

β -Ga₂O₃/Si 异质界面热导的晶面取向依赖性及声子输运机制 *

屈永锋^{1)†} 任博权¹⁾ 陈海霞¹⁾ 丁继军¹⁾ 党博²⁾ 胡文波³⁾
王宏兴³⁾

1) (西安石油大学理学院, 陕西省油气井测控技术重点实验室, 西安 710065)

2) (西安石油大学电子工程学院, 西安 710065)

3) (西安交通大学电子科学与工程学院, 电子物理与器件教育部重点实验室, 西安 710049)

β -Ga₂O₃ 具有超宽禁带和高击穿场强等优势, 在高压大功率电子器件领域具有广阔应用潜力, 但其较低热导率易引发器件自热效应。 β -Ga₂O₃/Si 异质集成为 β -Ga₂O₃ 器件与 Si 基工艺平台兼容提供了可行途径, 而界面热阻是影响其热管理性能的关键因素。为揭示晶面取向对 β -Ga₂O₃/Si 异质界面热输运的影响, 构建了 (100)、(010) 和 (001) 晶面 β -Ga₂O₃/Si 异质界面模型, 并采用非平衡分子动力学方法计算体系的界面热导。结果表明, 300 K 下 (010) 晶面界面热导最高, 约为 288 MW·m⁻²·K⁻¹; (001) 晶面次之, 约为 242 MW·m⁻²·K⁻¹; (100) 晶面最低, 约为 122 MW·m⁻²·K⁻¹。声子态密度和谱分解热导分析表明, 不同晶面界面热导差异主要来源于界面两侧声子谱匹配和中低频声子透射能力的不同, 其中 20 THz 以下声子贡献占主导。温度升高总体上增强界面热导, 但不改变晶面取向依赖关系。这些结果表明, 晶面取向是调控 β -Ga₂O₃/Si 异质界面热输运性能的重要因素, 可为 β -Ga₂O₃/Si 异质集成器件的界面热管理和晶面选择提供理论参考。

关键词: β -Ga₂O₃/Si 异质界面, 界面热导, 晶面取向, 声子输运, 非平衡分子动力学

* 国家自然科学基金 (批准号: 62541412, 12504393)、西安市科学技术协会青年人才托举计划项目 (批准号: 0959202613169)、陕西省科学技术协会青年人才托举计划项目 (批准号: 20260511)、高校青年教师科研创新能力支持项目 (U40) (批准号: SRICSPYF-BS2025031) 和油气井智能测控技术与装备青年科研创新团队 (批准号: 2022QNKYCXTD02) 资助的课题

† 通信作者. E-mail: yfqu@xsyu.edu.cn

1 引 言

$\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$ 是近年来受到广泛关注的超宽禁带半导体材料, 具有约 4.7–4.9 eV 的禁带宽度和较高的理论击穿场强, 在高压、大功率和高温电子器件领域具有重要应用潜力^[1–3]。与 SiC 和 GaN 等宽禁带半导体相比, $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$ 还具有可通过熔体法制备大尺寸单晶衬底、材料制备成本较低等优势, 因此被认为是下一代高压功率器件的重要候选材料之一^[4–6]。然而, $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$ 的本征热导率较低, 通常仅为 $10\text{--}30\text{ W}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$, 远低于 SiC、GaN 和金刚石等宽禁带或超宽禁带半导体材料^[7–9]。同时, 由于 $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$ 具有单斜晶体结构, 其热导率表现出明显的晶向各向异性。低热导率和热输运各向异性使 $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$ 器件在高功率密度运行条件下容易产生显著自热效应, 进而影响器件输出特性、热稳定性和长期可靠性^[10,11]。因此, 如何改善 $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$ 基器件的热管理能力, 是推动其实际应用中需要解决的关键问题。

异质集成是缓解 $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$ 低热导率限制的重要途径之一。通过将 $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$ 与 Si、SiC、金刚石等衬底材料结合, 可以在一定程度上优化热量传输通道并改善器件散热条件, 并拓展其与现有半导体工艺平台的兼容性^[12,13]。其中, Si 作为最成熟的半导体材料, 具有大尺寸晶圆、低成本和完善工艺体系等优势。 $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3/\text{Si}$ 异质结构不仅有助于推动氧化镓器件与 Si 基微电子平台集成, 也为构建新型异质结器件和片上集成器件提供了可能^[14,15]。然而, 在 $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3/\text{Si}$ 异质结构中, 热量从 $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$ 有源区向 Si 衬底传输时必须跨越异质界面。由于两侧材料在晶格结构、原子质量、键合状态和声子谱分布等方面存在明显差异, 声子在界面处会发生反射、透射和散射, 从而形成界面热阻^[16,17]。对于高功率密度 $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$ 器件而言, 界面热阻成为了限制整体散热能力的重要因素^[18–20]。

界面热阻是描述异质界面阻碍热量传输能力的重要物理量, 其大小与界面原子结构、界面键合强度、声子谱匹配程度以及温度等因素密切相关^[21,22]。已有研究表明, $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$ 的声子输运具有明显晶向依赖性, 不同晶体学方向上的声子群速度、声子态密度和热导率均存在差异^[7,23,24]。因此, 当不同晶面 $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$ 与 Si 构成异质界面时, 界面处的原子排列、振动模式耦合和声子透射能力可能发生变化, 进而导致界面热导呈现晶面取向依赖性。明确不同晶面 $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3/\text{Si}$ 界面热导的变化规律及其物理机制, 对于理解 $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$ 异质界面声子热输运和优化器件热设计具有重要意义。

目前, 关于 $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3/\text{Si}$ 异质界面热输运已有一定研究基础^[25,26]。Ma 等^[17] 采用 Landauer 公式结合声学失配模型和扩散失配模型, 计算了 $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$ 与 Si 等衬底之间的界面热导, 并指出声学阻抗失配和声子态密度失配是影响界面热导的重要因素。Xu 等^[15] 通过离子切割和表面活化键合方法制备了 $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$ 薄膜/Si 和 SiC 衬底异质集成结构, 并结合瞬态热反射测试和器件热模拟表明, 有效界面热阻对 $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$

异质集成器件散热性能具有重要影响。此外，Qu 等^[27]针对表面活化键合 $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3(100)/\text{Si}$ 异质界面，研究了退火诱导界面微结构演化及其对界面热运输的影响，指出非晶 Si 层和 Fe 原子富集会增强界面声子散射并降低界面热导。尽管上述研究为理解 $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3/\text{Si}$ 异质结构及其界面热运输提供了重要基础，但现有工作主要集中于不同衬底材料的界面热导对比、特定界面微结构对热运输的影响以及器件整体热管理性能。针对 $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3/\text{Si}$ 异质界面热导晶面取向依赖性的系统认识仍不充分。尤其是不同晶面界面热导差异的微观来源、界面附近声子谱匹配关系以及不同频率声子对界面热导的贡献规律，仍有待进一步阐明。分子动力学模拟能够从原子尺度描述界面热运输过程，并结合声子态密度和谱分解热导分析界面声子热运输行为，是研究异质界面热导机制的重要方法^[28,29]。

