

# 基于分子动力学的氮化镓/石墨烯/ 金刚石界面热导研究\*

刘东静<sup>1)2)†</sup> 胡志亮<sup>1)</sup> 周福<sup>1)</sup> 王鹏博<sup>1)</sup> 王振东<sup>1)</sup> 李涛<sup>1)</sup>

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

2) (桂林研创半导体科技有限责任公司, 桂林 541004)

(2024年4月13日收到; 2024年5月18日收到修改稿)

为解决氮化镓芯片散热问题, 采用非平衡分子动力学法, 研究工作温度、界面尺寸、缺陷率及缺陷类型对氮化镓/石墨烯/金刚石异质界面热导的影响, 通过计算声子态密度和声子参与率, 分析界面热传导机理. 研究发现, 在 100—500 K 范围内, 温度升高使界面热导增大 2.1 倍, 重叠因子随温度增加而增加, 界面间声子耦合程度增强, 界面热导相应增大. 当氮化镓层数从 10 层增加到 26 层时, 界面热导降低 75%, 分析认为是界面声子耦合程度下降导致. 另外, 添加 5 层石墨烯会导致界面热导降低 74%, 分析认为是声子局域化程度加重造成; 当缺陷率从 0 增大到 10% 时, 金刚石碳原子缺陷使界面热导提高 40%, 缺陷散射增加低频声子数量, 改善界面热传导; 但镓、氮和石墨烯碳原子缺陷会加重声子局域化程度, 均导致界面热导降低. 研究结果有助于提升氮化镓芯片散热性能, 同时对高可靠性氮化镓器件设计具有指导意义.

**关键词:** 界面热导, 温度效应, 尺寸效应, 空位缺陷

**PACS:** 02.70.Ns, 65.80.Ck, 68.55.Ln

**DOI:** 10.7498/aps.73.20240515

## 1 引言

随着电子器件尺寸缩小和功率增加, “自热”效应越来越突出, 器件可靠性和稳定性面临严峻挑战, 有效的热管理方案对于提升器件可靠性至关重要<sup>[1,2]</sup>. 在微纳器件中, 层间/外延层键合异质结构会阻碍热量输运并导致热量积聚, 界面热阻已成为影响器件散热的主要因素, 提升界面热运输是目前研究的重点之一<sup>[3]</sup>.

针对 GaN/金刚石界面热导, 研究人员主要从以下三方面开展研究<sup>[4-6]</sup>: 在界面插入不同的介质层以调节声子失配, 利用不同的基材堆叠半导体

制备异质结构, 在界面添加纳米结构增强热输运<sup>[7-13]</sup>. Zhou 等<sup>[7]</sup>采用瞬态热反射法研究不同介质层的界面热性能, 发现 SiN 结构具有最高的界面热导 ( $0.154 \text{ GW}/(\text{K}\cdot\text{m}^2)$ ). Huang 和 Guo<sup>[8]</sup>研究插入 AlN,  $\text{Si}_3\text{N}_4$  和 Si 介质层对 GaN/金刚石界面传热的影响, 发现  $\text{Si}_3\text{N}_4$  结构的界面热导最大 ( $0.218 \text{ GW}/(\text{K}\cdot\text{m}^2)$ ). Mu 等<sup>[9]</sup>运用时域热反射和拉曼光谱技术研究不同厚度 Si 介质层对 GaN/金刚石界面热导的影响, 发现 15 nm 厚的 Si 中间键合层可以提高界面热导. Tao 等<sup>[10]</sup>通过纳米工程交错结构改善 GaN/金刚石界面热导, 并研究 48 种不同的结构, 发现棱柱形最佳设计可将界面热导提高 80%. Jia 等<sup>[11]</sup>研究发现, 添加周期结构

\* 广西制造系统与先进制造技术重点实验室主任基金 (批准号: 19-050-44-002Z)、2024 年度广西高校中青年教师科研基础能力提升项目 (批准号: 2024KY0203)、桂林电子科技大学研究生教育创新计划 (批准号: 2024YCXS016) 和 2023 年广西壮族自治区级新工科研究与实践项目 (批准号: XGK202309) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: ldj168168@126.com

的  $\text{SiN}_x$  介质层能够提高 GaN/金刚石界面热导, 因为周期结构能够增加界面接触面积和提高声子传输效率. Qi 等<sup>[12]</sup> 采用非平衡分子动力学方法计算 AlN/金刚石界面三种不同纳米结构的热阻, 结果显示交错界面使热阻降低 28%. Middleton 等<sup>[13]</sup> 对比界面层厚度对 GaN/金刚石界面热导的影响, 得出较小的介质层厚度和热阻有利于改善界面传热特性.

