhibin[†]

(State Key Laboratory for Mechanical Behavior of Materials, State Key Laboratory of Porous Metal Materials, School of Materials Science and Engineering, Xi'an Jiaotong University, Xi'an 710049, China)

(Received 2 January 2026; revised manuscript received 25 February 2026)

Abstract

With the continuous increase in power density, operating frequency, and integration level of electronic devices, the heat flux generated in GaN-based devices rises rapidly, making thermal management a critical challenge that limits device reliability and performance. Interfacial thermal resistance (ITR) plays a key role in determining the overall heat dissipation efficiency of heterostructures. In this work, the interfacial thermal transport properties of GaN/AlN heterostructures are systematically investigated using non-equilibrium molecular dynamics simulations. The effects of temperature, structural size, and vacancy defects on the ITR are analyzed in detail. The simulation results show that the ITR decreases monotonically as the temperature increases from 300 K to 700 K, which is mainly attributed to enhanced inelastic phonon scattering and the activation of additional phonon modes at elevated temperatures. The size-dependent analysis indicates that the ITR decreases significantly with increasing AlN layer thickness and gradually converges when the number of AlN layers reaches approximately eight. This behavior is closely related to the enhanced phonon coupling and improved phonon spectral matching across the interface. Furthermore, the introduction of vacancy defects on the GaN side near the interface leads to a non-monotonic variation in ITR. When the vacancy concentration increases from 0% to 5%, the ITR slightly decreases due to improved phonon transmission channels. However, further increasing the defect concentration up to 25% significantly enhances phonon scattering and lattice disorder, resulting in an approximately 11% increase in ITR. In addition, the influence of defect position is examined by varying the distance between the defect region and the interface. The results show that the ITR gradually decreases as the defect region moves away from the interface and stabilizes when the distance exceeds approximately 5 nm. By combining phonon density of states analysis with the phonon spectral overlap factor S , the underlying mechanisms governing interfacial phonon transport are clarified. The present work provides theoretical insights into the modulation of interfacial heat transport in GaN-based heterostructures and offers guidance for thermal management and interface engineering in high-power electronic devices.

Keywords: heterostructure, interfacial thermal resistance, size effect, vacancy defects

DOI: 10.7498/aps.75.20260003

CSTR: 32037.14.aps.75.20260003

^{*} Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 52595632) and the Key Research and Development Program of China (Grant No. 2023YFB4604100).

[#] These authors contributed equally.

[†] Corresponding author. E-mail: zhibin.gao@xjtu.edu.cn

GaN/AlN异质结构界面热输运性质的分子动力学研究

王治贺 李雪洁 高志斌

Molecular dynamics study of interfacial thermal transport in GaN/AlN heterostructures

WANG Zhihe LI Xuejie GAO Zhibin

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 75, 120706 (2026) DOI: 10.7498/aps.75.20260003

CSTR: 32037.14.aps.75.20260003

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.75.20260003>

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

石墨烯/GaN异质结构界面热输运性质的分子动力学研究

Molecular dynamics study of interfacial thermal transport properties of graphene/GaN heterostructure

物理学报. 2024, 73(13): 137901 <https://doi.org/10.7498/aps.73.20240021>

基于分子动力学的氮化镓/石墨烯/金刚石界面热导研究

Interfacial thermal conductance of gallium nitride/graphene/diamond heterostructure based on molecular dynamics simulation

物理学报. 2024, 73(15): 150202 <https://doi.org/10.7498/aps.73.20240515>

氮化镓/石墨烯/碳化硅异质界面热输运特性的分子动力学研究

Molecular dynamics of heat transport properties at gallium nitride/graphene/silicon carbide heterointerface

物理学报. 2023, 72(15): 157901 <https://doi.org/10.7498/aps.72.20230537>

氮化镓/石墨烯/金刚石异质界面热输运调控研究

Thermal transport regulation at GaN/graphene/diamond heterojunction interfaces

物理学报. 2025, 74(21): 157901 <https://doi.org/10.7498/aps.74.20250895>

混合失配模型预测金属/半导体界面热导

Mixed mismatch model predicted interfacial thermal conductance of metal/semiconductor interface

物理学报. 2023, 72(3): <https://doi.org/10.7498/aps.72.20221981>

体空位缺陷对氧化铝二次电子发射特性的影响分析

Analysis of effect of bulk vacancy defect on secondary electron emission characteristics of Al_2O_3

物理学报. 2024, 73(15): 157902 <https://doi.org/10.7498/aps.73.20240577>