

石墨烯/GaN 异质结构界面热输运性质的分子动力学研究*

刘东静 周福 胡志亮 黄家强†

(桂林电子科技大学机电工程学院, 广西制造系统与先进制造技术重点实验室, 桂林 541004)

(2024 年 1 月 4 日收到; 2024 年 4 月 29 日收到修改稿)

异质结构界面热输运的性能决定微纳米器件工作的可靠性. 本文采用分子动力学方法, 研究石墨烯/GaN 三明治结构异质界面的热输运特性, 分析温度、缺陷以及尺寸对异质结构界面热导的影响. 研究发现, 随着温度的升高, 界面热导增大; 当温度为 1100 K 时, 3 层石墨烯异质结构的界面热导增大 61%, 分析认为这主要是温度升高导致晶格振动增加, 进而激发更多的平面外声子. GaN 中的少量空位缺陷导致界面热导增大, 当缺陷率为 20% 时, 界面热导达到最大值 $0.0357 \text{ GW}/(\text{m}^2\cdot\text{K})$, 分析认为缺陷会增加额外的热输运通道; 随后界面热导开始降低, 分析认为缺陷率增大导致界面耦合强度降低. 随着 GaN 层数从 8 层增加到 24 层, 界面热导下降, 计算声子模态发现参与界面热输运声子数量减少; 而石墨烯从 2 层到 6 层时, 界面热导先上升后下降, 分析认为这是与声子匹配和耦合强度的初期提高和后期声子散射及局部化增加有关. 该研究结果为调控微电子器件界面热输运提供理论依据.

关键词: 异质结构, 界面热导, 空位缺陷, 尺寸效应

PACS: 79.60.Jv, 65.80.Ck, 02.70.Ns, 68.55.Ln

DOI: 10.7498/aps.73.20240021

1 引言

随着器件集成度的提高, 电子设备的可靠性受到人们的关注^[1,2]. 石墨烯作为一种新兴的二维材料, 具有优异的导热性和光电特性. 石墨烯材料被认为是一种革命性的材料, 具有巨大的发展潜力^[3,4]. GaN 作为第三代半导体材料, 具备高频、高效、高功率、耐高压、耐高温、抗辐射能力强等优越性能^[5-7]. 石墨烯/GaN 异质结构的结合, 在功率器件、光电二极管和光电晶体管等电子器件中具有巨大的应用潜力. 科研人员针对石墨烯和 GaN 材料开展了相关的研究工作. Alexander 等^[8]实验发现室温下

悬浮单层石墨烯热导率高达 $5300 \text{ W}/\text{m}\cdot\text{K}$. Bao 等^[9]发现, 当长度为 250 nm 时, 石墨烯/GaN 的导热系数为 $(1567.5\pm 46.4) \text{ W}/\text{m}\cdot\text{K}$. Guo 等^[10]发现石墨烯纳米带的热导率随 SiC 衬底掺杂量的变化规律, 研究表明在热传输过程中, 衬底与单层石墨烯之间存在显著的相互作用, 导致热导率大幅降低.

在电子器件中器件衬底占据着传热的关键地位, 开展石墨烯基异质结构的界面热导 (interface thermal conductance, ITC), 这对于提高电子器件的散热效率及其可靠性具有重要意义^[11-14]. 近年来, Yue 等^[15]利用拉曼测热法和焦耳加热法研究石墨烯和 4H-SiC 之间的界面热阻. 研究发现, 在

* 广西制造系统与先进制造技术重点实验室 (批准号: 19-050-44-002Z)、国家自然科学基金 (批准号: 62264003)、广西自然科学基金 (批准号: 2023GXNSFAA026188) 和桂林科学研究技术发展计划 (批准号: 20220107-2) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: huangjiaqiang201@163.com

加热过程中产生的热应力导致石墨烯和 SiC 之间存在高热成团现象. Wang 等^[16]研究 Si/3C-SiC/石墨烯复合薄膜的界面热阻,发现界面热阻随温度升高而增大. Wang 等^[17]探讨石墨烯-石蜡复合材料的界面热阻. 研究表明,加氢处理能显著降低界面热阻,而缺陷和掺杂的影响很小. Liu 等^[14,18]研究缺陷比、硼/氮掺杂和尺寸对石墨烯/Si 异质结构导热率的影响,发现单个空位缺陷对导热率的影响较为显著. Huang 等^[19]计算石墨烯/聚合物复合异质结构的导热系数,结果表明石墨烯对复合材料导热系数的尺寸具有依赖性. Tao 等^[20]利用具有最佳几何形状的纳米工程交错结构研究 GaN/金刚石界面. 结果表明,引入创新结构和石墨烯缓冲层有效降低异质结构的界面热阻. Yang 等^[21]研究 6H-SiC/石墨烯缓冲层/GaN 在异质界面上的热输运. 研究发现,在石墨烯层中引入单空位缺陷能使界面热阻降低 9.6%,这表明引入缺陷可以有效地降低界面热阻. Bao 等^[22]研究 Al/MoS₂/GaN 和 Al/石墨烯/GaN 界面上的界面热输运. 研究发现,Al/GaN 的 ITC 高于 Al/石墨烯/GaN 和 Al/MoS₂/GaN.

综上所述,目前学者的研究主要集中在理想条件下石墨烯/GaN 异质结构的界面热输运特性研究,针对不同温度、缺陷及尺寸等影响界面传输的关键参数研究还相对较少. 因此,本文旨在探讨分析石墨烯/GaN 异质结构在不同的温度、尺寸以及缺陷率的界面热输运特性. 该工作对于异质界面性能调控来提升微纳电子器件的可靠性提供理论基础.