近年来, 石墨烯异质界面结构研究受到了广泛关注, 如石墨烯/SiC<sup>[14]</sup>、石墨烯/h-BN<sup>[15]</sup>、石墨烯/MoS<sub>2</sub><sup>[16]</sup>. Hu 和 Poulikakos<sup>[17]</sup> 发现, 将石墨烯插入 GaN/SiC 异质界面后, 界面热导显著增大. 声子振动态密度显示, GaN 中的 Ga 原子激活了大量声子模式, 中频模式的分布促进了界面上的热传输. Tao 等<sup>[10]</sup> 在 GaN/金刚石界面引入共形石墨烯缓冲层, 使界面热导提高约 33%. 最近研究发现, 石墨烯能在 GaN<sup>[18]</sup> 和金刚石上生长<sup>[19,20]</sup>, 金刚石<sup>[21,22]</sup> 和 GaN<sup>[23,24]</sup> 也能在石墨烯上生长, 这表明石墨烯可以作为 GaN/金刚石的中间层材料. 相较于非晶态且低热导的  $\text{SiN}_x$ <sup>[25]</sup>, 石墨烯作介质层将显著地改善 GaN/金刚石界面热传输, 提升器件可靠性. 然而, 目前针对 GaN/石墨烯/金刚石异质结构的研究很少, 相关的传热机理也不够充分.

针对上述研究不足, 本文采用非平衡分子动力学 (non-equilibrium molecular dynamics, NEMD) 方法研究 GaN/石墨烯/金刚石异质结构界面热导. 首先, 探究界面热导随温度的变化关系; 其次, 分析异质结构尺寸对界面热导的影响, 分别比较 GaN 层数与石墨烯层数对界面热传导的影响; 最后, 研究缺陷率及缺陷类型对异质界面传热的影响. 通过计算不同条件下的声子态密度和声子局域化程度, 分析界面热输运变化规律, 研究结果对 GaN 基异质结构热设计具有指导意义.

## 2 模拟过程

### 2.1 模型建立

选用纤锌矿结构的 GaN 和立方金刚石晶胞进行建模, 晶格常数如表 1 所列, 设定晶格平面 (0 0 0 1) 为  $xy$  平面, 晶向 [0 0 0 1] 为  $z$  轴传热方向. 为提高异质结构稳定性, 利用下式最小化晶格失配率<sup>[26]</sup>:

$$f = \left| \frac{a_s - a_c}{a_c} \right|, \quad (1)$$

式中,  $f$ ,  $a_s$  和  $a_c$  分别是晶格失配率、衬底晶格常数和外延薄膜晶格常数.

表 1 晶格参数

Table 1. Lattice parameters.

方向	氮化镓	石墨烯	金刚石
$x$	3.21629	2.46000	3.56679
$y$	5.57078	4.26084	3.56679
$z$	5.23966		3.56679

GaN/石墨烯/金刚石界面模型如图 1 所示, 模拟系统  $xy$  平面的尺寸固定为  $32.08 \text{ \AA} \times 38.86 \text{ \AA}$ ,  $z$  方向长度随层数由  $51.71 \text{ \AA}$  变化到  $122.71 \text{ \AA}$ . GaN 和金刚石超晶胞分别由  $10 \times 7$  和  $9 \times 11$  个晶胞组成, 单层石墨烯由  $13 \times 9$  个晶胞组成, 并且在  $x$  方向上具有锯齿形结构, 在  $y$  方向上具有扶手椅结构. GaN/石墨烯在  $x, y$  方向的晶格失配率分别为 0.572% 和 1.690%, 石墨烯/金刚石为 0.379% 和 2.313%, 失配率均小于 5%.

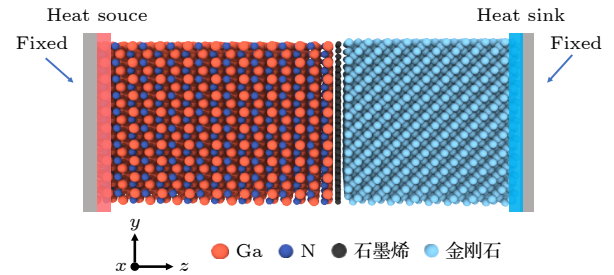


图 1 氮化镓 (18 层)/石墨烯/金刚石 (18 层) 异质结构模型  
Fig. 1. Interface model of gallium nitride (18 layers)/graphene/diamond (18 layers) heterostructure.

### 2.2 模拟过程

以下的研究使用大规模原子/分子并行模拟器 (large-scale atomic/molecular massively parallel simulator, LAMMPS) 软件, 并通过开放可视化工具 (open visualization tool, OVITO) 将模拟过程可视化<sup>[27]</sup>. 模拟过程中 C, Ga 和 N 原子之间的相互作用使用三体 Tersoff 势描述<sup>[10]</sup>. 石墨烯原子间的相互作用由 AIREBO 势描述<sup>[28]</sup>. 利用 Lennard-Jones (L-J) 势描述石墨烯 C 原子和金刚石 C 原子之间的相互作用<sup>[29]</sup>:

$$V(r_{ij}) = 4\varepsilon \left[ \left( \frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^6 \right], \quad (2)$$

其中  $r_{ij}$  是原子  $i$  和  $j$  之间的距离,  $\varepsilon$  和  $\sigma$  分别是能量常数和距离常数. C—Ga 和 C—N 原子之间相互作用也由 (2) 式描述, 相应原子的 L-J 势参数列于表 2.