本文构建了 (100)、(010) 和 (001) 晶面 $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3/\text{Si}$ 异质界面模型，采用非平衡分子动力学方法计算不同晶面界面的界面热导，系统分析晶面取向对 $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3/\text{Si}$ 界面热运输性能的影响。在此基础上，结合声子态密度、谱分解热导和累积谱热导，揭示不同晶面界面热导差异的声子运输机制，并进一步考察温度对不同晶面异质界面热导贡献的影响。相关结果有助于理解 $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3/\text{Si}$ 异质界面的晶面依赖热运输规律，并可为 $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3/\text{Si}$ 异质集成器件的界面热管理和晶面选择提供理论参考。

2 模型与方法

2.1 $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3/\text{Si}$ 异质界面模型构建

为研究晶面取向对 $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3/\text{Si}$ 异质界面热运输性能的影响，本文分别构建了 (100)、(010) 和 (001) 晶面 $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$ 与 Si 形成的异质界面模型，如图1所示。 $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$ 采用单斜晶系结构（空间群 $C2/m$ ），晶格常数为 $a = 12.23 \text{ \AA}$ 、 $b = 3.04 \text{ \AA}$ 、 $c = 5.80 \text{ \AA}$ ^[30]，每个晶胞包含 20 个原子。Si 具有面心立方晶格（空间群 $Fd-3m$ ），晶格常数 $a = b = c = 5.43 \text{ \AA}$ ^[31]。建模过程中，首先分别建立不同取向的 $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$ 晶体超胞和 Si 晶体超胞，并放置于一个长度为 $194 \text{ \AA}$ 的矩形模拟域内，然后在垂直于界面的方向上进行拼接，并根据 $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$ 的特定晶体学方向对接触面积进行了相应调整，形成不同晶面 $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3/\text{Si}$ 异质界面结构，如图1所示。对于不同晶面的异质界面结构模型，通过调整 $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$ 和 Si 的面内超胞尺寸以降低晶格失配率。

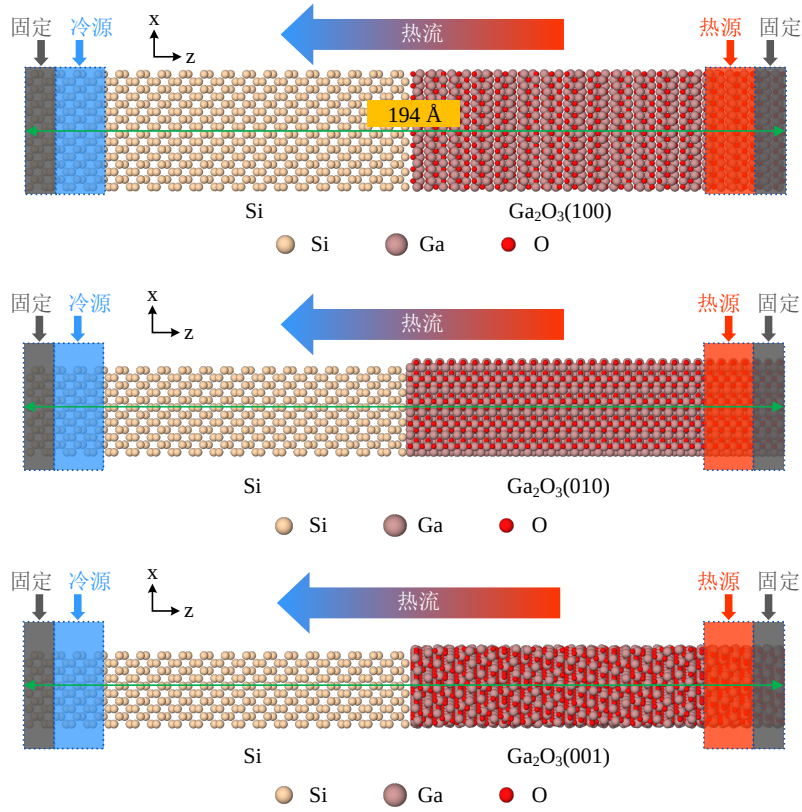


图 1 不同晶面 β -Ga₂O₃/Si 异质界面模型结构示意图

Fig. 1. Atomic structures of β -Ga₂O₃/Si heterointerfaces with different β -Ga₂O₃ crystal orientations.

2.2 非平衡分子动力学模拟

本文采用大规模原子/分子大规模并行模拟器 (Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator, LAMMPS) [32], 对 β -Ga₂O₃/Si 异质界面模型进行了分子动力学模拟计算。在研究中, 采用了 Born–Mayer–Huggins 表达式来描述 β -Ga₂O₃ 中离子间的相互作用。这种势函数因其能够准确模拟氧化物的热性能而被广泛应用 [33,34], 其一般形式表示如下 [35]

$$E = A \exp\left(\frac{-r}{\rho}\right) - \frac{C}{r^6} \quad (r < r_c) \quad (1)$$

其中 r 代表两个离子之间的距离; ρ 是与离子对相关的距离参数; A 和 C 是描述原子间相互作用强度的参数。表 1 列出了 β -Ga₂O₃ 中离子对相互作用的参数, 这些参数是通过拟合实验数据和第一性原理计算得到的 [36]。先前的研究表明, 阳离子间的相互作用通常可以忽略不计 [37]。为确保计算的准确性和物理意义, 将模拟中的截止值 r_c 设置为 16.0 Å。在计算 β -Ga₂O₃ 中 Ga³⁺ 和 O²⁻ 离子间的库仑相互作用时, 采用

了绝热核/壳 (Core/Shell, CS) 模型^[38] 以及阻尼偏移力 (Damped Shifted Force, DSF) 模型^[39], 以有效避免计算过程中可能出现的任何非物理性发散问题。DSF 模型的阻尼参数被设置为 0.2, 这一设置与 Petkov^[40] 等人在模拟 $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$ 时所采用的参数相同。对于 Si 衬底中的 Si-Si 原子间相互作用, 采用了多体 Tersoff 势^[31] 进行描述。同时, 为了描述 $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3/\text{Si}$ 异质结构的界面相互作用, 采用了 LJ 势函数。成对作用的原子的 LJ 势参数是根据 Rappé^[41] 等人开发的通用力场模型 (Universal Force Field Method Potentials, UFF) 计算得出的, Ga-Si 相互作用的 LJ 势参数为 $\epsilon = 0.017712$ eV 且 $\sigma = 3.8656$ Å。O-Si 成对相互作用的 LJ 势参数为 $\epsilon = 0.0067347$ eV 且 $\sigma = 3.4723$ Å。

表 1 Born 势的原子间相互作用参数^[36]

Table 1. Interatomic interaction parameters of Born potential.