2 模型构建与模拟过程

本文构建一种三明治夹层结构,选择纤锌矿结构作为 GaN 的基础结构,石墨烯层位于多层 GaN 结构的中间. 为避免较大的晶格失配,经过计算后,石墨烯的初始结构为 13×9×1,其晶格尺寸为 $a = 31.98 \text{ \AA}$, $b = 38.34 \text{ \AA}$, $c = 3.40 \text{ \AA}$; GaN 的初始结构为 10×7×1,晶格尺寸为 $a = 32.16 \text{ \AA}$, $b = 38.99 \text{ \AA}$, $c = 5.24 \text{ \AA}$. 首先建立初始异质结构,然后在 z 方向上进行扩胞,得到 3 层石墨烯/12 层 GaN 异质结构,如图 1 所示.

本文采用大规模原子/分子大规模并行模拟器 (LAMMPS)^[23,24] 进行非平衡分子动力学 (non-

equilibrium molecular dynamics, NEMD) 模拟. 石墨烯原子之间的相互作用通过 AIREBO^[25,26] 势函数描述,而 GaN 原子之间的相互作用通过 Stillinger-Weber^[27] 势函数描述. 此外,利用 Lennard-Jones (LJ)^[14] 势函数描述石墨烯之间的界面原子与 GaN 之间的相互作用,该函数由 (1) 式定义:

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

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. 具体参数为 $\varepsilon_{\text{C-Ga}} = 9.0521 \text{ meV}$, $\sigma_{\text{C-Ga}} = 3.6678 \text{ \AA}$, $\varepsilon_{\text{C-N}} = 3.691 \text{ meV}$, $\sigma_{\text{C-N}} = 3.3458 \text{ \AA}$, LJ 势函数的截至距离为 2.8σ .

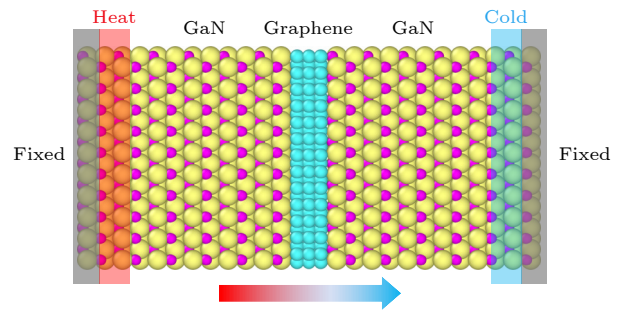


图 1 3 层石墨烯/12 层 GaN 异质结构模型

Fig. 1. Model of 3-layer graphene/12-layer GaN heterostructure.

仿真的 3 个方向 (X , Y , Z) 上均采用周期边界条件. 在 Z 方向的两端固定特定数量的原子,设置左端为热源,右端为冷源,以更准确地模拟热输运现象. 在 NEMD 模拟之前,首先采用共轭梯度法使模型的能量最小化,从而达到静力学平衡. 然后,为了对系统进行动力学优化,在 NVT (常原子数 N 、恒体积 V 、恒温度 T) 系综下进行弛豫,其中温度为 300 K. 其次,将 NVT 系综切换成 NVE (常原子数 N 、常体积 V 、常总能量 E) 系综后,采用朗之万法运行 3×10^6 步. 该设置有助于确保系统在稳定状态下运行. 弛豫完成后,系统在朗之万方法下继续运行 3×10^6 步,计算获得温度的数据如图 2 所示.

为保证 ITC 计算的准确性和可靠性,在同一模拟中进行多次测量,然后求取平均值. ITC 由 (2) 式定义^[22]:

$$G = \frac{J(t)}{\Delta T}, \quad (2)$$

式中, G 为石墨烯/GaN 异质结构的 ITC, $J(t)$ 为热通量密度, ΔT 为界面处的温差. $J(t)$ 由 (3) 式定义:

$$J(t) = \frac{dE}{Adt}, \quad (3)$$

其中, A 为异质结构的界面面积, dE 为系统中原子交换的总能量, dt 为原子交换能量的时间.

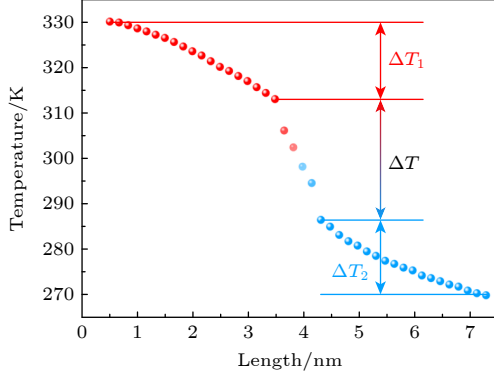


图 2 石墨烯/GaN 异质结构沿热流方向的温度分布 (ΔT_1 为 GaN 层热源温度变化, ΔT_2 为 GaN 层冷源温度变化, ΔT 为石墨烯中间层温度变化)

Fig. 2. Temperature distribution of graphene/GaN heterostructure along the heat flow direction (ΔT_1 is the temperature change of the heat source of GaN layer, ΔT_2 is the cold source temperature change of GaN layer, and ΔT is the temperature change of the middle layer of graphene).