表 2 L-J 势函数参数  
Table 2. Lennard-Jones parameters.

原子1	原子2	$\varepsilon/\text{eV}$	$\sigma/\text{\AA}$
C	C	0.00361	3.671
C	Ga	0.00905	3.668
C	N	0.00369	3.346

由于 GaN/石墨烯/金刚石结构中传热载体都是声子, 因此选用非平衡分子动力学方法模拟异质界面热输运. 模拟计算中, 时间步长设置为 0.25 fs, 三个方向均应用周期性边界条件, 采用速度 Verlet 积分法对运动方程进行积分. 首先, 基于共轭梯度算法应用能量最小化优化初始模型, 然后, 将整个系统在 300 K 下的正则系综 (NVT) 中弛豫 0.25 ns. 恒温弛豫后, 系统在微正则 (NVE) 系综下弛豫 0.25 ns, 以消除恒温器的影响. 之后, 在 NVE 下进行 NEMD 模拟, 将异质结构两端的原子层分别与温度为 330 K 和 270 K 的热和冷 Langevin 恒温器耦合. 图 2(b) 为 Langevin 热浴形成的温度梯度图, 排除固定区域的非线性分布, 能够看到 GaN 和金刚石中温度分布接近线性特性, 且金刚石温度梯度小, 表明金刚石热导率更大; 界面处出现较大的温度跃变, 说明界面区域热导急剧降低. 收集系统 0.75 ns 的平均温度分布和热流量数据, 并计算两组拟合结果的平均值, 以减少统计误差. 热源和热汇随时间的累积能量如图 2(a) 所示, 热流量  $J$  通过拟合曲线斜率得到, 温度跃变  $\Delta T$  由线性拟合界

面两侧温度数据获得. 最后, 根据傅里叶定律计算界面热导<sup>[30]</sup>:

$$G = J/(A\Delta T), \quad (3)$$

式中,  $J$  是流过 GaN/石墨烯/金刚石界面的热流量,  $A$  为垂直于热流方向的横截面积,  $\Delta T$  是 GaN/石墨烯/金刚石界面的温差.

为了揭示 GaN/石墨烯/金刚石异质界面热传导机理, 通过速度自相关函数的傅里叶变换计算声子态密度 (PDOS):

$$P(\omega) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_0^\infty e^{i\omega t} \left\langle \sum_{j=i}^N \nu_j(t) \nu_j(0) \right\rangle d\omega, \quad (4)$$

式中,  $P(\omega)$  是频率  $\omega$  处的 PDOS,  $\nu_j(t)\nu_j(0)$  是速度自相关函数. 此外, 重叠因子可以定量描述声子谱匹配程度, 重叠因子  $S$  增大说明界面声子振动更协调, 声子耦合程度更高, 具体计算式为<sup>[31]</sup>

$$S = \int \prod_{i=1}^3 P_i(\omega) / \left[ \prod_{i=1}^3 \int P_i(\omega) \right], \quad (5)$$

式中,  $i = 1, 2, 3$ , 分别对应 GaN、石墨烯和金刚石的 PDOS.

声子参与率 (participation Ratio, PPR) 是另一种分析声子行为的方法, 可以定量描述声子局域化程度. PPR 减小说明声子模态向局域化转变, 参与热输运的声子数减少, 具体计算式为

$$\text{PPR}(\omega) = \frac{1}{N} \frac{\left( \sum_i \text{PDOS}_i(\omega) \right)^2}{\sum_i \text{PDOS}_i(\omega)^4}, \quad (6)$$

式中,  $N$  是原子总数,  $\text{PDOS}_i(\omega)$  是为对应频率下的 PDOS.

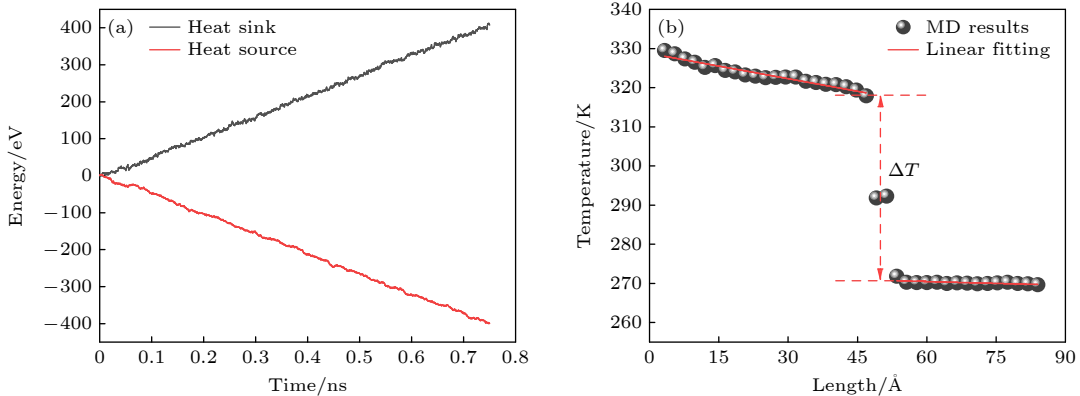


图 2 (a) 热源、热汇能量累计; (b) 沿热流方向的温度分布

Fig. 2. (a) Accumulation of energy from heat source and heat sink; (b) temperature distribution along the direction of heat flow.