相互作用对	A/eV	$\rho/\text{\AA}$	$C/(\text{eV} \cdot \text{\AA}^6)$
Ga-Ga	0	16	0
Ga-O	907.89	0.345	10.0
O-O	22764.0	0.149	0

采用非平衡动力学方法来计算不同晶面 $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3/\text{Si}$ 异质界面的界面热导。如图1所示, 在 $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3/\text{Si}$ 异质界面模型中, 两端的外层原子被固定作为固定层, 紧邻固定层的是热浴层, 分别设为冷源和热源, 旨在沿 Z 轴 (垂直于界面) 方向形成稳定的热通量。剩余的中间部分则为有效的热传输区域。在此设置中, Z 轴两端采用固定边界条件, 而 X 轴和 Y 轴则应用周期性边界条件。确定模拟条件后, 遵循以下热平衡步骤: 首先, 使用共轭梯度法 (Conjugate Gradient Method, CG) 对构建的模型进行能量最小化, 以确保异质界面处于稳定与最低能量状态。然后, 在 NVT 系综下, 首先使用 Nose-Hoover 恒温器让体系在 300 K 温度下弛豫 0.5 ns, 以达到初步的平衡状态。随后, 切换到 NVE 系综, 让体系在没有恒温器控制的情况下进一步弛豫 1 ns。在这一阶段, 体系的总能量保持守恒, 温度也稳定在 300 K 左右, 表明整个系统已经达到了稳定的平衡状态。为了确保模拟过程中的系统稳定性和能量守恒, 采用了时间步长为 1 fs 的速度 Verlet 积分算法^[42]。在达到热平衡状态后, 采用非平衡动力学模拟方法来计算 $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3/\text{Si}$ 异质界面的界面热导。具体步骤为: 首先, 固定异质界面模型的两端, 并分别将 $T_h = T_0(1 + \Delta)$ 和 $T_c = T_0(1 - \Delta)$ 的温度应用于热源和冷源区域, 从而通过局部 Langevin 热浴产生非平衡热通量 J 。需要说明的是, 之所以选用 Langevin 热浴方法是由于该方法可实现对热浴温度的精确控制^[43,44]。在这里, T_0 是热平衡过程中的目标温度, 也代表非平衡稳态下系统的平均温度, Δ 表示热源和冷源之间的归一化温差, 模拟中设置

为 0.1。整个非平衡动力学模拟过程持续 10 ns，以确保系统达到具有稳定温度梯度的非平衡稳态。一旦达到此稳态，记录最后 4 ns 的温度分布以及从 Langevin 热浴中提取的能量值数据。然后，根据公式 2 就可以计算出 $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3/\text{Si}$ 异质界面的界面热导 G ：

$$G = \frac{J}{\Delta T} = \frac{dE}{A \cdot \Delta T \cdot dt} \quad (2)$$

为确保计算结果的准确性，本文通过随机分配的方式为原子赋予初始速度分布，并对每个模型都执行了三次独立的模拟。这种方法旨在有效降低统计误差，并求得在不同初始条件下的平均界面热导值，从而提高数据的可靠性和精度^[43,45]。

3 结果与讨论

3.1 晶面取向对 $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3/\text{Si}$ 界面热导的影响

为了研究 $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3/\text{Si}$ 异质结构界面的晶面依赖性热输运特性，首先计算异质模型中的温度分布。通过将整个模型在沿热流传播方向上分成 40 层，随后基于以下公式计算出每个层内原子的温度：

$$T = \frac{1}{3Nk_B} \sum_{i=1}^N m_i v_i^2 \quad (3)$$

其中， N 和 k_B 分别表示特定层的原子数和玻尔兹曼常数； m 和 v 分别代表原子质量和速度。图 2 为不同晶面 $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3/\text{Si}$ 异质结构的温度分布及热源和冷源的累积能量随时间的变化情况。在达到非平衡稳态后，沿热流传播方向绘制了温度分布曲线，如图 2 (a) 所示。在非平衡稳态下，热量从 $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$ 区域的热源端持续输入，沿着传热区域流动，并最终从 Si 衬底区域的热沉端输出。随着热量从 $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$ 区域流向 Si 衬底区域，温度也呈现出稳定的下降趋势。然而，从图 2 (a) 中可以进一步看出，在 $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3/\text{Si}$ 界面处，温度分布出现了明显的不连续性，这是由于 Kapitza 热阻导致的。通过拟合和外推传热区域内界面两侧材料的温度数据，可以获得 $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$ 和 Si 界面之间的温度差 ΔT 。图 2 (b) 展示了热源和冷源的累积能量交换情况，可以看出源和冷源的累积能量曲线关于参考线 $E = 0$ 对称，证明了在应用 Langevin 热浴产生温度梯度的过程中，体系总能量的守恒，热源和冷源的能量交换速率基本保持不变。这一结果表明体系内部已经建立了稳定热流。因此，可根据稳态热流密度和界面温度突变计算体系的界面热导。此外，不同晶面的 $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3/\text{Si}$ 异质结构界面的温度差以及累积能量存在显著差异，这表明其界面热传导特性明显不同。

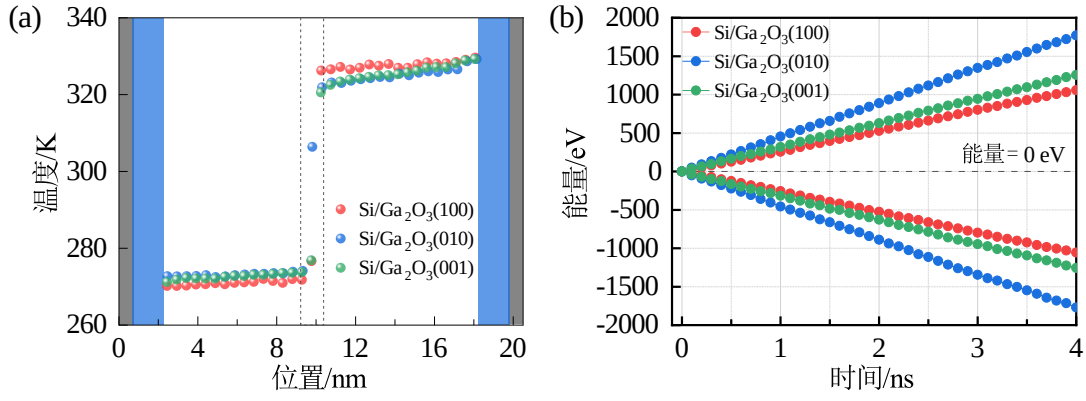


图 2 β -Ga₂O₃/Si 异质界面非平衡分子动力学模拟结果 (a) 沿热流方向的温度分布; (b) 热源区和冷源区能量演化

Fig. 2. Nonequilibrium molecular dynamics simulation results of β -Ga₂O₃/Si heterointerfaces: (a) temperature distribution along the heat transport direction; (b) energy evolution of the heat source and heat sink.

图 3 展示了 300 K 下不同晶面 β -Ga₂O₃/Si 异质界面的界面热导。可以看出, β -Ga₂O₃ 晶面取向对界面热导具有显著影响。三种界面中, (010) 晶面 β -Ga₂O₃/Si 界面表现出最高的界面热导值, 约为 288 MW · m⁻² · K⁻¹; (001) 晶面界面的界面热导值次之, 约为 242 MW · m⁻² · K⁻¹; (100) 晶面界面的界面热导值最低, 约为 122 MW · m⁻² · K⁻¹。这一结果表明, 即使界面两侧材料组成相同, 仅改变 β -Ga₂O₃ 的晶面取向, 也会显著影响声子跨 β -Ga₂O₃/Si 界面的传输效率。

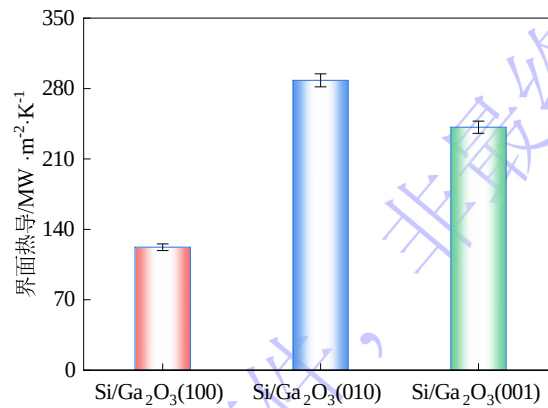


图 3 不同晶面 β -Ga₂O₃/Si 异质结构的界面热导

Fig. 3. Interfacial thermal conductance of β -Ga₂O₃/Si heterostructures with different β -Ga₂O₃ crystal orientations.