在异质结构中, 声子主要在界面上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, 声子碰撞的概率与材料中相应的声子态密度^[28] (phonon density of states, PDOS) 呈正相关. 此外, 声子可分为平面内 (X 和 Y 方向) 声子和平面外 (Z 方向) 声子, 平面外声子在界面热运输中起主导作用, 其对 ITC 的影响明显高于平面内声子. 因此, 本文重点分析平面外 PDOS 来研究界面热运输特性, 使用 PDOS 分析 ITC 的变化. 通过速度自相关函数 (velocity autocorrelation function, VACF) 方程 (4) 的傅里叶变换, 得到 PDOS 的定义:

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

$$\text{PDOS}(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega t} \text{VACF}(t) dt, \quad (5)$$

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} , 因为 VACF 是归一化的和无量纲的. PDOS 中的重叠可以用来估计声子以非弹性散射的形式通过

界面的运输. 重叠积分因子 S ^[29,30] 定义为

$$S = \frac{\int P_{\text{Gr}}(\omega) \cdot P_{\text{GaN}}(\omega)}{\int P_{\text{Gr}}(\omega) \cdot \int P_{\text{GaN}}(\omega)}, \quad (6)$$

其中, P_{GaN} 和 P_{Gr} 分别为 GaN 和石墨烯的 PDOS.

在界面热运输中, 声子局域化是由原子缺陷、界面和结构变形等引起的. ITC 的变化可以用平面外声子的局域化程度来解释. 本研究分析声子参与率^[31] (phonon participation rate, PPR), 以更深入地研究声子对界面热运输的影响. PPR 定义为

$$R(\omega) = \frac{1}{N} \frac{\left[\sum_i P_i(\omega) \right]^2}{\sum_i P_i(\omega)^4}, \quad (7)$$

其中, $P_i(\omega)$ 是 i 原子在振动频率 ω 下的 PDOS.

3 结果与分析

3.1 温度对石墨烯/GaN 异质结构 ITC 影响

在异质结构研究中, GaN 的德拜温度为 1260 K. 当系统温度低于 GaN 的德拜温度时, 量子效应不可忽视. 结合平面外声子, 考虑量子理论对系统界面热导的影响. 本文首先探讨温度 (300—1100 K) 对石墨烯/GaN 异质结构 ITC 的影响. 考虑 GaN 层数 (12 层) 和石墨烯层数 (2 层、3 层和 4 层), ITC 变化结果如图 3(a) 所示, 可以发现无论石墨烯层数如何变化, 异质结构的 ITC 都随着温度的升高逐渐增大, 最后呈现出趋于平缓的趋势. 同时, 发现 3 层石墨烯异质结构在各温度下的 ITC 均最高, 其次为两层石墨烯异质结构. 在温度为 300 K 时, 3 层石墨烯的 ITC 为 $(0.027 \pm 0.04) \text{ GW}/(\text{m}^2 \cdot \text{K})$. 而在 1100 K 时, ITC 高达 $(0.0437 \pm 0.04) \text{ GW}/(\text{m}^2 \cdot \text{K})$, 约增大 61%. 研究发现, Tao 等^[20] 分析计算 GaN/石墨烯缓冲层/金刚石异质结构, 其 ITC 为 $0.0622 \text{ GW}/(\text{m}^2 \cdot \text{K})$, 与本研究的 ITC 在同一数量级. 分析认为, 尽管异质结构的界面组成略有不同, 但不同异质结构的石墨烯/GaN 的 ITC 差异并不显著. 由于温度升高会增加异质结构的晶格振动, 从而导致更多的平面外声子被激发. 因此, 随着参与界面热运输的声子增加, 从而提高 ITC.

为进一步研究石墨烯/GaN 异质结构的 ITC 变化原因, 在 300—1100 K 温度内计算 3 层石墨烯异质结构的 PDOS 和 S 值, 计算结果如图 3(b), (c) 所示. 从图 3(b) 可以发现, GaN PDOS 在整个

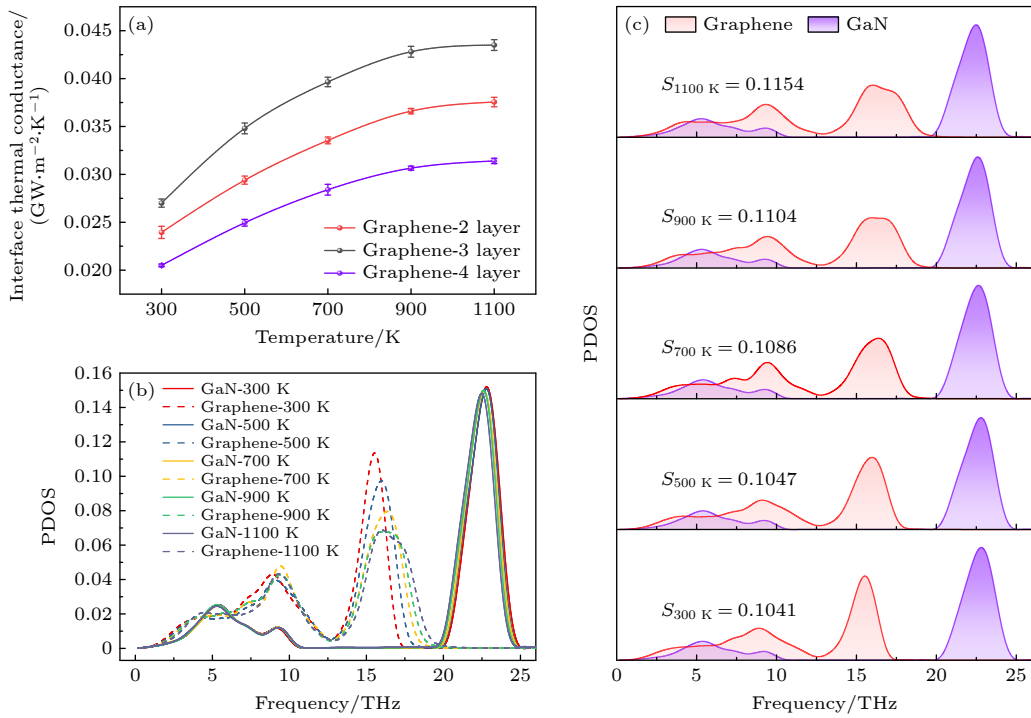


图 3 (a) ITC 与异质结构温度变化的关系; (b) 石墨烯和 GaN 在不同温度下的 PDOS; (c) 石墨烯和 GaN 在不同温度下的 PDOS 重叠区域和重叠因子 S

Fig. 3. (a) Relationship between the ITC and temperature change of heterostructure; (b) PDOS of graphene and GaN at different temperatures; (c) PDOS overlap regions and the overlap factor S for graphene and GaN at different temperatures.