### 3 结果与讨论

#### 3.1 温度影响

温度是影响 GaN 器件工作稳定性的关键参数之一, 本节研究温度对 GaN/石墨烯/金刚石界面热导的影响. 根据 GaN 器件工作温度<sup>[32]</sup>, 计算 100—500 K 时异质结构的界面热导. 如图 3 所示, 单层和三层石墨烯结构的界面热导均随温度增加而增加, 单层石墨烯结构在 500 K 时的界面热导为 0.245 GW/(K·m<sup>2</sup>), 是 100 K 时 0.116 GW/(K·m<sup>2</sup>) 的 2.1 倍, 这与其他研究得出的变化趋势一致, 高温会引起更高的界面热导<sup>[33,34]</sup>.

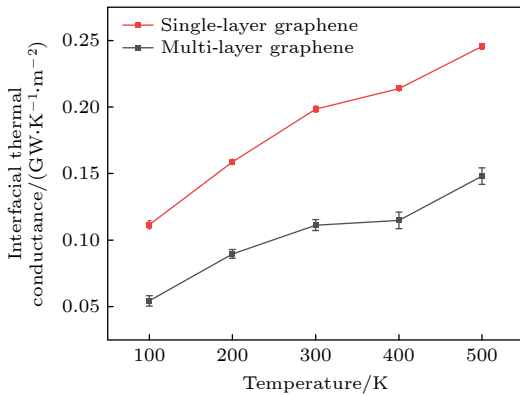


图 3 温度对单层和三层石墨烯结构界面热导的影响  
Fig. 3. Relationship between the interfacial thermal conductance and temperature for 1-layer graphene and 3-layer graphene structures.

考虑温度会影响声子传输, 进一步探究温度对界面传热的影响机理. 图 4 为单层石墨烯结构的 PDOS 随温度的变化, 金刚石的 PDOS 基本不变, 这里不作展示. 石墨烯 PDOS 呈现蓝移趋势, 有利于声子谱重叠. 氮化镓 PDOS 中 10—20 THz 低频段声子数量增加, 为界面热传导提供更多通道. 石

墨烯/HBN<sup>[35]</sup>、Cu/金刚石<sup>[36]</sup>和 Cr<sub>0.22</sub>Ni<sub>0.78</sub>/Cu/MgO<sup>[37]</sup>界面研究也有类似低频声子变化现象. 为定量描述界面声子耦合程度, 进一步计算重叠因子. 图 4(c) 表明, 在 100 K 时, 温度较低, 界面材料声子激发较少, 重叠因子为 1.3×10<sup>-4</sup>; 在 500 K 时, 重叠因子达到 2.04×10<sup>-4</sup>. 随着温度的增加, 重叠因子相应增加, 界面之间的声子振动更加协调, 传热效率提高. 温度升高增强界面间声子耦合, 改善界面热传输性能, 表明界面热导具有温度依赖性. 然而, 上述机理无法解释三层与单层结构界面热导的差异, 室温下三层石墨烯的界面热导仅为单层的 56%, 3.2 节将讨论尺寸对界面热导的影响.

#### 3.2 尺寸影响

声子在小于其平均自由程的系统中散射和弹道传播, 热导率会随系统尺寸减小而产生显著变化. GaN 的声子平均自由程 (mean free path of phonons, MFP) 超过 100 nm<sup>[38]</sup>, 异质结构尺寸小于声子平均自由程, 界面热性能在很大程度上取决于 MFP, 因此本节研究尺寸效应对纳米尺度界面传热的影响. 为提高异质结构稳定性, 构建 GaN 和金刚石层数一致的界面模型, 下文只提及 GaN 层数. 在 MD 模拟中, 固定 *x* 和 *y* 方向的截面尺寸为 32.08 Å 和 38.86 Å, 计算 300 K 时石墨烯和 GaN 层数变化对界面热导的影响. 首先研究石墨烯为 1 层, GaN 层数变化产生的尺寸效应. 从图 5 可看出, GaN 厚度增加导致界面热导减小, 随着 GaN 层数从 10 增加到 26 层, 界面热导从 0.309 GW/(K·m<sup>2</sup>) 下降到 0.078 GW/(K·m<sup>2</sup>), 变化趋势与石墨烯/SiC<sup>[39]</sup>和 Al/Si<sup>[40]</sup>异质结构相同. 然后, 固定 GaN 层数为 14 层, 计算石墨烯为 1—5 层时的界面热导. 图 5 显示, 随着石墨烯层数增加, 界面热导单

