

专题: 缺陷与掺杂对物性的调控

界面工程调控 GaN 基异质结界面热传导性能研究*

王权杰# 邓宇戈# 王仁宗 刘向军†

(东华大学机械工程学院, 微纳机电系统研究所, 纤维材料改性国家重点实验室, 上海 201600)

(2023 年 5 月 16 日收到; 2023 年 7 月 21 日收到修改稿)

GaN 以其宽禁带、高电子迁移率、高击穿场强等特点在高频大功率电子器件领域有着巨大的应用前景。大功率 GaN 电子器件在工作时存在明显的自热效应, 产生大量焦耳热, 散热问题已成为制约其发展的瓶颈。而 GaN 与衬底间的界面热导是影响 GaN 电子器件热管理全链条上的关键环节。本文首先讨论各种 GaN 界面缺陷及其对界面热导的影响; 然后介绍常见的界面热导研究方法, 包括理论分析和实验测量; 接着结合具体案例介绍近些年发展的 GaN 界面热导优化方法, 包括常见的化学键结合界面类型及范德瓦耳斯键结合的弱耦合界面; 最后总结全文, 为 GaN 器件结构设计提供有价值参考。

关键词: GaN, 界面缺陷, 界面热导, 声子输运**PACS:** 63.20.-e, 44.20.+b, 65.40.-b, 61.72.-y**DOI:** 10.7498/aps.72.20230791

1 引言

目前, 通信、雷达、汽车电子、航空航天、核工业、军用电子等领域对高温、高频、大功率芯片和短波光电子器件有着迫切的需求。GaN 作为第三代宽禁带半导体的典型代表, 具有宽禁带、高电子迁移率、高击穿场强等特点, 很好地满足了当前对于高频大功率电子器件的需求。然而, 高频大功率的工作环境以及封装技术的限制使得大量的焦耳热积聚在 GaN 沟道内, 即产生自热效应^[1]。据报道, 最新的金刚石衬底 GaN 高电子迁移率晶体管 (HEMT) 的近节点热流密度可以达到太阳表面热流密度的 10 倍以上^[2]。节点温度升高将会直接影响器件的可靠性和运行速度, 导致栅极电流崩塌、载流子迁移率下降等现象。

GaN HEMT 节点的热能通过衬底散出, 大体需要经历三个热阻: GaN 器件层本身的热阻、衬底的热阻、GaN 和衬底之间的界面热阻。因此, 提高

GaN 器件散热性能主要包括两个方案: 一个是采用更高导热率的衬底材料; 另外一个则是减小 GaN 和衬底之间的界面热阻^[3]。随着晶体管尺寸越来越小, 内部界面数量越来越多, 界面热阻在 GaN 器件总热阻中的占比越来越大。例如, 实验和理论研究发现, 以 SiC 为衬底的 GaN HEMT 沟道温度可以达到 115 °C, 其中近一半温升归因于 GaN 与衬底之间的界面热阻^[4]。因此, 减小 GaN 与衬底之间的界面热阻对于解决 GaN 功率器件散热难问题至关重要。

界面热阻又称 Kapitza 阻值 (R , 与界面热导互为倒数), 它是由界面两侧原子振动失配造成的, 具体表现为界面处温度产生跳变, 其阻值大小由界面温差 ΔT 与通过界面的热流密度 J 的比值表示, 即 $R = \Delta T/J$ 。在微纳尺度, 当界面特征尺寸与载流子 (电子或声子) 的平均自由程接近时, 界面热阻将会表现出明显的界面微观结构依赖性, 如界面缺陷、界面粗糙度、界面形貌、晶格取向以及界面结合方式等都会影响界面热输运。GaN 外延生长

* 国家自然科学基金 (批准号: 52150610495, 52206080) 和上海市科委科技基金 (批准号: 21TS1401500, 22YF1400100) 资助的课题。

同等贡献作者。

† 通信作者。E-mail: xjliu@dhru.edu.cn

过程中, 由于缺乏同质衬底, 在其界面处普遍存在各种缺陷, 图 1 依次展示了界面非晶层^[5]、晶格位错^[6]、应力^[7,8]、空隙^[9]. 相较晶体结构, 界面非晶层除了具有较低的热导率 ($< 1 \text{ W}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$)^[10], 其无序的原子排布会显著地增加界面区域的声子散射, 诱发声子局域化等现象. 例如, 通过非平衡态分子动力学模拟, 研究发现在 GaN/AlN 界面处引入 4 nm 厚非晶层, 其界面热导由理想光滑界面的 $546 \text{ MW}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{K}^{-1}$ 降至 $149 \text{ MW}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{K}^{-1}$ ^[11]. 当然, 对于界面两侧原子振动失配或质量差别较大的情况, 适当控制界面非晶层厚度及混合形式可能对界面突变的材料属性起到缓冲作用, 减少声阻失配, 从而提高界面热导^[12]. 晶格位错由晶格常数和晶体取向不匹配引起, 实验研究发现, 在 GaN 界面处原子位错密度通常在 $10^7\text{--}10^{10} \text{ cm}^{-2}$ ^[13]. 这些位错缺陷除了会恶化 GaN 器件的电学和光学特性, 也会充当散射点改变载流子的透射和反射行为, 影响界面热传输. 界面应力具有温度依赖性, 例如在 GaN/SiC 界面, 常温下 GaN 一侧受压, SiC 一侧受拉, 而热膨胀系数的差异导致生长完成后的降温过程中 GaN 变得受拉^[7]. 通常, 应力会改变原子间作用力常数, 引起声子谱频移, 增加非简谐性等. 金刚石具有极高的热导率 ($> 2000 \text{ W}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$), 被认为是解决 GaN 器件散热最具潜力的衬底材料, 然而在 GaN/金刚石界面处的金刚石纳米晶体其热导率只有数十 $\text{W}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$, 远小于金刚石的

本征导热率^[14]. 通过高分辨率扫描电子显微镜, Yates 等^[9]发现 GaN/金刚石界面粗糙且存在大量空隙, 这些空隙是 GaN 在高温 ($700 \text{ }^\circ\text{C}$ 以上) 的成核生长环境中被氢离子刻蚀产生的. 根据传热学, 对流传热的效率要低于热传导, 因此, 界面空隙会产生额外的界面热阻.

除了上述界面缺陷, 界面的结合方式也是影响 GaN 界面热传输的一个重要因素, 尤其在二维电子器件领域, GaN 作为一种衬底材料逐渐受到关注. 通常, 二维材料与衬底之间依靠范德瓦耳斯键连接, 这种结合方式一方面可以不受晶格失配约束, 减少界面缺陷; 另一方面材料间具有较好的兼容性, 可以实现性能互补. 例如, 将二维材料与宽带隙半导体集成可以发挥二维材料良好的静电栅极控制能力和宽禁带半导体高击穿场强优势^[15]. 然而, 与化学键结合的界面相比, 范德瓦耳斯键连接的界面结合力较弱, 导致界面两侧声子的耦合强度也较低. 弱耦合机制对于声子输运存在多方面的影响: 一方面可以减少二维体系内的声子散射, 有利于保持二维材料的本征属性; 但另一方面弱耦合也会在二维材料与衬底间产生巨大界面热阻^[16]. 大量研究显示, 范德瓦耳斯异质界面热导普遍低于 $100 \text{ MW}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{K}^{-1}$ ^[17]. 通过分子动力学模拟, 研究发现 MoS_2/GaN 界面热导仅约为 $7 \text{ MW}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{K}^{-1}$ ^[18], 这几乎和已经报道的化学键结合界面的最低值相当 (Bi/金刚石^[19], $\sim 8.5 \text{ MW}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{K}^{-1}$). 因此, 减少

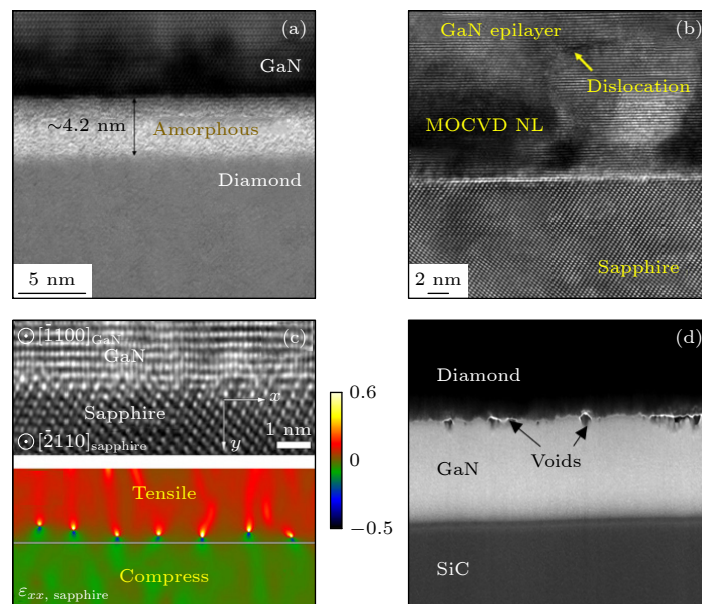


图 1 各种 GaN 界面缺陷 (a) 界面非晶层^[5]; (b) 原子位错^[6]; (c) 应力^[7,8]; (d) 空隙^[9]

Fig. 1. Various types of interfacial defects in GaN: (a) Interfacial amorphous layer^[5]; (b) atoms dislocation^[6]; (c) strain^[7,8]; (d) voids^[9].

范德瓦耳斯异质结界面热阻对于 GaN 基二维电子器件的应用具有重要现实意义. 此外, 界面原子连接的方式也会影响界面热导. 例如, 在 GaN/Al 界面, Zhou 等^[20] 发现由于不同原子间结合强度不同, Al—N 连接的界面热导为 $172 \text{ MW}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{K}^{-1}$, 而 Al—Ga 连接的界面热导仅为 $102 \text{ MW}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{K}^{-1}$.

本文首先介绍了常见的 GaN 界面缺陷及其对界面热导的影响; 然后介绍了界面热导研究方法, 包括理论分析和实验测量; 接着结合具体案例介绍了近些年报道的 GaN 界面热导优化方法, 其中, 除了常见的化学键结合的界面外, 还介绍了范德瓦耳斯键结合的弱耦合界面; 最后是对全文的总结.