本文获得的 $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3/\text{Si}$ 异质结构在 300 K 时的界面热导值与 Ma 等^[17] 基于 Landauer 公式结合 DMM 理论计算的结果 ($470 \text{ MW} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{K}^{-1}$) 处于同一量级, 但整体低于该理论预测值。该差异主要来源于计算方法和界面描述方式不同, DMM 通常基于理想界面和弹性漫散射假设, 而非平衡动力学模拟能够显式考虑界面原子结构、局域振动耦合以及非谐效应。此外, 与 Xu 等^[15] 采用瞬态热反射法测量的含有 Al_2O_3 中间层的 $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3/\text{Si}$ 异质结构的有效界面热导结果 (约为 $100 \text{ MW} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{K}^{-1}$) 相比, 本文计算的界面热导值整体较高。造成这一差异的可能原因是, 实际样品的界面处存在多种缺陷, 包括点缺陷、位错、晶界等。这些缺陷对界面附近的声子输运有显著影响, 导致实际样品的界面热导值低于理论计算值。

3.2 界面热导各向异性的声子谱机制

为了阐明不同晶面取向对 $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3/\text{Si}$ 异质界面热输运特性的影响机制, 本文进一步分析了声子态密度 (Phonon Density of States, PDOS)。PDOS 是揭示声子传输机制的重要工具, 它能够更直观的展示声子在不同晶面取向下的传输行为。因此, 本文通过对速度自相关函数 (Velocity Autocorrelation Function, VACF) 进行傅里叶变换来计算 PDOS, 其表达式如下^[46]:

$$\rho(\omega) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\omega t} \frac{\langle v(t) \cdot v(0) \rangle}{\langle v(0) \cdot v(0) \rangle} dt \quad (4)$$

其中, $\rho(\omega)$ 代表在频率 ω 处的 PDOS; $v(t)$ 和 $v(0)$ 分别表示原子在 t 和 0 时刻的速度; 尖括号则表示为系综平均。

图 4 展示了 300 K 下不同晶面 $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3/\text{Si}$ 异质结构中界面区与远离界面块体区的 PDOS。从图中可以看出, 不同晶面体系中 Si 块体区的 PDOS 整体峰位和频率分布较为接近, 说明 Si 侧远离界面区域的主要振动特征基本保持一致; 而 Si 界面区 PDOS 相对于块体区出现峰形展宽和峰强变化, 表明异质界面局域结构会影响界面附近 Si 原子的振动行为。对于 $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$ 侧, 块体区 PDOS 反映出不同晶面取向下的本征振动差异, 而界面区 PDOS 相对于块体区进一步发生峰形展宽和中低频振动贡献重分布, 表明界面局域应力和界面耦合作用会调制界面附近 $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$ 原子的振动特征。这种界面诱导的局域振动变化会影响界面两侧声子模态的耦合关系, 从而进一步影响声子跨界面传输能力。

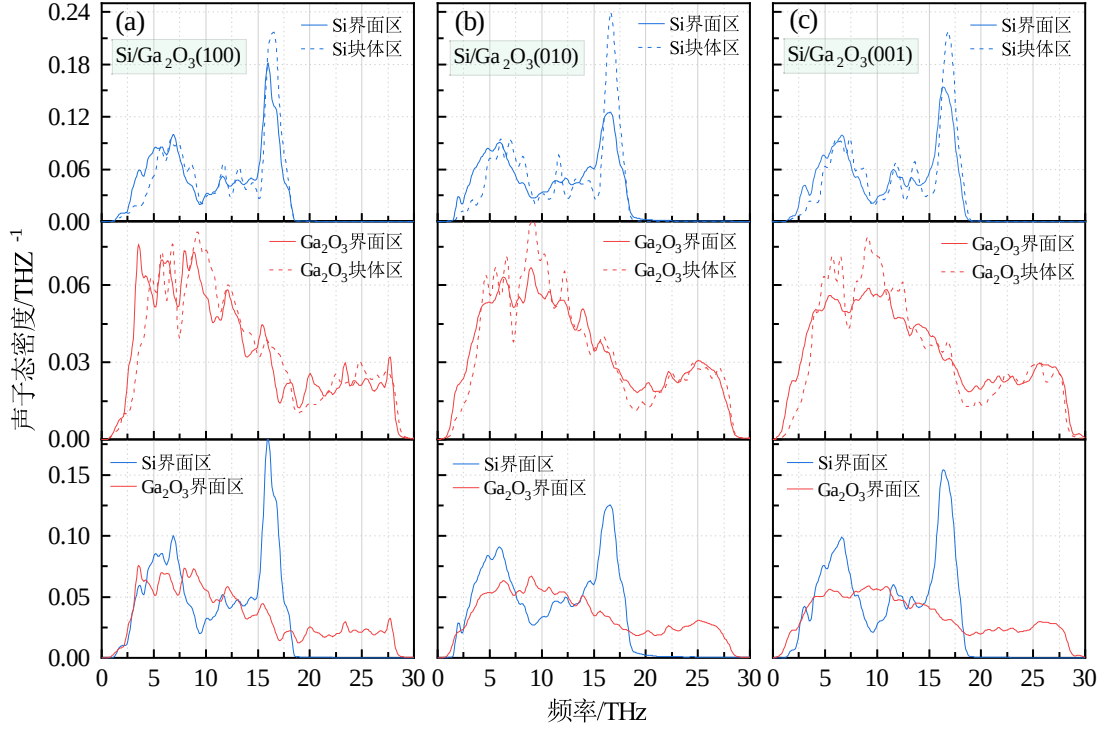


图 4 不同晶面 β -Ga₂O₃/Si 异质结构中界面区与远离界面块体区的声子态密度 (a) (100) 晶面; (b) (010) 晶面; (c) (001) 晶面

Fig. 4. Phonon density of states of interfacial and bulk-like regions in β -Ga₂O₃/Si heterointerfaces with different β -Ga₂O₃ crystal orientations: (a) (100), (b) (010), and (c) (001).