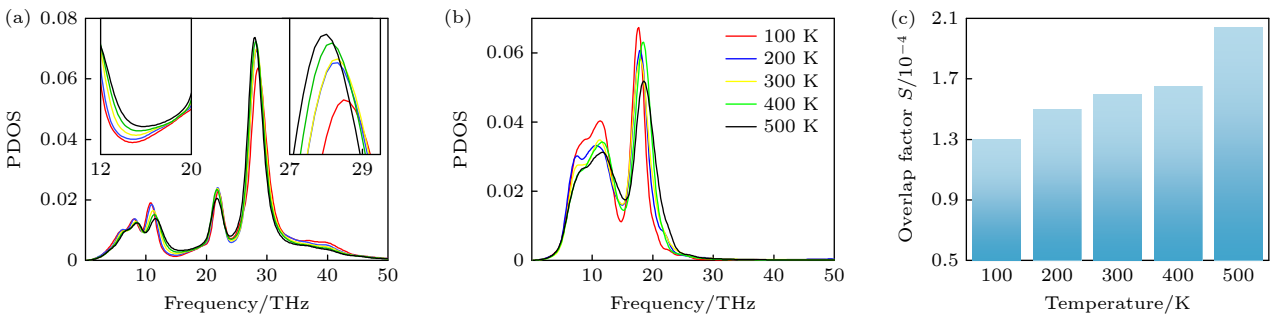


图 4 温度对单层石墨烯结构 PDOS 的影响 (a) 氮化镓; (b) 石墨烯; (c) 重叠因子

Fig. 4. PDOS diagrams of heterostructure with single-layer graphene under temperature change: (a) GaN; (b) graphene; (c) overlap factor.

调下降, 5 层石墨烯异质结构的界面热导为 0.051 GW/(K·m<sup>2</sup>), 相比单层石墨烯 (0.198 GW/(K·m<sup>2</sup>)) 降低 74%, 金刚石/石墨烯<sup>[41]</sup>和 Al/石墨烯<sup>[42]</sup>异质界面也有同样的尺寸效应.

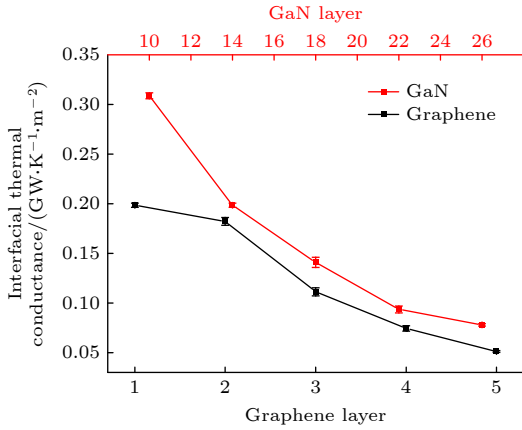


图 5 氮化镓/金刚石和石墨烯层数变化对界面热导的影响  
Fig. 5. Relationship between interfacial thermal conductance and the variation in the number of layers of GaN/diamond and graphene.

为了从声子热输运角度解释尺寸变化对界面热导的影响, 计算了不同层数的界面 PDOS. 如图 6 所示, GaN 层数增加使声子模式向低频转移, PDOS 峰值从 33 THz 转移到 25 THz, 第一个低频突出峰频率从 12 THz 降低到 5 THz, 导致 10—20 THz 声子数量减少; 石墨烯声子低频峰值逐渐下降;

0—20 THz 低频区域的金刚石声子数减少. 低频声子具有更长的波长和更强的声子耦合模式, 对界面热导影响更显著. 为量化界面声子耦合程度, 进一步计算 PDOS 重叠因子. 从图 6(d) 可以看出, 当 GaN 层数从 10 变化到 26 时, 重叠因子从  $1.69 \times 10^{-4}$  下降到  $1.18 \times 10^{-4}$ , GaN 中 10—20 THz 低频声子数减少, 石墨烯 PDOS 蓝移以及低频区域的金刚石声子减少, 共同导致界面 PDOS 曲线的匹配度减少, 界面间声子耦合程度下降, 传热效率变低.

图 7 所示为石墨烯层数变化时界面的 PDOS, 金刚石 PDOS 变化不大. 如图 7(a) 所示, GaN 中 10—20 THz 的声子数量减少. 如图 7(b) 所示, 当石墨烯从单层变为双层时, 石墨烯 PDOS 峰值下降为原先的 32.07%, 作为主要热传输通道的低频声子数大幅减少, 导致界面热导降低; 但 2—5 层石墨烯的 PDOS 峰值并非逐渐减小, 反而依次增加, 表明多层石墨烯引起的声子运动更复杂. 为解释多层石墨烯对界面热导的影响, 计算 2 层和 5 层石墨烯的声子参与率. 从图 7(d) 可以看出, 5 层石墨烯会产生更大程度的声子局域化, 大量声子向局域模式转变, 阻碍界面热传输. 石墨烯层数增加导致界面热导降低的原因是低频声子数减少, 多层石墨烯会加重声子局域化程度, 使界面热导随石墨烯层数的增加不断减少.