频率范围内变化不明显, 而石墨烯的 PDOS 波动较为显著. 其中, GaN 的截止频率约为 25 THz, 而石墨烯的 PDOS 截止频率约为 20 THz, 重叠部分只在 0—20 THz 频率内出现. 因此, 分析石墨烯在 0—20 THz 范围内的 PDOS 变化. 随着温度的升高, 石墨烯在 0—5 THz 频率内的 PDOS 变化不显著, 5—15 THz 间呈下降趋势, 而在 15—20 THz 频率范围内逐渐增大. 在 20 THz 后, PDOS 几乎为零且不再变化. 结合图 3(c) 发现, 石墨烯和 GaN 的 PDOS 曲线重叠区域逐渐增大, 相应的 S 值增大. 在界面区域, 低频声子被认为比高频声子具有更长的波长和更强的耦合. 进一步分析发现, 随着温度的升高, 低频声子的数量增加, 使得界面耦合能力增强, 同时参与界面热运输的声子也随之增多. 因此, 石墨烯/GaN 异质结构的 ITC 随温度升高而显著增加. 然而, 随着温度的进一步上升, 低频声子的数量不再增加, 导致 ITC 曲线的变化趋势逐渐趋于平缓.

3.2 空位缺陷对石墨烯/GaN 异质结构 ITC 影响

在界面热运输过程中, 缺陷的存在会影响热

运输通道以及改变界面耦合强度, 从而在一定程度上影响热运输的效率. 在本文中, 添加不同比例 (0%—40%) 的空位缺陷, 将其随机分布 GaN 上, 其中 Ga 和 N 原子为随机移除, 石墨烯为无缺陷的理想结构. 在 300 K 温度下, 研究不同空位缺陷率对 GaN 中 ITC 的影响, 如图 4(a) 所示. 观察到在石墨烯/GaN 异质结构中引入适量的 GaN 空位缺陷后, ITC 得到有效的改善. 在没有缺陷的情况下, 石墨烯/GaN 异质结构的 ITC 为 $0.027 \text{ GW}/(\text{m}^2\cdot\text{K})$. 当添加 20% 的 GaN 缺陷时, 异质结构的 ITC 达到最大, 为 $0.0357 \text{ GW}/(\text{m}^2\cdot\text{K})$, 相比之前提高 31.7%. 然而, 随着 GaN 缺陷率的进一步上升, ITC 急剧下降. 分析认为空位缺陷的引入可能导致界面结构不稳定, 但在一定程度上增加热运输; 在缺陷率低于 20% 时, 增加热运输通道对界面热运输影响更大, 从而使界面热导增大; 进一步增大缺陷率, 界面耦合强度下降对界面热运输性能的影响超过热运输通道增加的影响, 导致界面热导开始降低.

为解释 GaN 的空位缺陷率影响 ITC 的原因, 计算不同缺陷率下石墨烯和 GaN 的 PDOS 和 S 值, 结果如图 4(b), (c) 所示. 可以得到, 添加 GaN 空位缺陷后, 石墨烯的 PDOS 仅在 0—10 THz 区域发

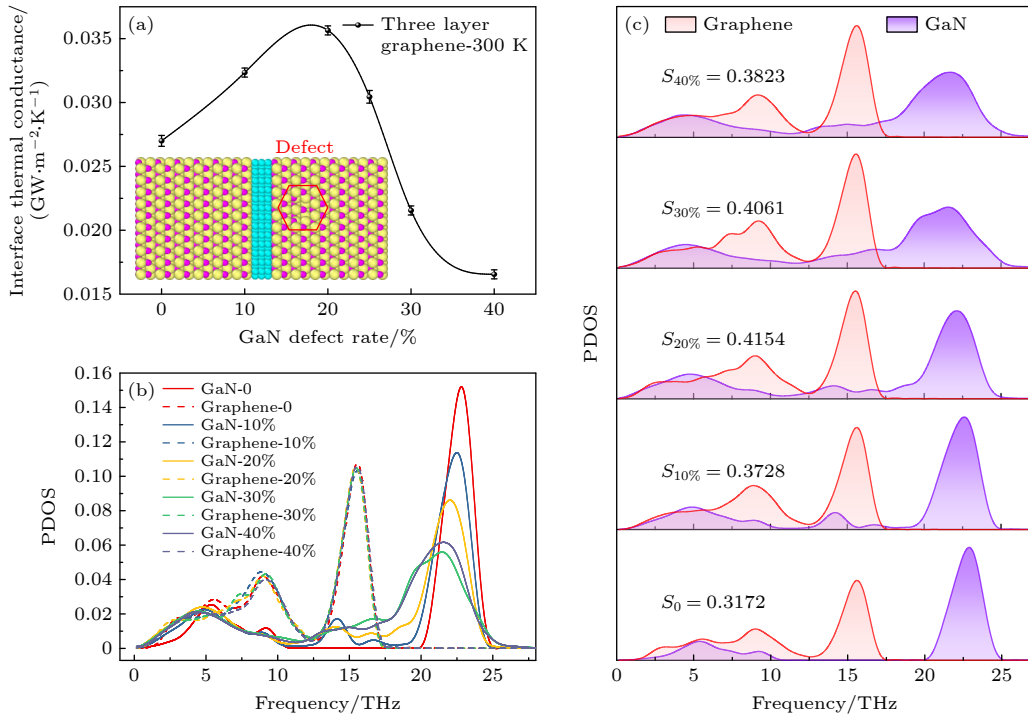


图 4 (a) 异质结构的 ITC 与 GaN 空位缺陷率的关系; (b) 不同 GaN 空位缺陷率下石墨烯和 GaN 的 PDOS; (c) 在不同的 GaN 空位缺陷率下, 石墨烯和 GaN 的 PDOS 重叠区域和重叠因子 S