比较界面附近 Si 与 β -Ga₂O₃ 原子的 PDOS 可以发现, Si 的声子态密度主要分布在约 0-18 THz 范围内, 而 β -Ga₂O₃ 的声子态密度分布范围更宽, 并在 20 THz 以上仍存在一定高频振动模式。由于 Si 在高频区域缺少可匹配的声子态, β -Ga₂O₃ 中较高频率声子难以有效耦合至 Si 侧, 因此界面声子热输运主要受低频和中频范围内的声子模式匹配控制。为进一步定量对比不同晶面界面两侧的声子谱匹配程度, 计算了界面附近 Si 与 β -Ga₂O₃ 原子 PDOS 的谱重叠因子, 其定义为^[47,48]

$$S = \frac{\int_{\omega_1}^{\omega_2} D_{\text{Si}}(\omega) D_{\text{Ga}_2\text{O}_3}(\omega) d\omega}{\left[\int_{\omega_1}^{\omega_2} D_{\text{Si}}^2(\omega) d\omega \right]^{1/2} \left[\int_{\omega_1}^{\omega_2} D_{\text{Ga}_2\text{O}_3}^2(\omega) d\omega \right]^{1/2}} \quad (5)$$

其中, $D_{\text{Si}}(\omega)$ 和 $D_{\text{Ga}_2\text{O}_3}(\omega)$ 分别表示界面附近 Si 和 β -Ga₂O₃ 原子的 PDOS, ω_1 和 ω_2 为积分频率范围。考虑到图 4 中界面两侧有效声子谱重叠主要集中在 20 THz 以下, 本文计算了 0-20 THz 范围内的 PDOS 重叠因子。结果表明, β -Ga₂O₃(100)/Si、 β -Ga₂O₃(010)/Si 和 β -Ga₂O₃(001)/Si 界面的 PDOS 重叠因子分别为 0.80、0.87 和 0.82, 呈现出与界面热导相一致的变化趋势, 表明 (010) 晶面界面在主要贡献频段

内具有更好的声子谱匹配与更强的跨界面振动耦合。

然而，PDOS 只反映出界面两侧声子振动模式的匹配度，却不能直接给出不同频率声子对界面热导的具体贡献。因此，为了进一步定量评估不同频率声子模式对界面热流的贡献，本文采用谱热流（Spectral Heat Current, SHC）分解方法^[49,50] 计算了频率相关的谱热导率 $g(\omega)$ 。在非平衡分子动力学模拟框架下，该方法将总热流分解为各频率分量，从而揭示每种声子模式对热传输的具体贡献，并为详细分析界面热导的起源提供关键信息。在此方法中，从界面左侧传播到右侧的谱热流 $q(\omega)$ 的表达式为：

$$q_{L \rightarrow R}(\omega) = \frac{2}{A} \text{Re} \sum_{i \in L} \sum_{j \in R} \int_{-\infty}^{\infty} \langle \mathbf{F}_{ij}(t) \cdot \mathbf{v}_i(0) \rangle e^{i\omega t} dt \quad (6)$$

其中， ω 表示角频率， A 表示垂直于热流方向的横截面积， t 是用于力和速度统计平均的相关时间， $\mathbf{F}_{ij}$ 表示左侧界面原子 i 与右侧界面原子 j 之间的原子间作用力， $\mathbf{v}_i$ 是原子 i 的速度矢量。因此，声子透射函数 $\mathcal{T}(\omega)$ 可以根据谱热流定义为：

$$\mathcal{T}(\omega) = \frac{A |q_{L \rightarrow R}(\omega)|}{k_B \Delta T}, \quad (7)$$

其中， k_B 为玻尔兹曼常数， $A |q_{L \rightarrow R}(\omega)|$ 表示总谱热流， ΔT 为界面两侧温差。频率相关的 $g(\omega)$ 则可表示为：

$$g(\omega) = \frac{|q_{L \rightarrow R}(\omega)|}{\Delta T} \quad (8)$$

图 5 展示了 300 K 下不同晶面 $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3/\text{Si}$ 异质界面的声子透射函数。从图中可以看出，三种界面的声子透射主要集中在 20 THz 以下，其中 10 THz 以下低频声子的透射贡献更为明显。这是由于低频声子通常具有较长波长，对界面局域结构起伏和声子谱失配相对不敏感，更容易跨越异质界面传输。进一步比较不同晶面界面可以发现，在 0-20 THz 范围内， $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3(010)/\text{Si}$ 界面具有最高的声子透射函数， $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3(001)/\text{Si}$ 界面次之，而 $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3(100)/\text{Si}$ 界面最低。尤其在 5-10 THz 的主要透射频段内，(010) 晶面界面的声子透射能力明显强于其他两种晶面；值得注意的是，(100) 面在高于 10 THz 的频率范围内几乎没有峰值，表明在这个频率段内，声子受到了更强的声子间散射。这一结果表明，不同晶面界面热导差异不仅与 PDOS 谱匹配程度有关，还主要受声子跨界面实际透射能力的影响。

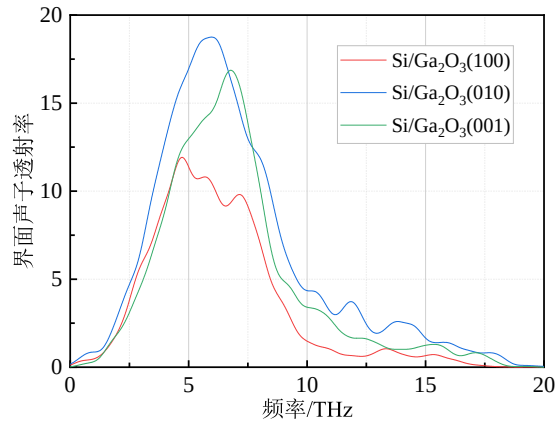


图 5 不同晶面 β -Ga₂O₃/Si 异质界面的声子透射函数

Fig. 5. Phonon transmission functions of β -Ga₂O₃/Si heterointerfaces with different β -Ga₂O₃ crystal orientations.

图 6 展示了 300 K 下不同晶面 β -Ga₂O₃/Si 异质界面的谱分解热导及其累积谱热导。从图 6 (a)、(c) 和 (e) 可以看出，三种界面的谱分解热导主要分布在 20 THz 以下，其中 10 THz 以下的低频声子贡献占主导。这说明 β -Ga₂O₃/Si 界面热输运主要由低频和中低频声子承担，而高频声子由于声子谱失配和界面散射较强，对界面热导的贡献相对有限。不同晶面 β -Ga₂O₃/Si 异质界面的谱分解热导表现出明显差异。在 0-20 THz 范围内，(010) 晶面界面的谱热导整体高于 (100) 和 (001) 晶面，表明其在主要贡献频段内具有更强的声子跨界面传输能力；(100) 晶面界面的谱热导最低，尤其在 10 THz 以上频段贡献较弱，说明该界面中频声子传输受到明显抑制。(100)、(010) 和 (001) 晶面界面的谱热导峰值分别约为 23、47 和 45 MW·m⁻²·K⁻¹，对应峰值频率分别为 4.7、6.8 和 6.0 THz。该结果表明，不同晶面界面的主要热输运声子频段存在差异，其中 (010) 晶面界面在中低频区域具有更高的谱热导贡献。图 6 (b)、(d) 和 (f) 给出了对应的累积谱热导。可以看出，累积谱热导随频率升高迅速增加，并在约 20 THz 后趋于饱和，进一步说明低频和中频声子是界面热导的主要贡献来源。三种界面的累积谱热导最终大小关系为 (010) > (001) > (100)，与图 3 中界面热导的变化趋势一致。由此可见，不同晶面 β -Ga₂O₃/Si 界面热导的差异主要来源于中低频声子的谱热导贡献差异，其中 (010) 晶面界面具有更强的声子谱匹配和跨界面透射能力，因此表现出最高的界面热导。