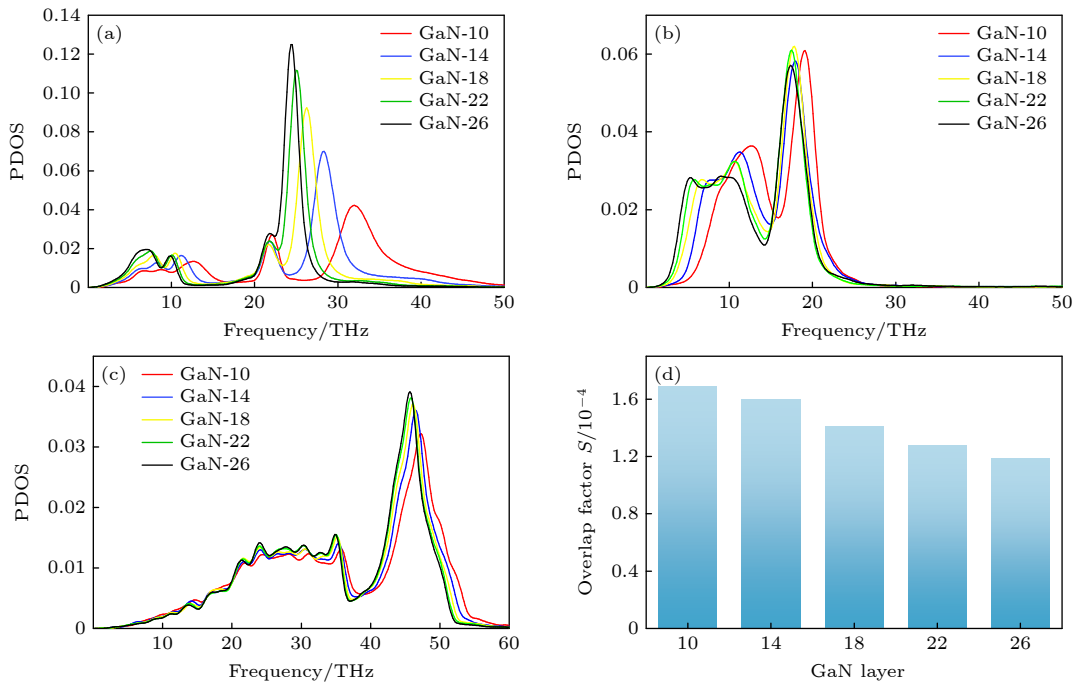


图 6 氮化镓/金刚石层数变化对 (a) 氮化镓、(b) 石墨烯和 (c) 金刚石 PDOS 的影响; (d) PDOS 重叠因子  
Fig. 6. (a) GaN, (b) graphene, and (c) diamond PDOS diagrams for varying layers in the GaN /diamond; (d) overlap factor.

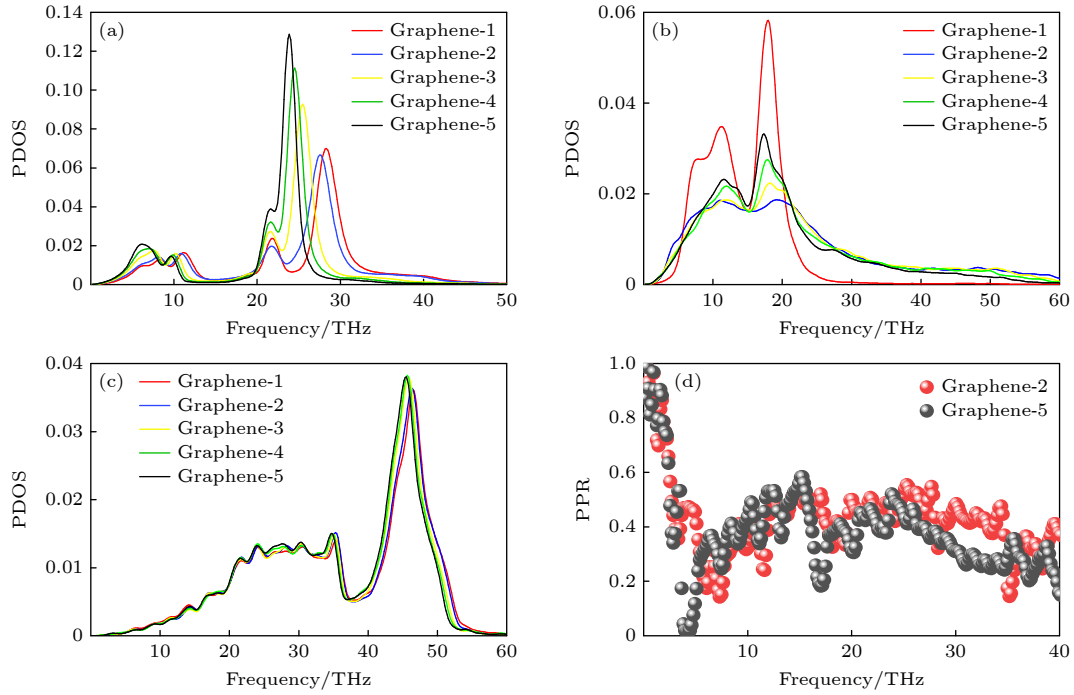


图 7 石墨烯层数变化对 (a) 氮化镓、(b) 石墨烯和 (c) 金刚石 PDOS 的影响; (d) 石墨烯 PPR

Fig. 7. (a) GaN, (b) graphene, and (c) diamond PDOS diagrams with varying numbers of graphene layers; (d) PPR diagram.