2 界面热导研究方法

2.1 理论研究方法

在半导体和绝缘体内, 声子是主要的热载流子, 而在金属内, 电子和声子同时存在^[21]. 当热流流过 GaN/金属界面时, 金属一侧的电子和声子会相互作用, 导致金属内电子温度和声子温度不相等, 此时需要考虑电声耦合对界面热传输的影响. 由于 GaN 的衬底以半导体为主, 所以主要讨论界

面对声子部分的影响. 根据 Landauer 公式^[10], 当热流从材料 A 穿过界面流向材料 B 时, 界面热导 G 可以量化为不同频率声子贡献的累加, 即

$$G = \frac{1}{2\pi S} \int \hbar\omega \frac{\partial f(\omega, T)}{\partial T} D_A(\omega) v_A(\omega) \xi_{A \rightarrow B}(\omega) d\omega, \quad (1)$$

其中, S 表示界面接触面积; \hbar 为约化普朗克常数; f 为玻色-爱因斯坦分布函数; D_A 和 v_A 为声子的态密度和群速度, 它们是材料的本征属性, 可以通过晶格动力学计算获取; ξ 为声子透射系数. 由 (1) 式可知, 预测界面热导最关键的一步是获取正确的声子透射系数.

2.1.1 连续性模型

声学失配模型 (acoustic mismatch model, AMM) 和扩散失配模型 (diffuse mismatch model, DMM) 是两个最早用于预测界面声子透射的解析模型. AMM 假设界面为一个光滑平面, 声子在界面处的反射和透射遵循 Snell 定律, 即 $\sin\theta_1/v_1 = \sin\theta_2/v_2$, 如图 2(a) 所示. 声子的透射系数取决于界面两侧材料的声学阻抗 (质量密度 $\rho \times$ 声速 v), 具体形式如下:

$$\xi_{A \rightarrow B} = 4\rho_A v_A \rho_B v_B / (\rho_A v_A + \rho_B v_B)^2. \quad (2)$$

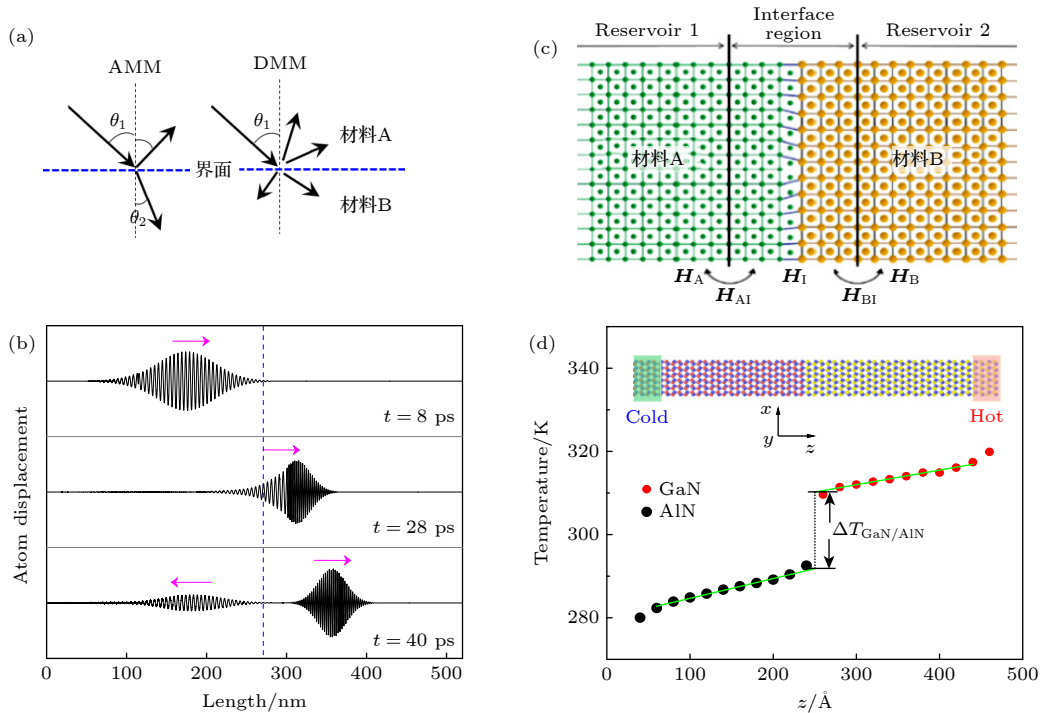


图 2 界面热导研究方法 (a) AMM 和 DMM 模型; (b) 声子波包法; (c) 原子格林函数法; (d) 分子动力学方法

Fig. 2. Study methods for interface thermal transport: (a) AMM and DMM models; (b) phonon wave packet method; (c) atomic Green's function method; (d) molecular dynamics method.

相反, DMM 假设声子在界面处完全发生漫反射, 声子的透射系数与入射角度、偏振方向无关, 仅取决于界面两侧材料的声子态密度 D . 具体形式如下:

$$\xi_{A \rightarrow B} = \frac{\sum_j D_B v_{B,j}}{\sum_j D_A v_{A,j} + D_B v_{B,j}}. \quad (3)$$

由上述可知, AMM 和 DMM 对于声子透射的描述属于两个极端假设, 而实际上, 声子在穿过界面时镜面反射和漫反射同时存在. 例如根据 Ziman 等^[22]的推导, 镜面反射率与界面粗糙度和入射声子波长都有关. 另外, 这两种模型没有考虑界面原子细节, 只是基于界面两侧材料的声子特性来计算声子透射系数. 实验^[23]和理论^[24]研究表明, 界面区域的振动模式与块体材料内的振动模式具有明显差异, 存在特殊的界面声子模式. 目前, AMM (DMM) 主要在低温 (高温) 下对界面热导进行粗略的估计^[25].

2.1.2 声子波包方法

声子波包法同样可以获取声子的透射系数, 其核心思想是在界面一侧施加某个特定模式的扰动, 然后监控该扰动在界面处的传播过程. 每个声子波包可以看作是一系列波矢邻近的平面波叠加而成, 波包的初始化原子位移 u 定义如下:

$$u = \frac{A}{\sqrt{m}} \boldsymbol{\varepsilon} \exp [i \mathbf{k}_0 (z_l - z_0) - \omega t] \times \exp [-(z_l - z_0)^2 / \gamma^2], \quad (4)$$

其中, A 表示波包振幅; m 表示原子质量; z_l 表示第 l 个元胞的位置, z_0 表示波包的中心位置; γ 为波包展宽; \mathbf{k}_0 为波包的波矢; $\boldsymbol{\varepsilon}$ 为波包所对应的振动模式矢量, 决定单个元胞内原子振动方式. 波包的初始化速度可以通过初始化原子位移的时间求导得到. 波包构建完成后, 使其从界面一侧发射并以一定速度向前传播, 当与界面碰撞后发生散射行为, 如图 2(b) 所示. 一部分波包能量穿过界面, 一部分被界面反弹回来. 根据穿过界面能量与入射波包总能量的比值就可以确定声子的透射系数. 该方法不需要任何散射机理假设, 可以直观地观察到声子在不同界面形貌时的散射画面. 缺点是为了避免其他模式干扰, 需要将温度控制在 0 K 附近. 这就意味着无法考虑温度对界面热导的影响, 因此声子在界面的透射基本属于简谐作用范畴.

2.1.3 原子格林函数法

原子格林函数法是另外一种基于简谐作用下的界面热导研究方法. 该方法需要给定异质结原子分布及原子间作用势, 通过求解简谐近似下的声子动力学方程可以获取界面处声子透射系数. 原子格林函数 \mathbf{G} 是指原子体系对微小扰动的响应函数, 其数学形式为

$$(\omega^2 \mathbf{I} - \mathbf{H}) \mathbf{G} = \mathbf{I}. \quad (5)$$

其中, \mathbf{I} 是单位矩阵; \mathbf{H} 是原子体系的简谐矩阵, 里边包含原子间作用力常数. 由于整个原子体系的 \mathbf{H} 维度过高, 一般将异质结界面模型划分为三部分 (图 2(c)), 中间界面区域和界面两侧半无限区域. 此时, \mathbf{H} 拆分为五部分, 界面两侧半无限区域矩阵 ($\mathbf{H}_A, \mathbf{H}_B$), 中间界面区域矩阵 (\mathbf{H}_I), 界面与两侧连接区域矩阵 ($\mathbf{H}_{AI}, \mathbf{H}_{BI}$). 在探究界面问题时, 通过对感兴趣的 \mathbf{H}_I 矩阵求逆就可以得到相应的格林函数, 频率相关的声子透射系数可以表示为

$$\xi(\omega) = \text{Tr}[\Gamma_1 \mathbf{G} \Gamma_2 \mathbf{G}^\dagger], \quad (6)$$

其中, $\Gamma = i(\boldsymbol{\Sigma} - \boldsymbol{\Sigma}^\dagger)$, $\boldsymbol{\Sigma}$ 表示界面两侧半无限区域引起的自能 (self-energy) 矩阵.

2.1.4 分子动力学方法

分子动力学方法可以将晶格振动的简谐和非简谐项同时考虑在内, 因此可以探究温度、界面微观结构等对界面热传输的影响. 在研究界面热导问题时, 应用最多的是非平衡态分子动力学方法. 该方法模拟实验测量, 在界面两侧分别施加一个热源和冷源, 在温差驱动下, 热流会从高温端流向低温端. 由于界面热阻的存在, 在界面处产生一个明显的界面温差, 如图 2(d) 所示. 根据前边提到的界面热阻定义就可以得到相应的界面热阻值. 分子动力学方法除了可以做定性分析, 近些年基于该方法也发展出一些量化分析界面热运输的方法. 例如, Saaskilahti 等^[26]通过采集非平衡态下界面两侧原子的运动速度、力常数等推导出的热流谱分析公式可以量化出不同频率声子对界面热导的贡献. 目前, 已有不少与界面热运输相关的研究借助该方法给予了合理解释, 如热整流效应^[27]、温度效应^[28]、界面原子扩散^[29]以及非简谐作用^[30]对界面热导影响. 从晶格动力学出发, Gordiz 和 Henry^[31]进一步将界面热导分解到各个模态上. Gordiz^[24]根据不同模态在界面热运输中的参与程度, 将振动模态

分为扩展模态、部分扩展模态、孤立模态和界面局域化模态. 通过量化分析, 发现数量占比最少的界面局域化声子模式对界面热导贡献最高效, 例如, 在 Si/Ge 界面, 占全部声子模式数量不足 0.1% 的界面声子模式 (12—13 THz) 对界面热导的贡献达到 15%^[32]. 此外, Zhou 与 Hu^[33] 和 Feng 等^[34] 基于非平衡态分子动力学模拟和时域直接分解方法也发展了相应的谱分析方法. Zhou 与 Hu^[33] 通过考虑三阶力常数, 量化了二声子散射和三声子散射对界面热导的贡献. Feng 等^[34] 发现 Si/Ge 的界面声子模式可以作为连接 Si 和 Ge 声子模式的桥梁, 并使非弹性散射在界面热导中的贡献超过 50%. 近期, Feng 等^[35] 通过谱分解还获得了各个模态的温度分布, 发现在界面热输运过程中, 不同模态声子之间存在明显的非平衡现象.