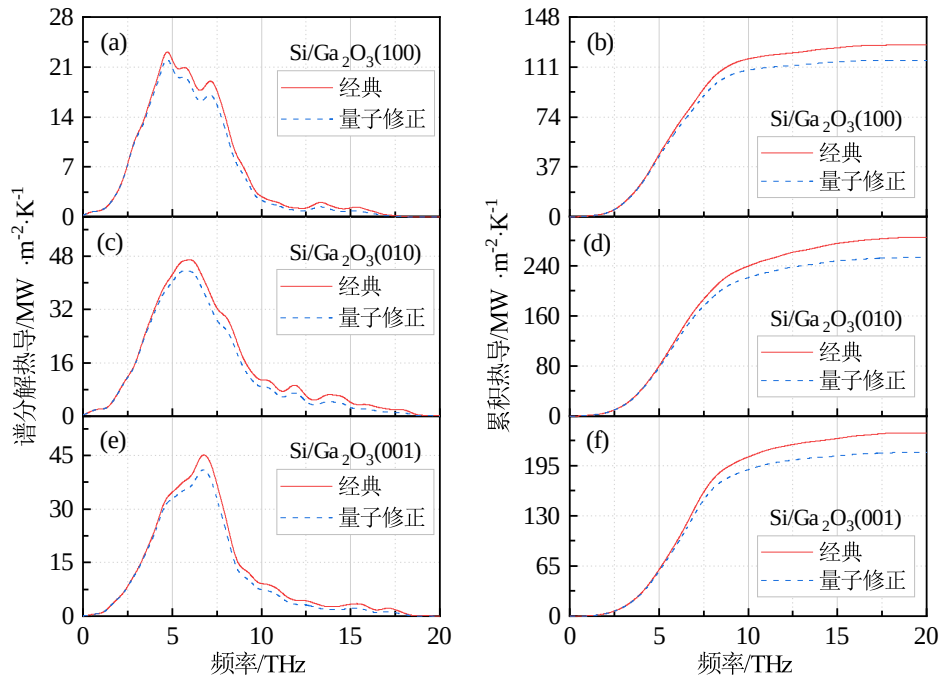


图 6 不同晶面 β -Ga₂O₃/Si 异质界面的谱分解热导和累积谱热导 (a)、(c) 和 (e) 分别为 (100)、(010) 和 (001) 晶面界面的谱分解热导; (b)、(d) 和 (f) 分别为对应晶面的累积谱热导

Fig. 6. Spectral and accumulated thermal conductance of β -Ga₂O₃/Si heterointerfaces with different β -Ga₂O₃ crystal orientations: (a, c, e) spectral thermal conductance of the (100), (010), and (001) interfaces; (b, d, f) accumulated spectral thermal conductance of the corresponding interfaces.

由于经典分子动力学模拟采用经典统计描述声子占据, 在温度低于或接近材料德拜温度时可能高估高频声子的热容贡献^[51,52]。为考虑声子量子统计效应, 本文引入了一个量子校正因子 $g(\alpha)$, 用于修正从经典 SHC 方法计算得到的 $g(\omega)$, 具体表达式为:

$$\alpha = \frac{x^2 e^x}{(e^x - 1)^2} \quad (9)$$

其中, $x = \hbar\omega/k_B T$ ($\hbar$ 为约化普朗克常数, T 为当前体系平均的温度)。图 6 中的蓝色虚线表示的是经过量子修正后的 $g(\omega)$, 它是通过将经典分子动力学模拟得到的 $g(\omega)$ 乘以量子校正因子 $g(\alpha)$ 得到的。可以看出, 量子修正后谱分解热导和累积谱热导整体低于经典结果, 说明经典统计方法会在一定程度上高估部分频率声子的热导贡献。尽管如此, 量子修正并未改变不同晶面界面热导的相对大小关系, 即 (010) 晶面界面仍表现出最高的累积谱热导, (100) 晶面界面最低。这表明, β -Ga₂O₃/Si 界面热导的晶面取向依赖性主要来源于界面声子谱匹配和声子传输能力差异, 而不是由量子修正处理引起的。

3.3 温度对 β -Ga₂O₃/Si 界面热导的影响

电子器件及设备的工作温度对其性能、可靠性和寿命具有至关重要的影响。因此，深入研究温度如何影响 β -Ga₂O₃/Si 异质界面热输运特性显得尤为重要。为进一步分析 β -Ga₂O₃/Si 异质界面热导的温度依赖性，计算了不同温度下 (100)、(010) 和 (001) 晶面 β -Ga₂O₃/Si 异质界面的界面热导，结果如图 7 所示。从图中可以看出，随着温度的升高， β -Ga₂O₃/Si 异质界面的界面热导整体呈现出上升趋势，这一现象与其他固-固材料异质结构中观测到的界面热导随温度变化的趋势相吻合^[53]。这主要是因为温度升高后，更多声子模式被激发并参与跨界面热传输，界面两侧可耦合的声子模式数量增加，从而提高声子传输概率。此外，非弹性声子散射随温度上升而增强，这将进一步提升异质界面的热传导效率^[54]。从不同晶面的对比来看，在所研究温度范围内，(010) 晶面界面的界面热导整体高于 (100) 和 (001) 晶面界面，说明其较强的界面声子耦合能力不仅体现在室温条件下，在较高温度下仍然保持优势。(100) 晶面界面的界面热导始终处于较低水平，表明该界面中声子跨界面传输受限较为明显。(001) 晶面界面的界面热导通常介于 (010) 和 (100) 晶面之间。该结果表明，温度升高虽然能够提高不同晶面界面的整体热导水平，但并未改变 β -Ga₂O₃/Si 界面热导的晶面取向依赖关系。

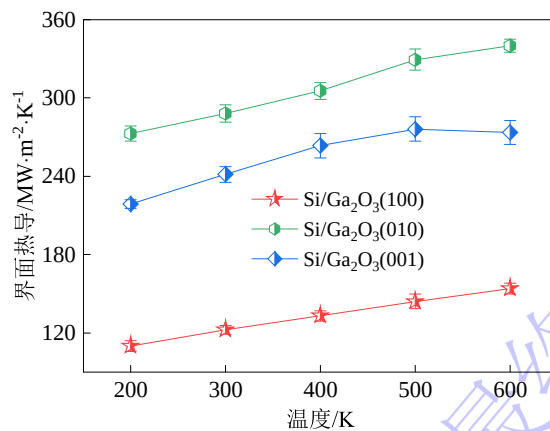


图 7 不同晶面 β -Ga₂O₃/Si 异质界面的界面热导随温度变化关系

Fig. 7. Temperature dependence of interfacial thermal conductance of β -Ga₂O₃/Si heterointerfaces with different β -Ga₂O₃ crystal orientations.