Fig. 4. (a) Relationship between the ITC and GaN vacancy defect rate of heterostructure; (b) PDOS of graphene and GaN at different GaN vacancy defect rate; (c) PDOS overlap regions and the overlap factor S for graphene and GaN at different GaN vacancy defect rate.

生轻微变化. 相比之下, GaN 的 PDOS 变化显著, 特别是在 20—25 THz 频率内, PDOS 急剧下降. 当添加 10% 的 GaN 缺陷时, GaN 的 PDOS 最大值从无缺陷时的 0.015 下降至 0.011. 随着 GaN 缺陷的增加, 其 PDOS 呈下降趋势, 峰值向低频方向移动, 而在其他频率范围内略微增加. 值得注意的是, 当添加 20% 的 GaN 缺陷时, 其 PDOS 在整个频率范围内都呈现中间水平. 结合图 4(c), 可以发现在 0—20% 缺陷率范围内, S 值呈上升趋势, 表明参与界面热运输的声子数量上升, 促进界面热运输, 进而提高 ITC. 然而, 随着 GaN 缺陷率的进一步提高, 重叠因子 S 开始减小, 表明参与界面热运输的声子数量也大幅减少, 从而导致界面热运输受到阻碍, ITC 显著下降. 当 GaN 的空位缺陷率上升到 40% 时, 异质结构的 ITC 降至原水平的 1/3.

3.3 尺寸对石墨烯/GaN 异质结构 ITC 影响

当材料尺寸接近纳米尺度时, 尺寸效应会极大地影响异质结构的界面热运输特性. 分析不同层数 GaN (8—24 层) 和石墨烯 (3 层) 组成的异质结

构的界面热运输性能, ITC 如图 5(a) 所示. 随着 GaN 层数的增加, ITC 不断减小. 这表明随着 GaN 层数的增加, 声子传播受到限制, 减少参与热运输的声子数量, 从而抑制界面热运输. 因此, 随着 GaN 层数的增加, 石墨烯/GaN 异质结构的 ITC 减小.

为进一步解释 ITC 变化的原因, 计算石墨烯和 GaN 的 PDOS 和 S 值, 结果如图 5(b), (c) 所示. 结果表明, 随着 GaN 层数的增加, 石墨烯的 PDOS 在整个频率范围内逐渐减小. 此外, 在 20—25 THz 范围内, GaN 的 PDOS 略有增大, 但对 S 值的影响并不显著. 在其他频率范围内, GaN 的 PDOS 呈下降趋势, 导致 S 值减小. 因此, 参与界面热运输的声子数量减少, ITC 降低. 通过观察 S 值的变化幅度, 可以发现 ITC 的趋势逐渐减缓. 这表明随着 GaN 层数的增加, ITC 将趋于一个稳定的数值. 因此, 可以推断随着 GaN 层数的增加, ITC 减小并趋于稳定.

分析不同层数石墨烯 (2—6 层) 和 GaN (12 层) 组成的异质结构界面热运输特性, ITC 如图 6(a) 所示. 当石墨烯层数从 2 层增加到 3 层时, ITC 达