值得注意的是, 分子动力学模拟的准确与否很大程度上取决于势函数能否正确描述原子间作用力. 对于界面处原子间作用力, 目前主要利用混合法则或 Lennard-Jones 势描述, 这仍是一种比较粗糙的方法. 因此, 寻找更加准确的界面势函数对于探究界面热输运问题显得尤为重要. 近些年, 机器学习的出现为势函数的开发提供了一个新的思路, 通过训练, 它可以建立原子构型和势能面之间的映射关系. 可惜的是, 目前针对单一材料的机器学习势函数已有不少报道, 但对于界面间原子作用力的势函数还很有限. 近期, 利用第一性原理结合深度神经网络, 作者和合作者们开发了一个可以准确描述 GaN/AlN 界面的势函数^[36], 并利用该势函数探究了界面原子扩散和原子混乱对界面热导的影响. 另外, 通过该势函数得到的 GaN, AlN 及其合金的弹性模量、热导率与实验测量和第一性原理计算结果都吻合很好.

2.2 实验测量方法

相较宏观尺寸的热流和温度测量, GaN 功率器件由于其纳米级别的薄膜厚度以及复杂的界面微观结构给实验测量带来很大的困难. 下面介绍两种近来比较常用的界面热导测量方法.

2.2.1 时域热反射法

时域热反射法是目前最常见的 GaN 界面热导测量手段. 该方法通过测量样品表面反射率随温度的变化来预测热特性, 实验中样品表面通常需要涂上一层金属 Al 膜作为传感层. 其基本原理是从激光振荡器发射一束单色激光脉冲, 经偏振分束器后分为泵浦光束和探测光束. 前者用于加热样品表面, 后者通过一定机械延迟测量样品表面在很短扩散时间内的温度或者反射率变化. 如图 3(a) 所示, 在 0 时刻一束脉冲激光打在样品表面的 Al 传感层导致其受热温度迅速升高 (黑色线). 加热结束后, Al 膜表面热量会逐渐渗入 GaN 材料内部, 然后经界面流向衬底. 在该过程, 样品表面温度会逐渐下降 (红色线), 而温度下降的速度与材料本征热导率、界面热导等存在数学关系. 通过控制实验中两束激光脉冲的时间延迟, 采集不同时刻的样品表面温度, 然后将这些实验数据点利用求解热扩散模型的解进行拟合, 便可以得到 GaN 薄膜热导率、界面热导等热物性. 该方法结构简单, 适用于表面粗糙度 < 15 nm 的光学光滑样品, 对于光学粗糙样品, 需要将泵浦光和探测光进行光谱分离, 以便利用高效滤光片消除反射泵浦光. 目前利用该方法已经成功测量了 GaN/金刚石^[37], GaN/SiC^[38], Ga₂O₃/SiC^[39] 和 GaN/sapphire^[40] 等的界面热导.

通常, 时域热反射法需要对样品表面的反射率、脉冲能量、激光焦斑大小和测量时间等因素进

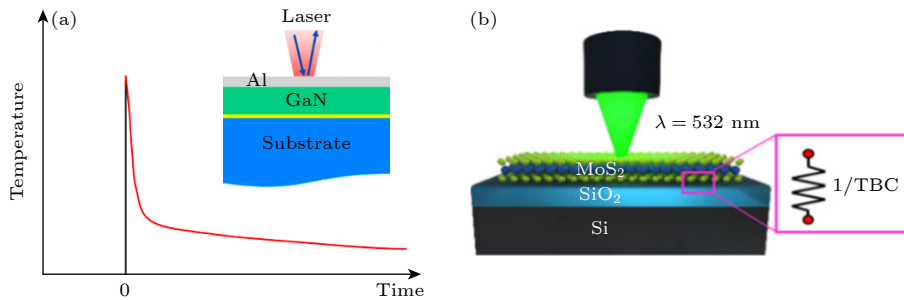


图 3 界面热导实验测量方法 (a) 时域热反射法; (b) 拉曼法测 MoS₂/SiO₂ 界面热导^[45]

Fig. 3. Experimental measured methods for thermal boundary conductance: (a) Time-domain thermo-reflectance method; (b) MoS₂/SiO₂ thermal boundary conductance measured by Raman method^[45].

行校准和补偿,以保证测量结果的准确性和可靠性;另外测量中涂上的一层金属膜可能引入额外的接触热阻,增加了实验的不确定度,一定程度上限制了该方法的应用^[41].

2.2.2 拉曼法

对于二维电子器件的界面热导测量可以借助拉曼法,如图 3(b) 表示 MoS₂/SiO₂ 界面热导的测量. 该方法主要通过分析材料的拉曼光谱中的拉曼峰频移和强度来获得材料中不同热传导机制的信息. 受样品制备方法、质量以及激光波长和能量等影响,测温前需要标定样品的温度系数,建立峰频和温度之间的关系,然后根据实际测得峰频来计算温度. 早期拉曼法最先用来测量二维、三维材料的本征热导率,例如 MoS₂/SiO₂^[42-44], MoS₂/AlN^[45], WSe₂/SiO₂^[46]. 因为其非接触性、可穿透性高、高空间分辨率(约 1 μm)、可区分不同材料等特点被广泛应用. 对于衬底支撑的 MoS₂,可以根据柱坐标下 MoS₂ 内的热扩散方程获得温度 (T) 分布:

$$\frac{1}{r} \frac{d}{dr} \left(r \frac{dT}{dr} \right) - \frac{g}{\kappa_s t} (T - T_a) + \frac{Q}{\kappa_s} = 0, \quad (7)$$

其中, g 为 MoS₂ 和基底之间的界面热导; κ_s 是 MoS₂ 的热导率; t 是 MoS₂ 的厚度; T_a 是环境温度; Q 是等效体积热源,表示为 $Q = q_0 e^{-r^2/r_0^2}/t$, q_0 是光束光斑中心处单位面积吸收激光功率的峰值. 利用两组不同激光光束尺寸 r_0 得到的 MoS₂ 的温升和激光总吸收功率之间的关系可解耦计算出 g 和 κ_s .

需要注意的是,光热拉曼方法存在一定的实验误差,这些误差可能是由于对样品光吸收的测量不准确,激光光斑尺寸校准的不确定性,或不可避免地由周围环境的散热和样品支撑区域的界面热导造成.

3 GaN 化学键界面热导调控

3.1 添加界面缓冲层

如上文所述,造成 GaN 界面出现各种缺陷的一个主要原因是界面两侧材料晶格失配. 因此,最先想到的就是能否在界面处引入第三种材料,使其晶格常数介于 GaN 与衬底材料的晶格常数之间,从而对突变的晶格常数起到缓冲作用. 事实证明,在 GaN 与衬底之间添加缓冲层确实可以改善 GaN 界面及外延层生长质量. 例如,在 GaN 与 SiC 衬

底之间添加 AlN 缓冲层不仅可以提高界面处 Ga 原子的浸润性,而且可以释放掉由于晶格失配产生的应力,从而减少 GaN 界面缺陷^[47]. Tanaka 等^[48] 研究发现,当 GaN/SiC 界面引入 1.5 nm 厚的 AlN 缓冲层后, GaN 外延层中的位错密度可以降至 10^7 — 10^8 cm⁻². 此外,缓冲层还可以作为刻蚀阻挡层,对 GaN 外延层起到保护作用. 例如,为了使 GaN 免受金刚石反应器内氢离子的刻蚀,在 GaN/金刚石界面处通常会插入 SiN 缓冲层^[9,38,49].

根据界面热导提高原理,这里将缓冲层分为两类,一是增加界面的结合强度;二是增加界面两侧的振动耦合. Yates 等^[9] 用时域热反射法分别测量了 GaN/金刚石直接生长与分别使用 AlN 和 SiN 作为其缓冲层时的界面热阻,结果如图 4(a) 所示. 直接生长时,发现界面粗糙度高且伴随着大量空隙,界面热阻高达 41.4 m²·K·GW⁻¹. 而使用 AlN 和 SiN 作为缓冲层时,界面缺陷明显减少,界面热阻分别降至 18.2 和 9.5 m²·K·GW⁻¹. 相较 AlN, SiN 缓冲层通过在 GaN 与金刚石界面处形成 Si—C—N 层使得界面结合强度增强,因此界面热阻更小. 类似,Field 等^[37] 在 GaN 与金刚石之间选用 AlGaIn 作为缓冲层的同时,又在金刚石与 AlGaIn 缓冲层之间插入了一个 SiC 薄层,发现 SiC 与金刚石之间由于 C 键的作用界面黏附力变得更强,从而使得更多声子透过界面,测得的界面热阻也从 107 降至 30 m²·K·GW⁻¹. 除了借助缓冲层,实验上使用自组装单层^[50](self-assembled monolayer)、压力控制^[51]、调节表面终端^[52](surface termination) 等方法也可以起到提高界面结合强度的效果.

相比第一类方法,通过增加界面振动耦合来提高界面热导主要为理论和模拟研究. 早期,English 等^[53] 通过分子动力学模拟结合理论分析探究了缓冲层原子质量对固体/固体界面热导的影响. 结果显示,当缓冲层的原子质量为界面两侧原子质量的算数平均值时界面热导提高最多. 利用相同的模型,Polanco 等^[54] 则认为当缓冲层的原子质量为界面两侧原子质量的几何平均值时,界面热导最高. 然而,在他们的研究中缓冲层都假设为单原子体系,即每个原胞内只有一个原子. 而在实际应用中,常见的 GaN 缓冲层如 AlN, SiN, AlGaIn 等为多原子体系,因此缓冲层内部不仅包括声学声子还包括光学声子. 近期, Lee 和 Luo^[55] 通过模拟探究了缓冲层为多原子体系时对 GaN/SiC 界面热导的