值得注意的是，对于 (001) 晶面 β -Ga₂O₃/Si 异质界面，当温度由 500 K 升高至 600 K 时，界面热导未继续增加，而是出现一定下降。这表明界面热导的温度依赖性并不完全由声子模式激发数量决定，还受到界面声子散射的影响。一般而言，升温会激发更多低频和中频声子参与跨界面热输运，有利于提高界面热导；但在较高温度下，声子-声子散射增强，可能削弱部分声子的有效传输能力。因此，(001) 晶面界

面在高温区间出现界面热导下降，可能来源于声子模式激发增强与界面散射增强之间的竞争。

4 结论

本文采用非平衡分子动力学方法研究了不同晶面 $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3/\text{Si}$ 异质界面的热边界导及其声子输运机制。结果表明， $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$ 晶面取向对界面热导具有显著影响。在 300 K 下，(010) 晶面界面的界面热导最高，约为 $288 \text{ MW}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{K}^{-1}$ ；(001) 晶面次之，约为 $242 \text{ MW}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{K}^{-1}$ ；(100) 晶面最低，约为 $122 \text{ MW}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{K}^{-1}$ ，说明晶面取向能够有效调控声子跨 $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3/\text{Si}$ 界面的传输能力。声子态密度和谱分解热导分析表明，不同晶面界面热导差异主要来源于界面两侧声子谱匹配和声子模式透射能力的不同。 $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3/\text{Si}$ 界面热导主要由 20 THz 以下声子贡献，其中 10 THz 以下低频声子占主导。(010) 晶面界面在低频和中频范围内具有更好的声子谱匹配和更高的谱热导贡献，因此表现出最高界面热导；而 (100) 晶面界面中频声子传输受限，导致其界面热导最低。量子修正后谱热导整体降低，但不同晶面界面热导的相对大小关系保持不变。温度依赖结果显示，三种晶面 $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3/\text{Si}$ 异质界面的界面热导随温度升高总体呈上升趋势，但晶面取向依赖关系基本保持不变。对于 (001) 晶面界面，在 500–600 K 范围内界面热导出现一定下降，可能与声子模式激发增强和界面声子散射增强之间的竞争有关。上述结果表明，合理选择 $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$ 晶面取向有助于降低 $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3/\text{Si}$ 异质界面热阻，并可为 $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3/\text{Si}$ 异质集成器件的热管理设计提供理论参考。

参考文献

- [1] Ji X Q, Liu M Y, Yan Z Y, Li S, Liu Z, Qi X H, Yuan J Y, Wang J J, Zhao Y C, Tang W H, et al. 2023 *IEEE Trans. Electron Devices* **70** 4236
- [2] Higashiwaki M, Wong M H 2024 *Annu. Rev. Mater. Res.* **54** 175
- [3] Hwang W S, Verma A, Peelaers H, Protasenko V, Rouvimov S, Seabaugh A, Haensch W, de Walle C V, Galazka Z, Albrecht M, et al. 2014 *Appl. Phys. Lett.* **104** 203111
- [4] Galazka Z 2022 *J. Appl. Phys.* **131** 031103
- [5] Li B, Zhang X, Zhang L, Ma Y, Tang W, Chen T, Hu Y, Zhou X, Bian C, Zeng C, et al. 2023 *J. Semicond.* **44** 061801

- [6] Das N, Gorsak C, Kashyap A, Gilankar A, Tripathi P, Paranjape S A, Thornton T, Nair H, Kurian Kalarickal N 2026 *IEEE Electron Device Lett.* **47** 466
- [7] Alkandari A, Han Z, Guo Z, Beechem T E, Ruan X 2025 *Phys. Rev. B* **111** 094308
- [8] Zhang G, Xiang X, Qian Z, Xu Y, Yue S, Jang H, Yang L, Zhou Y, Wang X, Zheng Q 2026 *Acta Mater.* **307** 121973
- [9] Sun S, Wang C, Alghamdi S, Zhou H, Hao Y, Zhang J 2025 *Adv. Electron. Mater.* **11** 2300844
- [10] Labed M, Moon J Y, Kim S I, Park J H, Kim J S, Venkata Prasad C, Bae S H, Rim Y S 2024 *ACS nano* **18** 30153
- [11] Zhang J, Dong P, Dang K, Zhang Y, Yan Q, Xiang H, Su J, Liu Z, Si M, Gao J, et al. 2022 *Nat. Commun.* **13** 3900
- [12] Cheng Z, Huang Z, Sun J, Wang J, Feng T, Ohnishi K, Liang J, Amano H, Huang R 2024 *Appl. Phys. Rev.* **11** 041324
- [13] Shen Y, Wang A F, Ma H P, Qi X, Yuan Q, Yang M, Qiu M, Zhang B, Jiang N, Zhang Q J 2024 *Mater. Today Phys.* **49** 101593
- [14] Wang Z, Kitada T, Takatsuki D, Liang J, Shigekawa N, Higashiwaki M 2023 *J. Appl. Phys.* **133** 194503
- [15] Xu W, Zhao T, Zhang L, Liu K, Sun H, Qu Z, You T, Yi A, Huang K, Han G, et al. 2024 *ACS Appl. Electron. Mater.* **6** 1710
- [16] Yang B, Tang Y, Xin Z, Zheng H, Qi D, Zhang N, Tang Y, Wu X 2024 *Appl. Surf. Sci.* **659** 159905
- [17] Ma D, Zhang G, Zhang L 2020 *J. Phys. D: Appl. Phys.* **53** 434001
- [18] Pomeroy J, Middleton C, Singh M, Dalcanale S, Uren M, Wong M, Sasaki K, Kuramata A, Yamakoshi S, Higashiwaki M, et al. 2018 *IEEE Electron Device Lett.* **40** 189
- [19] Yuan C, Zhang Y, Montgomery R, Kim S, Shi J, Mauze A, Itoh T, Speck J S, Graham S 2020 *J. Appl. Phys.* **127** 154502

- [20] Mao Y, Meng B, Qin Z, Gao B, Yuan C 2023 *IEEE Trans. Electron Devices* **70** 953
- [21] Tao L, Theruvakkattil Sreenivasan S, Shahsavari R 2017 *ACS Appl. Mater. Interfaces* **9** 989
- [22] Qi Z, Shen W, Li R, Sun X, Li L, Wang Q, Wu G, Liang K 2023 *Appl. Surf. Sci.* **615** 156419
- [23] Guo Z, Verma A, Wu X, Sun F, Hickman A, Masui T, Kuramata A, Higashiwaki M, Jena D, Luo T 2015 *Appl. Phys. Lett.* **106** 111909
- [24] Santia M D, Tandon N, Albrecht J 2015 *Appl. Phys. Lett.* **107** 041907
- [25] Sun Z, Qi Z, Song Y, Li L, Liu S, Shen W, Wu G 2026 *npj Comput. Mater.* **12** 130
- [26] Kim T, Kim H, Mun H, Park J, Baek J, Je M, Kim J, Jeon D W, Cho J 2026 *Acta Mater.* **308** 122020
- [27] Qu Y, Hu W, Wang F, Ren B, Wang H, Ding J, Chen H 2026 *Appl. Surf. Sci.* **729** 166258
- [28] Car R, Parrinello M 1985 *Phys. Rev. Lett.* **55** 2471
- [29] Sang L, Li Z 2024 *Acta Phys. Sin.* **73** 138102. (in Chinese) [桑丽霞, 李志康 2024 物理学报 **73** 138102]
- [30] Pearton S, Yang J, Cary P H, Ren F, Kim J, Tadjer M J, Mastro M A 2018 *Appl. Phys. Rev.* **5** 011301
- [31] Erhart P, Albe K 2005 *Phys. Rev. B* **71** 035211
- [32] Plimpton S 1995 *J. Comput. Phys.* **117** 1
- [33] Zhang L, Sun S, Jahanshahi S 2001 *J. Non-Cryst. Solids* **282** 24
- [34] Yoshioka T, Asaeda M, Tsuru T 2007 *J. Membr. Sci.* **293** 81
- [35] Tosi M, Fumi F 1964 *J. Phys. Chem. Solids* **25** 45
- [36] Blanco M A, Sahariah M B, Jiang H, Costales A, Pandey R 2005 *Phys. Rev. B* **72** 184103
- [37] Morgan L M, Molinari M, Corrias A, Sayle D C 2018 *ACS Appl. Mater. Interfaces* **10** 32510
- [38] Mitchell P, Fincham D 1993 *J. Phys.: Condens. Matter* **5** 1031
- [39] Fennell C J, Gezelter J D 2006 *J. Chem. Phys.* **124** 234104