### 3.3 缺陷影响

缺陷工程是调节二维材料及异质结构热性能的有效方法, 研究表明, 缺陷会影响石墨烯及其异质结构<sup>[43-45]</sup>、金刚石<sup>[46,47]</sup>和 GaN 异质结构<sup>[48,49]</sup>的界面热导. 金刚石/CBN 界面热导随缺陷率升高不断减小<sup>[50]</sup>, 金刚石/石墨烯界面热导随空位缺陷率增加而增加<sup>[51]</sup>, 石墨烯/MoS<sub>2</sub> 界面热导随空位缺陷率增加不断降低<sup>[52]</sup>, 石墨烯/BN 界面热导随石墨烯空位缺陷率增加不断减小<sup>[53]</sup>. 由于尚不清楚 GaN/石墨烯/金刚石界面的空位缺陷如何影响界面热导, 本节研究四种空位缺陷及缺陷率对界面热导的影响, 缺陷率定义为去除的原子数与原子总数的比率.

如图 8 所示, 界面热导随石墨烯 C 原子缺陷率的增加而下降. 当石墨烯 C 原子缺陷率为 0.1 时, 界面热导减少到 0.185 GW/(K·m<sup>2</sup>). 界面热导随着金刚石 C 原子缺陷率增加而增加, 当金刚石缺陷率为 0.1 时, 界面热导增加到 0.28 GW/(K·m<sup>2</sup>), 提高了 40%. 结果表明, 界面热导对金刚石 C 原子缺陷更敏感, 石墨烯 C 原子缺陷只引起界面热导微小变化. 图 9 为石墨烯缺陷对应的 PDOS, GaN 和金刚石 PDOS 基本不变, 这里不作展示, 仅石墨烯 20 THz 频段 PDOS 峰值下降, 低频声子减少导致界面热导降低. 整体来看, 界面区域 PDOS 变化

不大, 和界面热导相对应. 为证明界面热导变化规律, 计算添加缺陷后的 PPR, 如图 9(b) 所示, 空位缺陷导致声子局域化加重, 阻碍界面热传输, 使界面热导降低.

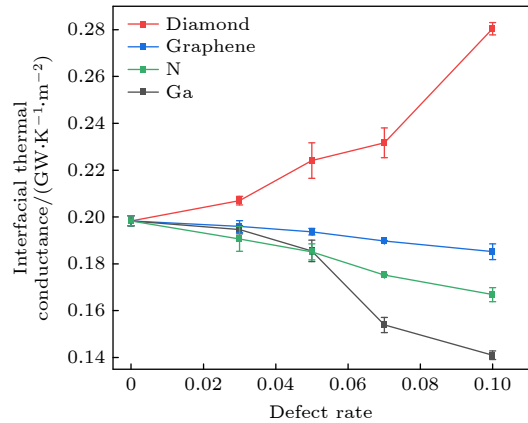


图 8 缺陷率对界面热导的影响

Fig. 8. Relationship between interface thermal conductance and defect concentration.

同时, 研究金刚石 C 原子缺陷对界面热导的影响, 图 10 显示, 金刚石 40—50 THz 的 PDOS 峰值大幅降低, 中频声子数减少, 0—20 THz 低频声子增加. 高频声子被缺陷散射成低频声子, 低频声子数增加, 界面热传输通道增加. 进一步计算重叠因子, 如图 10(b) 所示, 重叠因子从  $1.60 \times 10^{-4}$

上升到  $2.39 \times 10^{-4}$ , 金刚石与石墨烯声子谱的匹配程度增大, 界面耦合程度增加, 传热效率提高. 两种 C 原子缺陷的添加产生相反的效果, 石墨烯缺陷加重声子局域化, 阻碍界面声子热传输, 造成界面热导降低; 金刚石缺陷引起低频声子数增加, 界面耦合程度增大, 改善了界面热传导.