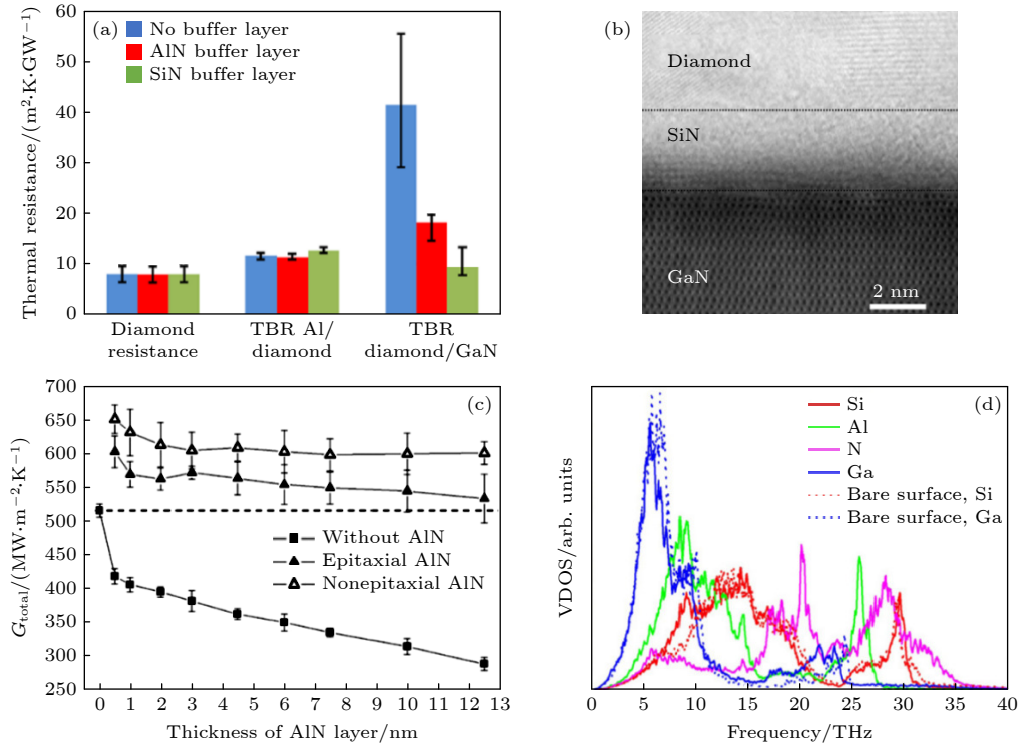


图 4 (a) 利用时域热反射法测量的 GaN/金刚石、GaN/AlN/金刚石、GaN/SiN/金刚石界面热导^[9]; (b) 高分辨率 TEM 下观测到的 GaN/SiN/金刚石界面图像^[9]; (c) GaN/SiC 界面热导与外延和非外延 AlN 插层厚度的关系, 虚线表示非外延插层厚度为 0 时的界面热导^[56]; (d) 对比 GaN/SiC 界面有一个元胞厚的非外延 AlN 插层 (实线) 和没有 AlN 插层 (虚线) 时的声子态密度^[56]

Fig. 4. (a) Measured interfacial thermal resistance for GaN/diamond, GaN/AlN/diamond, and GaN/SiN/diamond interfaces by the time-domain thermo-reflectance technique^[9]; (b) high-resolution TEM image for GaN/SiN/diamond interface^[9]; (c) interfacial thermal conductance between GaN and SiC with epitaxial or non-epitaxial AlN interlayer as a function of AlN thickness. The dashed line refers to the non-epitaxial interface that with no interlayer^[56]; (d) comparison of vibrational density of states of GaN/SiC interface with 1 unit cell non-epitaxial AlN interlayer (solid lines) and bare (dotted lines) GaN/SiC interface^[56].

影响. 结果显示, 与单原子体系不同, GaN/SiC 界面热导不仅与缓冲层元胞整体的质量有关还与元胞内原子间的相对质量有关. 通过分析原子的振动频谱, 发现元胞内原子的相对质量变化会引起光学峰的移动. 调整元胞内原子间的相对质量可以使缓冲层同时与 GaN, SiC 具有较好的振动耦合, 进而起到桥接界面两侧振动模式的作用. 通过测试众多的 III-V 族化合物, Lee 发现 AlN 对 GaN/SiC 界面热导的提高效果最显著, 约为 27%. 这一结果与 Hu 等^[56]的计算结果一致, 如图 4(c) 所示, 相较没有缓冲层的 GaN/SiC 界面, 无论外延 (GaN 和 SiC 侧面原胞数相等) 还是非外延 (侧面原胞数取 GaN 和 SiC 晶格常数的最小公倍数) 连接的情况, 界面热导都有显著提高. 从原子的振动频谱看 (图 4(d)), Al 原子的声学 (光学) 峰刚好位于 Ga 原子与 Si 原子的声学 (光学) 峰之间, 这使得原先一些无法直接从 GaN 进入 SiC 内的声子模式可以先进入 AlN 缓冲层, 然后从 AlN 再进入 SiC.

界面热导除了与缓冲层的质量有关, 缓冲层的厚度、截止频率、质量分布形式都会影响界面热导. 从 Hu 等^[56]的研究可以看出 (图 4(c)), AlN 厚度越小界面热导提高越明显. Chen 和 Zhang^[57]认为当缓冲层的截止频率接近两种材料的较小截止频率时, 将有助于高频声子的传输. 借助一维原子链模型, Xiong 等^[58]发现质量渐变的缓冲层可以更好地减少界面两侧原子的振动失配, 同时其模糊的边界可以避免常规缓冲层内由于声子多重散射产生的声子干涉影响, 因此界面热导增强效果更显著. 另外, 缓冲层的质量渐变形式, 如线性渐变还是指数渐变也会影响界面热导. 具体的缓冲层设计准则可以参考最近 Ma 等^[59]的综述文章.

3.2 图形化界面形貌

界面形貌图形化处理是另外一种有效的 GaN 界面热导优化方法. 首先, 利用该方法同样可以起到减少界面缺陷的效果. 例如, 早在 2002 年, Yun

等^[60]使用表面有凹坑的 SiC 衬底外延 GaN, 发现 GaN 外延层的位错密度可以降低 1 个数量级 (10^9 cm^{-2}). 同年, Neudeck 等^[61]利用表面有台面图案的 SiC 衬底外延 GaN 衬底同样起到了降低 GaN 外延层位错密度的效果. 而通过图形化界面形貌提高界面热导类似于宏观热交换器中阵列排布的翅片, 根本原理是增加界面的有效接触面积. 2011 年, Hu 等^[56]最先使用分子动力学模拟在 GaN 与 SiC 界面处构建了纳米柱 (nanopillars) 交错排列的界面形貌. 计算结果显示, 图案化处理的界面热导相较于平整界面可以提高 50%. 2013 年, Zhou 等^[20]根据分子动力学模拟结果推导了 GaN/Al 界面热导与界面形貌之间的解析关系, 发现界面热导与界面接触面积间存在线性相关性. 类似, Lee 等^[62]利用一阶射线追踪方法结合分子动力学模拟分析了纳米结构界面处声子的入射和透射, 以及界面矩形纳米柱特征尺寸对 GaN/SiC 界面热导的影响. 通过多尺度分析提供了一个优化界面微观结构、提高界面热导的一般性方法, 并将 GaN/SiC 的界面热导提高 42%. 近期, Tao 等^[63]在 GaN/金刚石界面构建了类似的纳米柱结构, 如图 5(a) 所示, 发现界面热导提升超过 80%. 在他们的工作中系统地探究了纳米柱几何尺寸变化, 如长度、截面尺寸、形状、密度、排布方式等对界面热导的影响, 为后续 GaN 界面几何形貌的优化设计提供了重要参考. 另外,

他们还发现在 GaN 与金刚石之间添加单层石墨烯缓冲层可以使靠近界面区域的 GaN 层激发出新的振动模式或界面模式 (图 5(a) 红色箭头表示新的振动峰), 从而使界面热阻进一步降低了大约 33%.

除了理论和模拟研究外, 最近, Lee 等^[64]借助光刻技术在 Si/Al 界面成功制备了不同尺寸和形貌的纳米柱结构, 如图 5(b) 所示. 因为用图形化界面方法提高界面热导需要保证界面的高质量生长, 否则界面缺陷对界面热导产生的负面影响将会抵消由界面面积增加带来的正面影响. Si/Al 界面由于具有比较成熟的制备工艺, 可以减少界面缺陷, 所以 Lee 等^[62]选用了 Si/Al 界面作为研究对象而非之前理论分析中的 GaN/SiC. 图 5(b) 展示了用时域热反射法测量的不同纳米柱间距 (15, 57, 104, 148 nm) 和长度 (30, 50, 64 nm) 下的 Si/Al 界面热导. 相较于平面界面 (水平实线), 界面引入纳米柱后界面热导均显著提高. 而且, 界面间距越小或纳米柱长度越大界面热导提高越明显, 这一趋势和之前的理论和模拟结果基本一致, 即界面接触面积越大界面热导提高越显著. 值得注意的是, 与 Lee 等^[62]之前基于扩散理论推导的理论结果 (图 5(b) 中虚线所示) 相比, 实验测量结果普遍小于理论预测结果, 尤其在小间距范围时. Lee 等^[62]将这一现象归结为两个原因: 1) 在低频区间, 长波声子存在弹道输运现象, 其透射率不会受界面形貌影响, 这与

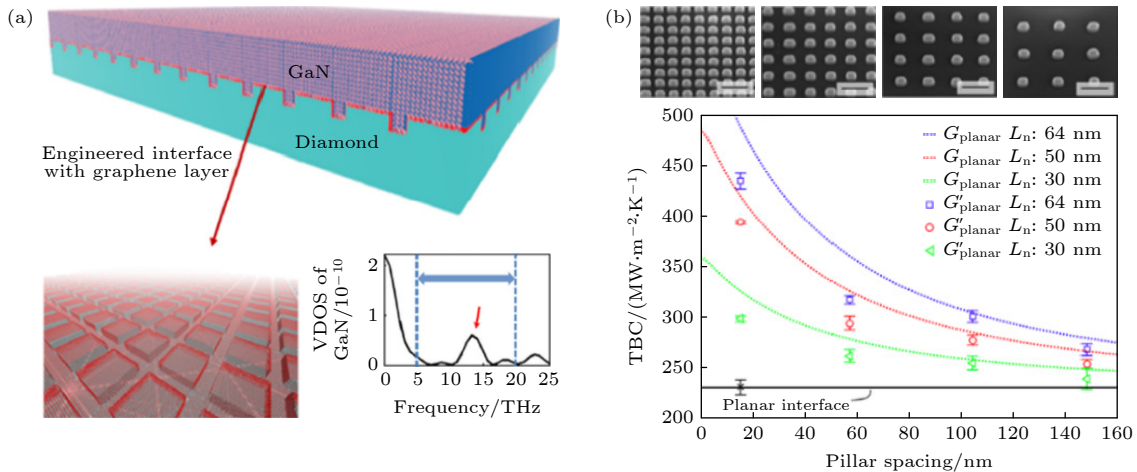


图 5 (a) 带有石墨烯插层的图形化 GaN/金刚石界面形貌以及 GaN/金刚石界面为平面时的 GaN 声子态密度, 其中红色箭头表示受石墨烯影响激发出来声子模式^[63]; (b) 不同纳米柱长度、间隔时的 Al/Si 界面热导, 虚线表示理论预测结果, 实线表示光滑界面时的界面热导^[64]

Fig. 5. (a) Graphical GaN/diamond heterostructure with a graphene interlayer as well the vibrational density of states in GaN, where the red arrow refers to the excited phonon mode by graphene interlayer^[63]; (b) thermal boundary conductance for Si/Al interface with various lengths and intervals of nanopillars, where the dotted lines are predicted by the theoretical model and the solid line refers to the planar interface^[64].