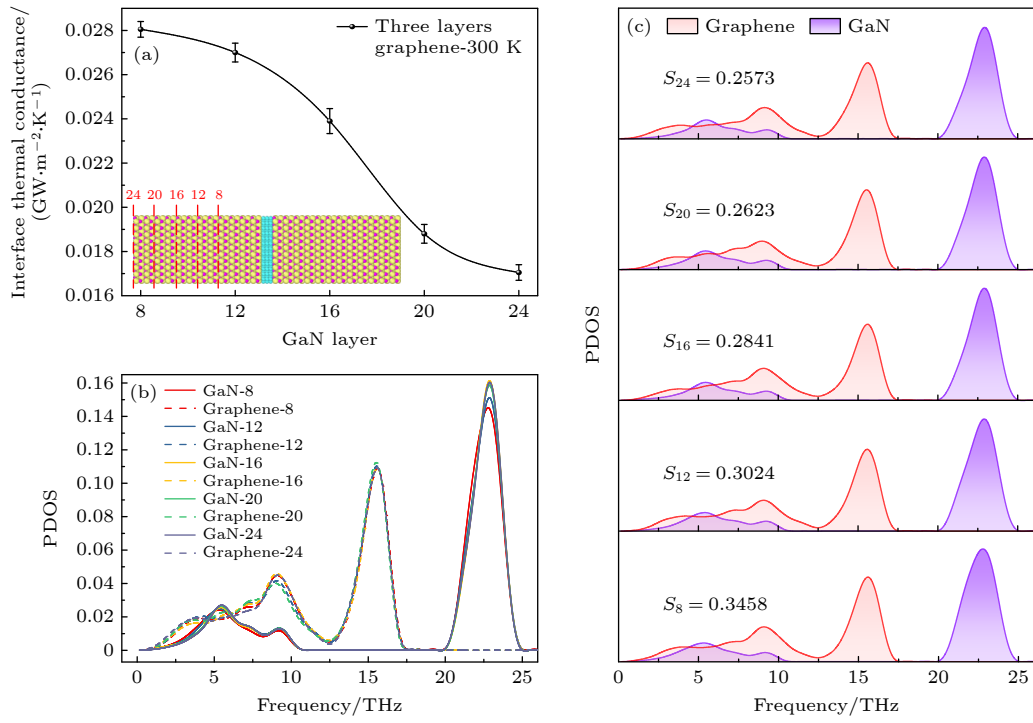


图 5 (a) ITC 与异质结构 GaN 层数的关系; (b) 不同数量 GaN 层中, 石墨烯和 GaN 的 PDOS; (c) 在不同数量的 GaN 层中, 石墨烯和 GaN 的 PDOS 重叠区域和重叠因子 S

Fig. 5. (a) Relationship between the ITC and the number of GaN layer of heterostructure; (b) PDOS of graphene and GaN at different number of GaN layer; (c) PDOS overlap regions and the overlap factor S for graphene and GaN at different number of GaN layer.

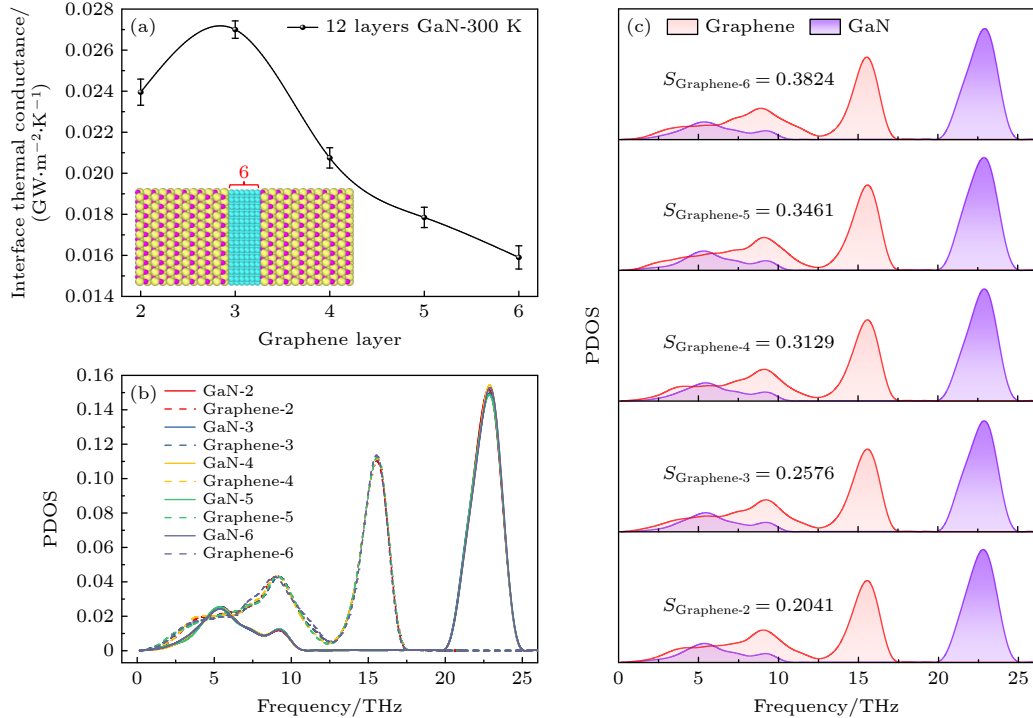


图 6 (a) ITC 与异质结构石墨烯层数的关系; (b) 不同数量石墨烯层下石墨烯和 GaN 的 PDOS; (c) 不同数量石墨烯层下石墨烯和 GaN 的 PDOS 重叠区域和重叠因子 S

Fig. 6. (a) Relationship between the ITC and the number of graphene layer of heterostructure; (b) PDOS of graphene and GaN at different number of graphene layer; (c) PDOS overlap regions and the overlap factor S for graphene and GaN at different number of graphene layer.

到最大值, 为 $0.027 \text{ GW}/(\text{m}^2 \cdot \text{K})$. 然而, 随着石墨烯层数进一步增加, ITC 却开始逐渐减小. 分析发现, 当石墨烯层数增至 3 层时, 界面上的声子耦合更强, 促进声子在界面的传输, 有利于界面热传导. 当石墨烯层数超过 3 层, 层与层之间的界面热阻增大, 并且石墨烯内部的层间声子散射增加, 使得声子在界面传输变得困难. 因此, 该异质结构的 ITC 先增大后减小.

为进一步验证结论, 计算石墨烯层数变化时石墨烯和 GaN 的 PDOS, 如图 6(b) 所示, GaN 的 PDOS 变化不明显, 但石墨烯的 PDOS 在 0—10 THz 频率范围内发生显著变化. 在 0—5 THz 范围内, 石墨烯的 PDOS 增大, 在 5—10 THz 范围内, PDOS 先略有增大, 然后下降. 结合图 6(c), S 值一直增大, 与图 6(a) 的趋势不一致, 分析认为石墨烯层增加使得界面声子增多, 导致重叠因子 S 一直增大.