- [40] Petkov A, Mishra A, Pomeroy J W, Kuball M 2023 *Appl. Phys. Lett.* **122** 031602
- [41] Rappé A K, Casewit C J, Colwell K S, Goddard III W A, Skiff W M 1992 *J. Am. Chem. Soc.* **114** 10024
- [42] Andersen H C 1983 *J. Comput. Phys.* **52** 24
- [43] Li Z, Xiong S, Sievers C, Hu Y, Fan Z, Wei N, Bao H, Chen S, Donadio D, Ala-Nissila T 2019 *J. Chem. Phys.* **151** 234105
- [44] Reitz M, Sommer C, Genes C 2019 *Phys. Rev. Lett.* **122** 203602
- [45] Chen J, Zhang G, Li B 2010 *J. Phys. Soc. Jpn.* **79** 074604
- [46] Lin S T, Blanco M, Goddard III W A 2003 *J. Chem. Phys.* **119** 11792
- [47] Liu X, Gao J, Zhang G, Zhang Y W 2017 *Adv. Funct. Mater.* **27** 1702776
- [48] Liu D, Hu Z, Zhou F, Wang P, Wang Z, Li T 2024 *Acta Phys. Sin.* **73** 150202. (in Chinese) [刘东静, 胡志亮, 周福, 王鹏博, 王振东, 李涛 2024 物理学报 **73** 150202]
- [49] Sääskilahti K, Oksanen J, Tulkki J, Volz S 2014 *Phys. Rev. B* **90** 134312
- [50] Sääskilahti K, Oksanen J, Volz S, Tulkki J 2015 *Phys. Rev. B* **91** 115426
- [51] Azizi K, Hirvonen P, Fan Z, Harju A, Elder K R, Ala-Nissila T, Allaei S M V 2017 *Carbon* **125** 384
- [52] Turney J, McGaughey A, Amon C 2009 *Phys. Rev. B* **79** 224305
- [53] Sun J, Li Y, Karaaslan Y, Sevik C, Chen Y 2021 *J. Appl. Phys.* **130** 035301
- [54] Li Q, Liu F, Hu S, Song H, Yang S, Jiang H, Wang T, Koh Y K, Zhao C, Kang F, et al. 2022 *Nat. Commun.* **13** 4901

Crystal-orientation-dependent interfacial thermal conductance and phonon transport mechanism of

β -Ga₂O₃/Si heterointerfaces*

QU Yongfeng^{1)†} REN Boquan¹⁾ CHEN Haixia¹⁾ DING Jijun¹⁾
DANG Bo²⁾ HU Wenbo³⁾ WANG Hongxing³⁾

1) (*Shaanxi Key Laboratory of Measurement and Control Technology for Oil and Gas Wells, School of Science, Xi'an Shiyou University, Xi'an, 710065, China*)

2) (*School of Electrical Engineer, Xi'an Shiyou University, Xi'an, 710065, China*)

3) (*Key Laboratory for Physical Electronics and Devices of the Ministry of Education, School of Electronic Science and Engineering, Xi'an Jiaotong University, Xi'an 710049, China*)

Abstract

β -Ga₂O₃ is a promising ultrawide-bandgap semiconductor for high-voltage and high-power electronic devices owing to its large bandgap and high breakdown electric field. However, its relatively low thermal conductivity can lead to severe self-heating under high-power operating conditions. Integrating β -Ga₂O₃ with Si offers a feasible route for combining its superior electronic properties with mature Si-based processing technologies, whereas the interfacial thermal resistance may significantly impede heat dissipation

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 62541412, 12504393), Young Talent Fund of Xi'an Association for Science and Technology (Grant No. 0959202613169), Young Talent Fund of Association for Science and Technology in Shaanxi, China (Grant No. 20260511), Scientific Research Innovation Capability Support Project for Young Faculty (Grant No. SRICSPYF-BS2025031), and the Intelligent Monitoring and Control of Oil and Gas Wells Youth Scientific Research and Innovation Team (Grant No. 2022QNKYCXTD02).

† Corresponding author. E-mail: yfqu@xsyu.edu.cn

across the $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3/\text{Si}$ heterointerface. Because $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$ has a monoclinic crystal structure and strongly anisotropic phonon transport properties, its crystal orientation may substantially affect interfacial phonon transmission. Clarifying the orientation-dependent thermal transport across $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3/\text{Si}$ heterointerfaces is therefore important for interfacial thermal management and crystal-orientation selection.

In this work, $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3/\text{Si}$ heterointerface models with (100), (010), and (001) $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$ surfaces were constructed, and their interfacial thermal conductance was calculated using nonequilibrium molecular dynamics simulations. The phonon density of states, phonon transmission function, spectral thermal conductance, and accumulated spectral thermal conductance were further analyzed to elucidate the microscopic phonon transport mechanisms. The results show that the interfacial thermal conductance strongly depends on the crystal orientation of $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$. At 300 K, the (010) interface exhibits the highest interfacial thermal conductance of approximately $288 \text{ MW}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{K}^{-1}$, followed by the (001) and (100) interfaces with values of approximately 242 and $122 \text{ MW}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{K}^{-1}$, respectively.

Phonon spectral analysis indicates that the orientation dependence of the interfacial thermal conductance mainly originates from differences in phonon spectral matching and low- to mid-frequency phonon transmission across the interface. Phonons below 20 THz dominate the interfacial thermal transport, with phonons below 10 THz providing the major contribution. The (010) interface exhibits higher phonon transmission and spectral thermal conductance within the dominant frequency range, whereas phonon transmission across the (100) interface is significantly suppressed. Increasing temperature generally enhances the interfacial thermal conductance, while the relative ordering among the three crystal orientations remains nearly unchanged. For the (001) interface, the slight decrease in interfacial thermal conductance from 500 to 600 K may arise from competition between the activation of additional phonon modes and enhanced phonon-phonon scattering. These results demonstrate that crystal orientation plays an important role in regulating thermal transport across $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3/\text{Si}$ heterointerfaces and provide theoretical guidance for the thermal management of $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3/\text{Si}$ heterointegrated devices.

Keywords: $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3/\text{Si}$ heterointerface, interfacial thermal conductance, crystal orientation, phonon transport, nonequilibrium molecular dynamics