理论分析中的纯扩散假设不符; 2) 小间隙纳米柱会对声子产生阻挡效应, 使部分大角度入射的声子无法到达两个纳米柱之间的“谷底”。

3.3 界面掺杂

通常认为, 提高界面热导需要减少界面缺陷, 因为缺陷会导致额外的声子散射, 增加界面热阻。然而, 部分研究表明, 适当引入界面缺陷有时也可以提高界面热导。例如, Liu 等 [65] 发现在石墨烯/氮化硼界面引入 5 |7 拓扑 (位错) 缺陷可以引起界面产生面外形变, 释放掉由于晶格失配产生的大部分界面应力, 使原先均匀分布的界面应力仅集中在缺陷附近区域。除了二维异质界面, 在体块材料界面也有类似的界面热导增加现象。例如, 利用原子格林函数法, Tian 等 [12] 发现粗糙的 Si/Ge 界面可以“软化”界面两侧的声阻失配, 使部分原先无法穿过界面的中、高频声子经过散射有机会穿过界面。因此, 合理利用缺陷也可以达到提高界面热导目的。

近些年, 有学者通过在 GaN 界面及其附近区域设计一些缺陷如掺杂、原子空位等也达到了同样的界面热导增强效果。例如, Lee 等 [66] 通过非平衡态分子动力学模拟探究了同位素原子掺杂对 GaN/SiC 界面热导的影响。图 6(a) 表示将 GaN 一侧的 ^{69}Ga 原子或 ^{14}N 原子随机替换为相应的同位素原子 ^{71}Ga 或 ^{15}N 。最后界面热导计算结果显示, 相较没

有掺杂的界面 ($f_i^{\text{iso}} = 0$), 无论掺入 ^{71}Ga 原子还是 ^{15}N 原子均可以提高 GaN/SiC 界面热导, 而且随着掺杂浓度增加, 界面热导呈现先增加后收敛的趋势。通过改变掺杂区域的位置、长度, Lee 等 [66] 发现同位素掺杂诱导的声子散射可以优化不同模态声子之间的能量分配, 使 GaN 内的高频光学声子能量通过光学-声学散射传给其低频声学声子, 然后再由低频声学声子通过弹性散射传给 SiC 一侧的低频声学声子, 进而表现为界面热导提高。与此类似, Li 等 [67] 将同位素原子替换为质量较轻的其他原子, 如硼原子。因为根据热流公式:

$$Q_{A \rightarrow B} = \sum_{i \in A} \sum_{j \in B} Q_{i \rightarrow j} = - \sum_{i \in A} \sum_{j \in B} \left\{ \frac{\partial U_i}{\partial r_j} \times v_j - \frac{\partial U_j}{\partial r_i} \times v_i \right\}, \quad (8)$$

其中, r_i 表示原子 i 的位置, U_i 表述原子 i 的势能, v_i 和 v_j 分别表示原子 i 和 j 的速度。根据这个公式, 发现增加原子的运动速度可以提高界面热流。该现象也能从 Lee 等 [66] 的结果看出 (图 6(a)), 掺杂原子质量较轻的 ^{15}N 原子时, 其界面热导提高程度明显高于掺杂质量较重的 ^{71}Ga 原子。通过声子频谱和热流谱分析, Li 发现高速运动的轻质量原子会产生更多中频和低频声子模态, 这加强了和 SiC 侧的振动耦合。图 6(b) 展示了不同掺杂浓度 ($f = 10\%, 30\%, 50\%$)、不同掺杂区域长度 (2—20 Å) 时的 GaN/SiC 界面热导计算结果。从图 6(b) 可以

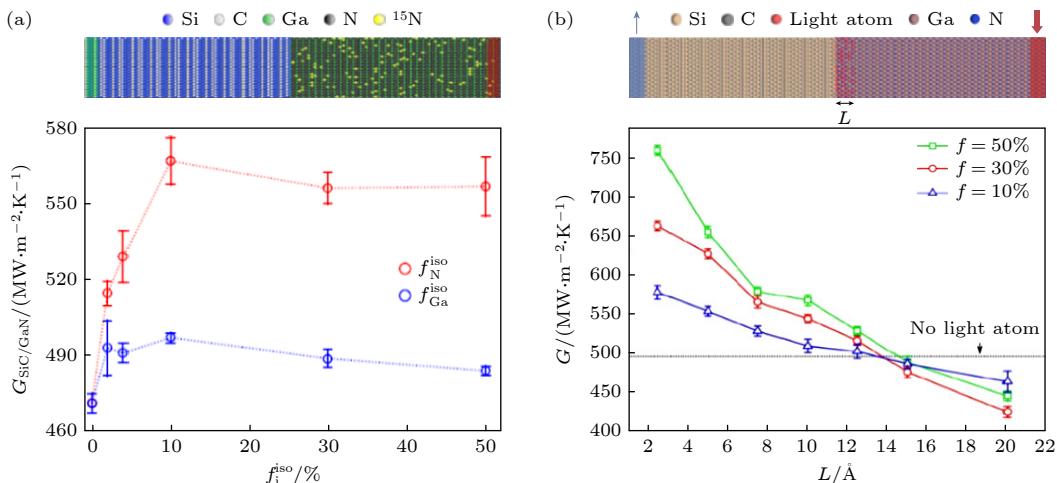


图 6 (a) 同位素掺杂的 SiC/GaN 界面模型, 以及在不同掺杂浓度时的界面热导 [66]; (b) 轻质量原子掺杂的 SiC/GaN 界面模型, 以及在不同掺杂浓度 f 和掺杂长度 L 时的界面热导 [67]

Fig. 6. (a) Structure of GaN/SiC interface with isotope doping, and the calculated thermal boundary conductance with different doping concentrations [66]; (b) structure of GaN/SiC interface with light atoms doping, and the calculated thermal boundary conductance with different doping concentrations (f) and doping lengths (L) [67].

看出, 掺杂浓度越高或者掺杂区域越窄, 界面热导提高越显著. 因为掺杂在提高界面热导同时也降低了掺杂区域 GaN 的本征热导率, 掺杂浓度或掺杂区域增大, 热导率降低产生的负面效果逐渐拉低能量重新分配产生的正面效果. 因此, 利用掺杂方法调控界面热导时, 需要适当控制掺杂区域的长度和浓度. 除了掺杂外, Wu 等^[28]在 GaN/石墨界面处引入原子空位, 发现 0.6% 的原子空位可以将界面热导提升 2.4 倍; 而当原子空位浓度过高时, 增强的声子散射对界面热导同样带来负面影响.

上述提到的缺陷调控方式, 在实验上也具有一定可行性. 例如, 同位素或轻质量原子的掺杂可通过分子束外延或离子注入方法实现, 原子空位可借助离子束轰击或激光烧蚀, 掺杂或原子空位的浓度或位置可通过调节离子束或激光束的能量实现.

3.4 退火处理

大量实验表明, 界面原子混乱和成分扩散是一种常见的 GaN 界面问题, 除了前面提到的 GaN/金刚石界面, 在 GaN/Si^[68], GaN/SiC^[69], GaN/AlN^[70]和 GaN/蓝宝石^[71]界面均有报道. 近期, 利用声子

波包法, 我们先后探究了 GaN/AlN 界面非晶层^[72]和界面成分扩散层^[73]对穿过界面声子动力学行为的影响. 与光滑界面相比, 研究发现界面非晶层和成分扩散层均会显著改变界面原子的振动属性, 当声子穿过界面时, 诱发一系列复杂的物理现象. 图 7(a) 表示 LA 模声子波包 ($f = 3.6$ THz) 穿过带有非晶层的 GaN/AlN 界面时的散射画面, 发现除了正常的 LA-LA 模声子之间进行能量传输, 还诱发了 LA-TA, LA-TO 之间的模式转化. 而不同模式声子之间进行转化可以开辟新的声子传输通道, 例如高频 TA 声子在模式转化作用下透射率反常提高, 即便超过了截止频率, 仍有部分声子能量可以透过界面. 此外, 界面非晶层还会引起声子干涉、声子局域化、非弹性散射等现象. 声子干涉是由于低频声子在非晶层内的多重散射引起的相干性行为, 具体表现为声子透射系数周期性振荡. 声子局域化与非晶层内无序的原子排布有关, 因为与晶体不同, 非晶结构的载流子主要分为扩散子、传播子和局域子, 其中只有扩散子具备传播属性. 因此, 当波包穿过界面非晶层时, 一部分声子能量可能被转化为局域子, 即出现声子局域化现象. 在

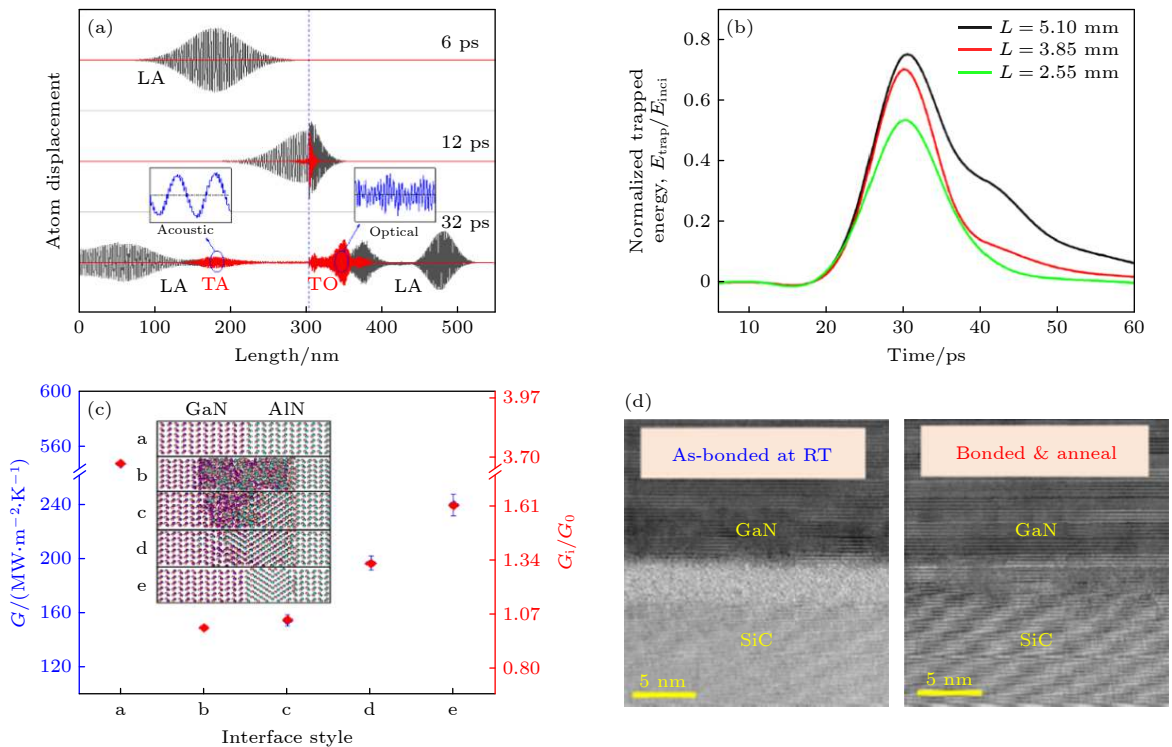


图 7 (a) LA 模声子波包穿过 GaN/AlN 界面非晶层后的散射画面^[72]; (b) TA 模声子波包在穿过不同厚度界面扩散层时扩散层内能量随时间的变化^[73]; (c) 不同 GaN/AlN 界面形貌时的界面热导^[11]; (d) GaN/SiC 退火前后的界面形貌^[69]

Fig. 7. (a) Snapshots of LA wave packet passing through the amorphous layer at GaN/AlN interface^[72]; (b) energy variation in the compositional diffusion layer as a function of time^[73]; (c) thermal boundary conductance of GaN/AlN with different interface morphologies^[11]; (d) interface morphologies of GaN/SiC with and without annealing treatment^[69].