为解释 3 层和 4 层石墨烯中 ITC 的变化现象, 进一步计算石墨烯和 GaN 的 PPR, 结果如图 7 所示. 当 $\text{PPR} < 0.3$ 的声子定义为局域声子, $\text{PPR} > 0.3$ 的声子定义为离域声子. 局域声子不参与热输

运, 而离域声子在 ITC 中起着重要作用, 对界面热输运有更强的影响, 并能增强热输运. 当石墨烯达到 4 层时, 石墨烯和 GaN 都有更多的声子从离域状态进入局域状态. 由于大量局域声子的增加导致参与热传输的声子数量减少, 抑制声子的传输. 因此, 当石墨烯层数从 3 层增加到 4 层时, ITC 减少.

4 结 论

本文采用非平衡动力学方法, 分析温度、空位缺陷、GaN 层数以及石墨烯层数对石墨烯/GaN 异质结构 ITC 影响, 从微观角度引入 PDOS 和 PPR 阐述 ITC 变化的原因, 主要结论如下.

1) 随着温度升高, ITC 呈上升趋势, 但随着温度进一步升高, 其增长趋势逐渐趋于平稳, 揭示界面热输运对温度的敏感性. 分析认为随着温度的上升, 晶格振动得到增强, 导致参与热传输的声子数量增加, 从而提高 ITC. 然而, 随着温度的持续升高, 参与热传输的声子数量趋于稳定, 使得 ITC 也趋于稳定.

2) 随着 GaN 空位缺陷率的增加, ITC 呈现先增大后减小的趋势. 当空位缺陷率为 20% 时 ITC 达到最大值为 $0.0357 \text{ GW}/(\text{m}^2 \cdot \text{K})$. 研究发现, 随着 GaN 空位缺陷的提高, 热输运通道增多, 参与界面热传输的声子数量增加, 从而提高 ITC. 然而, 随着缺陷的进一步增加, GaN 的结构遭到严重破坏, 界面耦合强度下降, 参与界面热传递的声子减少. 分析可得, 在一定程度上 GaN 的空位缺陷率可以提高界面传热性能. 多层石墨烯缺陷对 ITC 的影响处于波动状态, 分析可能与缺陷位置有关, 后期将针对此进行研究.

3) 随着 GaN 层数的增加, 异质结构的 ITC 一直减小. 分析认为 GaN 层数增加导致声子的界面散射增加, 从而参与界面热传输的声子数量减少. 石墨烯层数的增加, ITC 呈先增后减的趋势, 3 层石墨烯时界面热导达到最大, 为 $0.027 \text{ GW}/(\text{m}^2 \cdot \text{K})$. 分析认为石墨烯层数的增加导致声子匹配和耦合强度的初期提高和后期声子散射及局部化增加. 随着石墨烯层数从 3 层增加到 4 层, 更多声子由离域向局域转移, 导致参与界面热传递的声子数量减少, 从而限制界面热传递, 降低 ITC.

本研究揭示了温度、缺陷和尺寸对石墨烯/GaN 异质结构热输运的影响, 为调控微电子器件界面热输运提供理论依据.

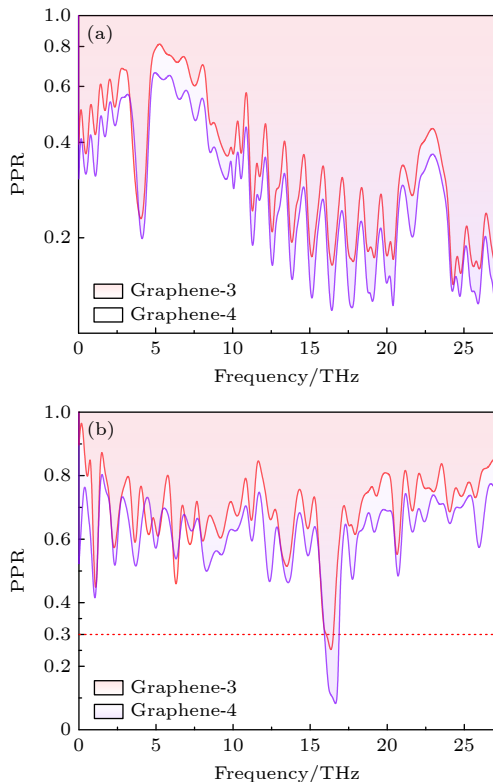


图 7 3, 4 层石墨烯下石墨烯/GaN 异质结构的 PPR (a) 石墨烯; (b) GaN

Fig. 7. PPR of graphene/GaN heterostructure with 3 and 4 layers of graphene: (a) Graphene; (b) GaN.