成分扩散界面,进一步分析了能量局域化程度与扩散层厚度、入射声子频率之间的关系,发现界面扩散层的厚度越大或入射声子频率越高局域化程度越高.在图 7(b)中,TA 模声子波包 ($f = 3.95$ THz) 在穿过具有不同厚度 ($L = 5.10, 3.85, 2.55$ nm) 扩散层的 GaN/AlN 界面时扩散层内部的能量演化. $t = 20$ ps 时,波包开始进入界面扩散层,能量迅速升高.随着时间延长,波包慢慢穿过界面,能量的衰减速度反映了波包穿过界面的速度.可以发现扩散层的厚度越大,能量的耗散速度越慢,而当 $t = 60$ ps 时,仍有一部分能量局域化在扩散层内.最后的透射性分析显示,无论界面非晶层还是扩散层均会显著降低声子的透射率,而且厚度越大透射率越低.

为了提高声子的透射率,近期通过分子动力学模拟结合模拟退火技术,发现 GaN/AlN 界面非晶层可以重新结晶^[11],如图 7(c)所示. a 为理想光滑界面, b 为非晶界面, c—e 为不同程度退火处理后的界面.通过调整加热温度和退火速率,最终优化后的界面 e 可以将界面热导提升约 60%. 声子振动频谱分析显示,重构后的界面形貌可以提高界面两侧振动耦合.从声子波包模拟结果发现,界面非晶层重构后, LA 和 TA 声子的透射率均明显提高.有趣的是,由于 AlN 存在多种相态,在退火过程中,发现 AlN 会优先生成能量更低、结构更加稳定的岩盐矿相而非原先的纤锌矿相,从 c—e 也可以看出 AlN 重构部分与原始结构明显不同.事实上,AlN 的岩盐矿相热导率只有其纤锌矿相的 $1/4$ ^[74],且两者晶格取向存在差异,所以,最终优化后的界面热导相较理想光滑界面依然存在明显差距.

实验上, Mu 等^[68]利用室温表面活化键合技术结合退火技术将 GaN/SiC 的界面热导提升了 36%. 图 7(d) 为 GaN/SiC 键合界面退火前后的扫描电子显微镜图象.退火前,界面处存在一个大概 3 nm 厚的非晶薄层(主要是 SiC 侧),这是 GaN 和 SiC 在表面活化过程中由于离子束轰击造成的.而经过高温退火处理后,该非晶层明显减少,界面热导测量结果也由 169 提高到 230 $\text{MW}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{K}^{-1}$,该结果与目前已知 GaN/SiC 界面热导测量值中的最高值接近^[75].

4 GaN 范德瓦耳斯键界面热导调控

以 GaN 作为衬底的二维电子器件,如 MoS_2

场效应晶体管^[76], GaN 衬底通常依靠范德瓦耳斯力与二维材料连接.此时,集中在沟道层内的焦耳热有两条散热路径:一是沿二维材料的面内方向扩散;二是沿二维材料的面外方向通过衬底散出.这两个路径的散热效率分别取决于二维材料的本征热导率和二维材料与衬底之间的界面热导.由于二维材料的选取取决于器件的功能需求,所以目前大多数研究集中在如何提高二维材料与衬底之间的界面热导.

4.1 增加界面声子散射

与化学键结合的界面不同,二维材料的 ZA 模声子与衬底内具有相同偏振方向的 LA 或 LO 模声子直接耦合,被认为是二维/三维范德瓦耳斯异质界面的主要热传输通道^[35,77].因为界面以及二维材料内弱的声子耦合本质导致二维材料的 ZA 模声子与衬底的面内 TA 或 TO 模声子耦合较弱.尤其对于缺陷较少的结晶衬底,从二维材料穿过界面进入到衬底的 ZA 模声子由于缺少相应的声子碰撞事件,如声子-缺陷、声子-声子散射,很可能在衬底内经历弹道输运后被再次反弹回二维材料,这在一定程度上降低了声子的透射率.因此,可以在衬底或界面附近适当制造声子散射来增强二维材料与衬底之间的声子耦合.

近期,研究发现将 GaN 衬底表面粗糙化处理可以大幅提高 MoS_2/GaN 界面热导^[18],如图 8(a)所示.随着衬底表面粗糙度 δ 增加, MoS_2/GaN 界面热导迅速增加,当 $\delta = 1.92$ 时界面热导达到峰值约 28 $\text{MW}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{K}^{-1}$,相较光滑衬底的界面 ($\delta = 0$, 约 7 $\text{MW}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{K}^{-1}$) 提升了 4 倍.通过振动频谱分析发现,粗糙的衬底表面可以消除 MoS_2 与 GaN 之间的层间滑移运动,使 MoS_2 的表面出现轻微起伏,这会使 MoS_2 面内声子有机会通过散射流向面外声子,然后进入 GaN 衬底.另外,随着 δ 增加,衬底表面的中、高频声子数量减少,而低频声子相应增加,如图 8(b)所示,这也会使 MoS_2 与 GaN 的能量耦合增加.然而,当 δ 过大的时,衬底表层出现的原子间隙会减少 MoS_2 与 GaN 的界面接触面积,降低能量传输效率.因此,衬底表面粗糙化会产生两个竞争机制: 1) 声子耦合增加提高界面热导; 2) 原子间隙减少能量传输通道,降低界面热导.在实际应用中,衬底表面由于氧化而变得粗糙极其普遍,例如 Loh 和 Chua^[78]发现在 MoS_2

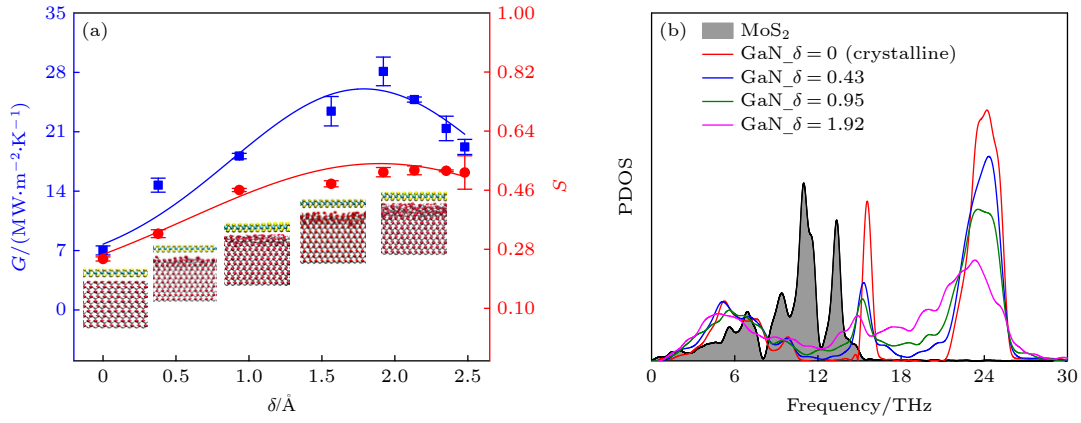


图 8 (a) GaN/MoS₂ 界面热导和声子态密度重叠度 S 随衬底表面粗糙度 δ 的变化^[18]; (b) MoS₂ 和 GaN 衬底不同粗糙度表面层原子的声子态密度分布^[18]
 Fig. 8. (a) Evolution of thermal boundary conductance and the density of phonon states overlap factor S as a function of surface roughness δ ^[18]; (b) density of phonon states distributions for MoS₂ and GaN surface atoms with different δ ^[18].

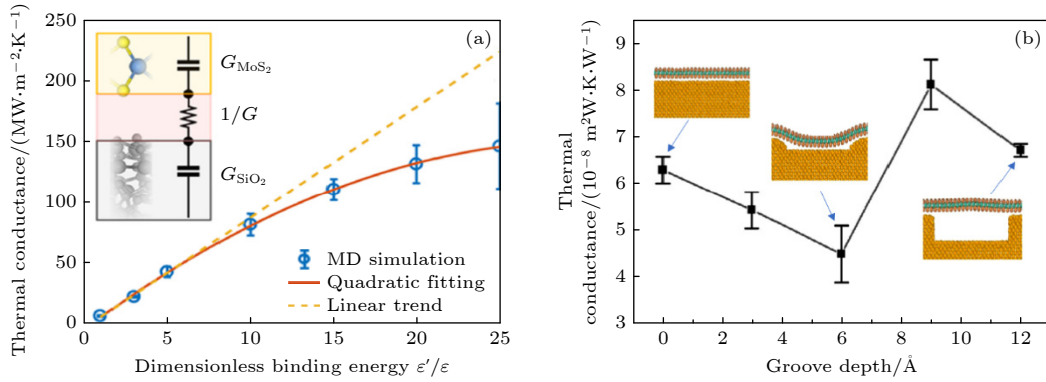


图 9 (a) SiO₂/MoS₂ 界面热导与界面结合能的关系^[82]; (b) SiO₂/MoS₂ 界面热导与衬底表面凹槽深度的关系^[83]
 Fig. 9. (a) Correlation between SiO₂/MoS₂ thermal boundary conductance and interface binding energy^[82]; (b) correlation between SiO₂/MoS₂ thermal boundary conductance and groove depth^[83].

生长过程中, 在 Al 衬底表面生成一个 0.65 nm 厚的 Al₂O₃ 非晶/钝化层. 通过该研究, 他们证明可以通过控制衬底表面粗糙度提高二维/三维范德瓦耳斯弱耦合界面热传输效率.

4.2 增加界面结合强度

相较增加界面声子散射, 通过调节界面结合强度优化弱耦合界面热导更有效, 应用也更广泛. 提高界面结合强度有利于增加界面两侧振动耦合, 提高界面热传输效率. 虽然在 GaN 基范德瓦耳斯异质界面还没有该方法应用报道, 但其他相关界面的研究同样具有参考价值.

增强弱耦合界面结合强度的方式可以分为物理法和化学法. 物理法主要借助物理外力, 例如外加电场^[79]和施加压力^[50]等. 化学法主要指通过化学修饰改变界面结合环境, 如在界面添加化学交联

剂^[80,81]. 通过改变界面结合能, Zhang 等^[82]发现随着界面结合强度增加, MoS₂/SiO₂ 界面热导呈现先增加后收敛的趋势, 如图 9(a) 所示. 而对于 MoS₂ 面内热导率, 趋势则相反, 即先迅速降低然后趋于饱和. 谱能量密度分析显示, 界面结合强度增加会使 MoS₂ 内声子出现局域化现象, 这是界面处力场分布不均造成的, 也是导致 MoS₂/SiO₂ 界面热导和 MoS₂ 热导率收敛的原因. 除了上述提到的方法, 适当的设计界面形貌也可以达到提高界面结合强度的效果. 例如, Liu 等^[83]发现在衬底表面构建凹槽可以提高界面局部耦合强度, 如图 9(b) 表示衬底表面凹槽的深度对 SiO₂/MoS₂ 界面热导的影响. 当凹槽宽度固定, 增加凹槽的深度, SiO₂/MoS₂ 界面热阻呈现先减少后增加趋势, 当槽深为 0.6 nm 时界面热阻降低了 29%. 径向分布函数和受力分析显示, 当槽深小于 0.6 nm 时, MoS₂ 悬空部分受衬

底吸引产生受拉形变. 而根据受力平衡, MoS₂ 支撑的部分则受排斥力, 这样才可以与悬空部分的吸引力抵消. MoS₂ 支撑的部分受力增加会相应的增加界面结合力, 进而提高界面热传输效率. 随着槽深进一步加深, SiO₂ 对 MoS₂ 的吸引力不足支撑其变形, 因此又迅速恢复平面, 巨大的界面间隙使界面热阻又重新变大. 在 MoS₂ 形变过程中, 面内声子散射增强, 因此面内热导率与界面热导表现出刚好相反的趋势, 先降低后增加.

值得注意的是, 目前的二维/衬底范德瓦耳斯异质结界面热导提高手段普遍会影响到二维材料的本征属性. 例如, 实验上使用物理外力增加界面结合强度的同时可能损害二维材料的机械性能. 通过修改衬底表面形貌或粗糙度方式在增加二维材料与衬底声子耦合同时, 增加的声子散射也会影响二维材料的本征热导率和电子迁移率. 而前面提到, 二维材料的面内热导和界面热导都是散热的有效途径. 当然, 为了减少衬底对二维材料的影响, 部分研究尝试在二维材料和衬底之间加入缓冲层如 BN^[84] 或增加二维材料层数^[85]. 这些方法在一定程度上可以起到保护二维材料作用, 但增加的界面数量会带来额外界面热阻. 因为与化学键结合的界面不同, 范德瓦耳斯界面受晶格失配约束小、界面热阻高, 添加缓冲层通常会增加界面热阻. 因此, 如何在不损害二维材料本征属性的前提下, 提高二维/三维异质结界面热导是一个值得关注的话题.

5 总结

GaN 外延界面由于晶格失配和热失配不可避免存在各种缺陷, 如界面非晶层、晶格位错、应力、界面空隙等. 在微纳尺度, 这些界面缺陷会显著影响界面热传输效率, 复杂界面热输运机理. 近些年, 经过国内外学者的不懈努力, 在降低 GaN 界面缺陷、提高 GaN 界面热传输效率方面取得了重要进展. 本文讨论了几种典型的 GaN 界面热导优化方法以及每种方法背后蕴含的物理机制, 例如添加界面缓冲层、图形化界面形貌、掺杂、退火处理等. 另外, 针对范德瓦耳斯键结合的弱耦合界面, 总结了两种界面热导优化方法: 增加界面声子散射和提高界面结合强度. 希望通过该工作, 可以为 GaN 器件结构设计提供有价值参考.

参考文献

- [1] Li M, Chen F L, Kocher C, Zhang H, Li S X, Huang F, Zhang J, Taylor R A 2020 *ACS Appl. Electron. Mater.* **2** 571
- [2] Cheng Z 2021 *Acta Phys. Sin.* **70** 236502 (in Chinese) [程哲 2021 *物理学报* **70** 236502]
- [3] Li Y H, Qi R S, Shi R C, Hu J N, Liu Z T, Sun Y W, Li M Q, Li N, Song C L, Wang L, Hao Z B, Luo Y, Xue Q K, Ma X C, Gao P 2022 *Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A.* **119** e2117027119
- [4] Filippov K A, Balandin A A 2003 *MRS Internet J. Nitride Semicond. Res.* **8** 4
- [5] Cheng Z, Mu F W, Yates L, Suga T, Graham S 2020 *ACS Appl. Mater. Interfaces* **12** 8376
- [6] Shih H Y, Shiojiri M, Chen C H, Yu S F, Ko C T, Yang J R, Lin R M, Chen M J 2015 *Sci. Rep.* **5** 13671
- [7] Kai C H, Wang R, Yang D R, Pi X D 2021 *J. Synth. Cryst.* **50** 1780 (in Chinese) [开翠红, 王蓉, 杨德仁, 皮孝东 2021 *人工晶体学报* **50** 1780]
- [8] Lee S B, Ju J W, Kim Y M, Yoo S J, Kim J G, Han H N, Lee D N 2015 *AIP Adv.* **5** 077180
- [9] Yates L, Anderson J, Gu X, Lee C, Bai T Y, Mecklenburg M, Aoki T, Goorsky M S, Kuball M, Piner E L, Graham S 2018 *ACS Appl. Mater. Interfaces* **10** 24302
- [10] Chen J, Xu X F, Zhou J, Li B W 2022 *Rev. Mod. Phys.* **94** 025002
- [11] Wang Q J, Wang X J, Liu X J, Zhang J 2021 *J. Appl. Phys.* **129** 235102
- [12] Tian Z T, Esfarjani K, Chen G 2012 *Phys. Rev. B* **86** 235304
- [13] Jani O, Yu H B, Trybus E, Jampana B, Ferguson I, Doolittle A, Honsberg C 2007 *22nd European Photovoltaic Solar Energy Conference* Milan, Italy September 3-7, 2007 p64
- [14] Anaya J, Rossi S, Alomari M, Kohn E, Tóth L, Pécz B, Hobart K D, Anderson T J, Feygelson T I, Pate B B, Kuball M 2016 *Acta Mater.* **103** 141
- [15] Krishnamoorthy S, Lee E W, Lee C H, Zhang Y W, McCulloch W D, Johnson J M, Hwang J, Wu Y Y, Rajan S 2016 *Appl. Phys. Lett.* **109** 183505
- [16] Pan D K, Zong Z C, Yang N 2022 *Acta Phys. Sin.* **71** 086302 (in Chinese) [潘东楷, 宗志成, 杨诺 2022 *物理学报* **71** 086302]
- [17] Zhang H G, Wang H Y, Xiong S Y, Han H X, Volz S, Ni Y X 2018 *J. Phys. Chem. C* **122** 2641
- [18] Wang Q J, Zhang J, Xiong Y C, Li S H, Chernysh V, Liu X J 2023 *ACS Appl. Mater. Interfaces* **15** 3377
- [19] Lyeo H K, Cahill D G 2006 *Phys. Rev. B* **73** 144301
- [20] Zhou X W, Jones R E, Kimmer C J, Duda J C, Hopkins P E 2013 *Phys. Rev. B* **87** 094303
- [21] Bao H, Chen J, Gu X K, Cao B Y 2018 *ES Energy Environ.* **1** 16
- [22] Ziman J M 2001 *Electrons and Phonons: The Theory of Transport Phenomena in Solids* (Oxford: Oxford university press) p459
- [23] Cheng Z, Li R Y, Yan X X, Jernigan G, Shi J J, Liao M E, Hines N J, Gadre C A, Idrobo J C, Lee E, Hobart K D, Goorsky M S, Pan X Q, Luo T F, Graham S 2021 *Nat. Commun.* **12** 6901
- [24] Gordiz K, Henry A 2016 *J. Appl. Phys.* **119** 015101
- [25] Giri A, Hopkins P E 2019 *Adv. Funct. Mater.* **30** 1903857
- [26] Sääskilähti K, Oksanen J, Volz S, Tulkki J 2015 *Phys. Rev. B* **91** 115426
- [27] Chen X K, Pang M, Chen T, Du D, Chen K Q 2020 *ACS Appl. Mater. Interfaces* **12** 15517
- [28] Wu D, Ding H, Fan Z Q, Jia P Z, Xie H Q, Chen X K 2022