参考文献

- [1] Nguyen M H, Kwak S 2020 *Electronics* **9** 2068
- [2] Kimoto T, Watanabe H 2020 *Appl. Phys. Exp.* **13** 120101
- [3] Porwal H, Grasso S, Reece M J 2013 *Adv. Appl. Ceram* **112** 443
- [4] Inagaki M, Kang F 2014 *J. Mater. Chem. A* **2** 13193
- [5] Liu J, Tang J, Gooding J J 2012 *J. Mater. Chem.* **22** 12435
- [6] Hernaez M 2020 *Sensors (Basel)* **20** 3196
- [7] Santis J A, Marín-García C A, Sánchez-R V M 2023 *J. Cryst. Growth* **601** 126944
- [8] Alexander A B, Suchismita G, Wenzhong B, Irene C, Desalegne T, Feng M, Chun N L 2008 *Nano Lett.* **8** 902
- [9] Bao W L, Wang Z L, Chen G F 2021 *Int. J. Heat Mass Tran.* **173** 121266
- [10] Guo Z X, Ding J W, Gong X G 2012 *Phys. Rev. B* **85** 235429
- [11] Luo T, Lloyd J R 2012 *Adv. Funct. Mater.* **22** 2495
- [12] Wang T Y, Tsai J L 2016 *Comput. Mater. Sci.* **122** 272
- [13] Wang L, Li B W 2007 *Phys Rev. Lett.* **99** 177208
- [14] Liu D J 2020 *Phys. Lett. A* **384** 126077
- [15] Yue Y N, Zhang J C, Wang X W 2011 *Small* **7** 3324
- [16] Wang Z, Guan H W 2014 *Appl. Mech. Mater.* **487** 63
- [17] Wang Y, Yang C H, Cheng Y, Zhang Y Y 2015 *RSC. Adv.* **5** 82638
- [18] Liu D J, Wang S M, Zhu J J, Li H, Zhu H D 2022 *Phys. Lett. A* **426** 127895
- [19] Huang X Y, Zhi C Y, Lin Y, Bao H, Wu G N, Jiang P K, Mai Y W 2020 *Mat. Sci. Eng. R* **142** 100577
- [20] Tao L, Theruvakkattil S S, Shahsavari R 2017 *ACS. Appl. Mater. Interfaces* **9** 989
- [21] Yang B, Yang H Y, Li T B, Yang J M, Yang P 2021 *Appl. Surf. Sci.* **536** 147828
- [22] Bao W L, Wang Z L, Hu B Y, Tang D W 2023 *Int. J. Heat Mass Tran.* **201** 123569
- [23] Steve P 1995 *J. Comput. Phys.* **117** 1
- [24] Lin C P, Rao Z H 2017 *Appl. Therm. Eng.* **110** 1411
- [25] Stuart S J, Tutein A B, Harrison J A 2000 *J. Chem. Phys.* **112** 6472
- [26] Donald W B, Olga A S, Judith A H, Steven J S, Boris N, Susan B S 2002 *J. Phys-Condens. Mat.* **14** 783
- [27] Stillinger F H, Weber T A 1985 *Phys. Rev. B* **31** 5262
- [28] Yang Y Z, Ma J, Yang J, Zhang Y Y 2022 *ACS Appl. Mater. Interfaces* **14** 45742
- [29] Han D, Wang X Y, Ding W Y, Chen Y, Zhang J C, Xin G M, Cheng L 2019 *Nanotechnology* **30** 075403
- [30] Xin W Y, Jing Z C, Yue C, Paddy K L C 2017 *Nanoscale* **9** 2262
- [31] Guo Y, Bescond M, Zhang Z, Xiong S, Hirakawa K, Nomura M, Volz S 2021 *APL Mater.* **9** 091104

Molecular dynamics study of interfacial thermal transport properties of graphene/GaN heterostructure^{*}

Liu Dong-Jing Zhou Fu Hu Zhi-Liang Huang Jia-Qiang[†]

(*Guangxi Key Laboratory of Manufacturing System & Advanced Manufacturing Technology, School of Mechanical and Electrical Engineering, Guilin University of Electronic Technology, Guilin 541004, China*)

(Received 4 January 2024; revised manuscript received 29 April 2024)

Abstract

The performance of interfacial thermal transport in heterostructure determines the reliability of micro- and nano-scale device. In this study, a molecular dynamics method is used to investigate the interfacial thermal transport properties of graphene/GaN sandwich heterostructure. The effects of temperature, defect, and size on the interface thermal conductance at the heterostructure are analyzed. It is found that the interface thermal conductance increases with temperature rising; at 1100 K, the interface thermal conductance of the 3-layer graphene heterostructure is increased by 61%. This increase is mainly attributed to the enhanced lattice vibrations at higher temperature, which excites more out-of-plane phonons. The presence of minor vacancy defects in GaN leads interface thermal conductance to increase, reaching a maximum value of 0.0357 GW/(m²·K) at a defect rate of 20%. This enhancement is believed to be due to additional thermal transport pathways created by the defects. However, as the defect rate increases further, the interface thermal conductance begins to decrease, which is thought to be due to interfacial coupling strength decreasing. With the number of GaN layers increasing from 8 to 24, the interface thermal conductance decreases, the change is attributed to the decrease of the number of phonons participating in the thermal transport across the interface. Conversely, with the number of graphene layers increasing from 2 to 6, the interface thermal conductance initially increases and then decreases. This behavior is related to initial improvements of phonon matching and coupling strength, followed by the increase in phonon scattering and localization. The results of this study provide a theoretical basis for regulating the interfacial thermal transport in microelectronic devices.

Keywords: heterostructure, interface thermal conductance, vacancy defect, size effect

PACS: 79.60.Jv, 65.80.Ck, 02.70.Ns, 68.55.Ln

DOI: [10.7498/aps.73.20240021](https://doi.org/10.7498/aps.73.20240021)

^{*} Project supported by the Key Laboratory of Manufacturing System & Advanced Manufacturing Technology of Guangxi, China (Grant No. 19-050-44-002Z), the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 62264003), and the Natural Science Foundation of Guangxi, China (Grant No. 2023GXNSFAA026188), and the Science Research and Technology Development Program of Guilin, China (Grant No. 20220107-2).

[†] Corresponding author. E-mail: huangjiaqiang201@163.com

石墨烯/GaN异质结构界面热输运性质的分子动力学研究

刘东静 周福 胡志亮 黄家强

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

Liu Dong-Jing Zhou Fu Hu Zhi-Liang Huang Jia-Qiang

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 73, 137901 (2024) DOI: 10.7498/aps.73.20240021

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.73.20240021>

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>

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>

Au-TiO₂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-TiO₂ photoelectrode

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

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>

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): 034401 <https://doi.org/10.7498/aps.72.20221981>

可实现宽频带光波非对称传输的自准直效应光子晶体异质结构

Photonic crystal heterostructure with self-collimation effect for broad-band asymmetric optical transmission

物理学报. 2020, 69(18): 184214 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20200538>