- Appl. Surf. Sci.* **581** 152344
- [29] Ni Y X, Zhang H G, Hu S, Wang H Y, Volz S, Xiong S Y 2019 *Int. J. Heat Mass Transfer* **144** 118608
- [30] Sääskilähti K, Oksanen J, Volz S, Tulkki J 2015 *Phys. Rev. B* **92** 245411
- [31] Gordiz K, Henry A 2015 *New J. Phys.* **17** 103002
- [32] Gordiz K, Henry A 2017 *J. Appl. Phys.* **121** 025102
- [33] Zhou Y G, Hu M 2017 *Phys. Rev. B* **95** 115313
- [34] Feng T L, Zhong Y, Shi J J, Ruan X L 2019 *Phys. Rev. B* **99** 045301
- [35] Feng T L, Yao W J, Wang Z Y, Shi J J, Li C, Cao B Y, Ruan X L 2017 *Phys. Rev. B* **95** 195202
- [36] Huang Z X, Wang Q J, Liu X Y, Liu X J 2023 *Phys. Chem. Chem. Phys.* **25** 2349
- [37] Field D E, Cuenca J A, Smith M, Fairclough S M, Massabau F C, Pomeroy J W, Williams O, Oliver R A, Thayne I, Kuball M 2020 *ACS Appl. Mater. Interfaces* **12** 54138
- [38] Malakoutian M, Field D E, Hines N J, Pasayat S, Graham S, Kuball M, Chowdhury S 2021 *ACS Appl. Mater. Interfaces* **13** 60553
- [39] Song Y W, Shoemaker D, Leach J H, McGray C, Huang H L, Bhattacharyya A, Zhang Y Y, Gonzalez-Valle C U, Hess T, Zhukovsky S, Ferri K, Lavelle R M, Perez C, Snyder D W, Maria J P, Ramos-Alvarado B, Wang X J, Krishnamoorthy S, Hwang J, Foley B M, Choi S 2021 *ACS Appl. Mater. Interfaces* **13** 40817
- [40] Zheng W D, McClellan C J, Pop E, Koh Y K 2022 *ACS Appl. Mater. Interfaces* **14** 22372
- [41] El Sachat A, Könenmann F, Menges F, Del Corro E, Garrido J A, Torres C M S, Alzina F, Gotsmann B 2019 *2D Mater.* **6** 025034
- [42] Taube A, Judek J, Lapinska A, Zdrojek M 2015 *ACS Appl. Mater. Interfaces* **7** 5061
- [43] Yalon E, McClellan C J, Smithe K K H, Munoz Rojo M, Xu R L, Suryavanshi S V, Gabourie A J, Neumann C M, Xiong F, Farimani A B, Pop E 2017 *Nano Lett.* **17** 3429
- [44] Zhang X, Sun D Z, Li Y L, Lee G H, Cui X, Chenet D, You Y M, Heinz T F, Hone J C 2015 *ACS Appl. Mater. Interfaces* **7** 25923
- [45] Yalon E, Aslan B, Smithe K K H, McClellan C J, Suryavanshi S V, Xiong F, Sood A, Neumann C M, Xu X Q, Goodson K E, Heinz T F, Pop E 2017 *ACS Appl. Mater. Interfaces* **9** 43013
- [46] Behranginia A, Hemmat Z, Majee A K, Foss C J, Yasaei P, Aksamija Z, Salehi-Khojin A 2018 *ACS Appl. Mater. Interfaces* **10** 24892
- [47] Waltereit P, Brandt O, Trampert A, Ramsteiner M, Reiche M, Qi M, Ploog K H 1999 *Appl. Phys. Lett.* **74** 3660
- [48] Tanaka S, Iwai S, Aoyagi Y 1997 *J. crystal growth* **170** 329
- [49] Siddique A, Ahmed R, Anderson J, Nazari M, Yates L, Graham S, Holtz M, Piner E L 2019 *ACS Appl. Electron. Mater.* **1** 1387
- [50] Losego M D, Grady M E, Sottos N R, Cahill D G, Braun P V 2012 *Nat. Mater.* **11** 502
- [51] Hsieh W P, Lyons A S, Pop E, Keblinski P, Cahill D G 2011 *Phys. Rev. B* **84** 184107
- [52] Li M, Zhang J C, Hu X J, Yue Y N 2015 *Appl. Phys. A* **119** 415
- [53] English T S, Duda J C, Smoyer J L, Jordan D A, Norris P M, Zhigilei L V 2012 *Phys. Rev. B* **85** 035438
- [54] Polanco C A, Rastgarkafshgarkolaei R, Zhang J J, Le N Q, Norris P M, Ghosh A W 2017 *Phys. Rev. B* **95** 195303
- [55] Lee E, Luo T F 2017 *Phys. Chem. Chem. Phys.* **19** 18407
- [56] Hu M, Zhang X L, Poulidakos D, Grigoropoulos C P 2011 *Int. J. Heat Mass Transfer* **54** 5183
- [57] Chen B, Zhang L F 2015 *J. Phys. Condens. Matter.* **27** 125401
- [58] Xiong G H, Wang J S, Ma D K, Zhang L F 2020 *EPL (Europhysics Letters)* **128** 54007
- [59] Ma D K, Xing Y H, Zhang L F 2023 *J. Phys. Condens. Matter.* **35** 053001
- [60] Yun F, Reshchikov M A, He L, Morkoç H, Inoki C K, Kuan T S 2002 *Appl. Phys. Lett.* **81** 4142
- [61] Neudeck P G, Powell J A, Beheim G M, Benavage E L, Abel P B, Trunek A J, Spry D J, Dudley M, Vetter W M 2002 *J. Appl. Phys.* **92** 2391
- [62] Lee E, Zhang T, Hu M, Luo T 2016 *Phys. Chem. Chem. Phys.* **18** 16794
- [63] Tao L, Theruvakkattil Sreenivasan S, Shahsavari R 2017 *ACS Appl. Mater. Interfaces* **9** 989
- [64] Lee E, Zhang T, Yoo T, Guo Z, Luo T F 2016 *ACS Appl. Mater. Interfaces* **8** 35505
- [65] Liu X J, Zhang G, Zhang Y W 2016 *Nano Lett.* **16** 4954
- [66] Lee E, Luo T F 2018 *Appl. Phys. Lett.* **112** 011603
- [67] Li R Y, Gordiz K, Henry A, Hopkins P E, Lee E, Luo T F 2019 *Phys. Chem. Chem. Phys.* **21** 17029
- [68] Zhou Y, Zhou S, Wan S, Zou B, Feng Y X, Mei R, Wu H, Shigekawa N, Liang J B, Tan P H, Kuball M 2023 *Appl. Phys. Lett.* **122** 082103
- [69] Mu F W, Cheng Z, Shi J J, Shin S, Xu B, Shiomi J, Graham S, Suga T 2019 *ACS Appl. Mater. Interfaces* **11** 33428
- [70] Spindlberger A, Kyslychyn D, Thumfart L, Adhikari R, Rastelli A, Bonanni A 2021 *Appl. Phys. Lett.* **118** 062105
- [71] Pécz B, Makkai Z, Frayssinet E, Beaumont B, Gibart P 2005 *Phys. Status Solidi C* **2** 1310
- [72] Wang Q J, Zhang J, Chernysh V, Liu X J 2023 arXiv: 2306.14901 [physics.app-ph]
- [73] Liu X Y, Wang Q J, Wang R Z, Wang S, Liu X J 2023 *J. Appl. Phys.* **133** 095101
- [74] Shulumba N, Raza Z, Hellman O, Janzén E, Abrikosov I A, Odén M 2016 *Phys. Rev. B* **94** 104305
- [75] Ziade E, Yang J, Brummer G, Nothern D, Moustakas T, Schmidt A J 2015 *Appl. Phys. Lett.* **107** 091605
- [76] Lee E W, Lee C H, Paul P K, Ma L, McCulloch W D, Krishnamoorthy S, Wu Y Y, Arehart A R, Rajan S 2015 *Appl. Phys. Lett.* **107** 103505
- [77] Ong Z Y, Qiu B, Xu S L, Ruan X L, Pop E 2018 *J. Appl. Phys.* **123** 115107
- [78] Loh T A, Chua D H 2014 *ACS Appl. Mater. Interfaces* **6** 15966
- [79] Muruganathan M, Sun J, Imamura T, Mizuta H 2015 *Nano Lett.* **15** 8176
- [80] Liu X J, Zhang G, Zhang Y W 2014 *J. Phys. Chem. C* **118** 12541
- [81] Chen W, Zhang J C, Yue Y N 2016 *Int. J. Heat Mass Transfer* **103** 1058
- [82] Zhang L N, Zhong Y, Qian X, Song Q C, Zhou J W, Li L, Guo L, Chen G, Wang E N 2021 *ACS Appl. Mater. Interfaces* **13** 46055
- [83] Liu W X, Huang X N, Yue Y N 2023 *Int. J. Heat Mass Transfer* **201** 123673
- [84] Liu D H, Chen X S, Yan Y P, et al. 2019 *Nat. Commun.* **10** 1188
- [85] Sadeghi M M, Jo I, Shi L 2013 *Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A.* **110** 16321

SPECIAL TOPIC—Modification of material properties by defects and dopants

Interface engineering moderated interfacial thermal conductance of GaN-based heterointerfaces^{*}

Wang Quan-Jie[#] Deng Yu-Ge[#] Wang Ren-Zong Liu Xiang-Jun[†]

(State Key Laboratory for Modification of Chemical Fibers and Polymer Materials, Institute of Micro/Nano Electromechanical System,
College of Mechanical Engineering, Donghua University, Shanghai 201600, China)

(Received 16 May 2023; revised manuscript received 21 July 2023)

Abstract

Gallium nitride (GaN) has great potential applications in the field of high-frequency and high-power electronic devices because of its excellent material properties such as wide band gap, high electron mobility, high breakdown field strength. However, the high power GaN electronic device also exhibits significant self-heating effects in operation, such as a large amount of Joule heat localized in the thermal channel, and heat dissipation has become a bottleneck in its applications. The interface thermal conductance (ITC) between GaN and its substrate is the key to determining the thermal dissipation. In this work the various GaN interface defects and their effects on ITC are first discussed, and then some methods of studying interface thermal transport are introduced, including theoretical analysis and experimental measurements. Then, some GaN ITC optimization strategies developed in recent years are introduced through comparing the specific cases. In addition to the common chemical bond interface, the weak coupling interface by van der Waals bond is also discussed. Finally, a summary for this review is presented. We hope that this review can provide valuable reference for actually designing GaN devices.

Keywords: GaN, interface defects, interfacial thermal conductance, phonon transport

PACS: 63.20.-e, 44.20.+b, 65.40.-b, 61.72.-y

DOI: 10.7498/aps.72.20230791

^{*} Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 52150610495, 52206080) and the Shanghai Committee of Science and Technology, China (Grant Nos. 21TS1401500, 22YF1400100).

[#] These authors contributed equally.

[†] Corresponding author. E-mail: xjliu@dhu.edu.cn



界面工程调控GaN基异质结界面热传导性能研究

王权杰 邓宇戈 王仁宗 刘向军

Interface engineering moderated interfacial thermal conductance of GaN-based heterointerfaces

Wang Quan-Jie Deng Yu-Ge Wang Ren-Zong Liu Xiang-Jun

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 72, 226301 (2023) DOI: 10.7498/aps.72.20230791

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.72.20230791>

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/碳化硅异质界面热学特性的分子动力学模拟

Thermal property of graphene/silicon carbide heterostructure by molecular dynamics simulation

物理学报. 2021, 70(18): 187302 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20210613>

纳米尺度热物理中的声子弱耦合问题

Phonon weak couplings in nanoscale thermophysics

物理学报. 2022, 71(8): 086302 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20220036>

超导转变边沿探测器梁架尺寸估算方法

Estimation method for beam size of superconducting transition edge detector

物理学报. 2022, 71(15): 158502 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20220335>

石墨烯基复合热界面材料导热性能研究进展

Research progress of thermal transport in graphene-based thermal interfacial composite materials

物理学报. 2022, 71(16): 166501 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20220306>

基于界面原子混合的材料导热性能

Thermal conductivity of materials based on interfacial atomic mixing

物理学报. 2022, 71(9): 093102 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20211451>

表面修饰工程协同优化Bi₂Te₃基微型热电器件的界面性能

Interface performance of Bi₂Te₃-based micro thermoelectric devices optimized synergistically by surface modification engineering

物理学报. 2022, 71(16): 167101 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20220549>