Ga 和 N 两种空位缺陷均会导致界面热导减小, 随着缺陷率从 0 增加到 0.1, 添加 Ga 原子缺陷的界面热导变为  $0.141 \text{ GW}/(\text{K}\cdot\text{m}^2)$ , N 原子缺陷

的界面热导变为  $0.167 \text{ GW}/(\text{K}\cdot\text{m}^2)$ . 当两种缺陷率均为 0.1 时, Ga 原子使界面热导降低 29%, N 降低 16%; 进一步计算 Ga 原子缺陷率为 0.2, 0.3 时的界面热导, 分别为  $0.139, 0.0789 \text{ GW}/(\text{K}\cdot\text{m}^2)$ , 对应 N 缺陷的界面热导为  $0.151, 0.125 \text{ GW}/(\text{K}\cdot\text{m}^2)$ . 结果表明, Ga 原子缺陷引起的界面热导更低, 界面热导对 Ga 原子缺陷更敏感. 为探究界面热导降低的原因, 计算相应的 PDOS, 如图 11 和图 12 所示, 两种缺陷引起的 GaN 声子谱变化大致相同:

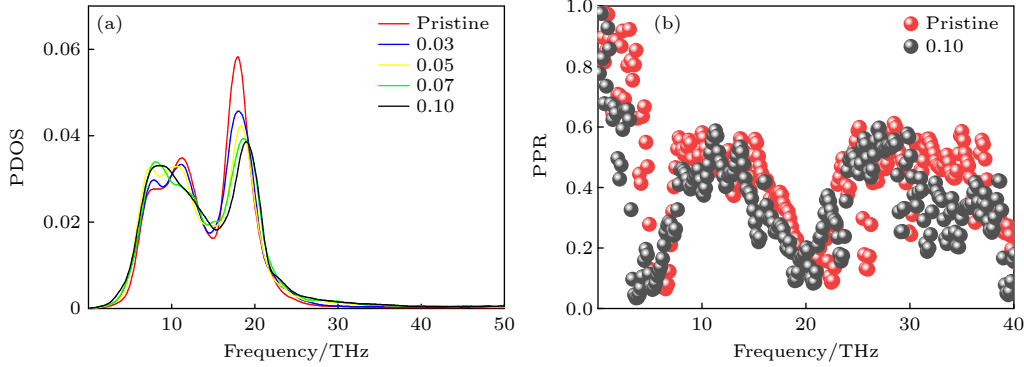


图 9 石墨烯缺陷对 PDOS 的影响 (a) 石墨烯 PDOS; (b) 石墨烯 PPR

Fig. 9. Influence of graphene defects on PDOS: (a) PDOS diagram of graphene; (b) PPR of graphene.

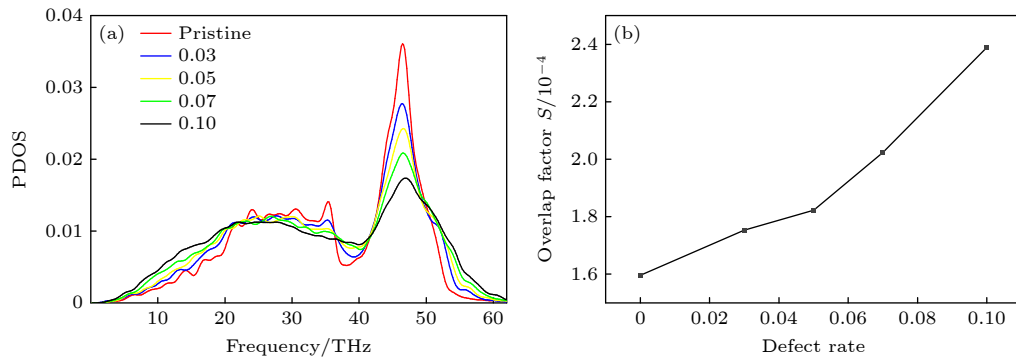


图 10 金刚石缺陷对 PDOS 的影响 (a) 金刚石 PDOS; (b) 重叠因子

Fig. 10. Influence of diamond defects on PDOS: (a) PDOS diagram of diamond; (b) overlap factor.

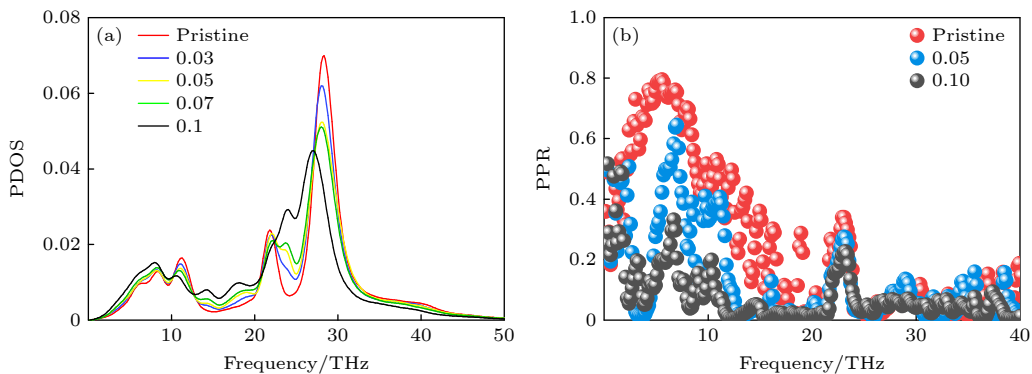


图 11 镓原子缺陷对 PDOS 的影响 (a) 氮化镓 PDOS; (b) 氮化镓 PPR

Fig. 11. Influence of Ga defects on PDOS: (a) PDOS diagram of GaN; (b) PPR diagram of GaN.

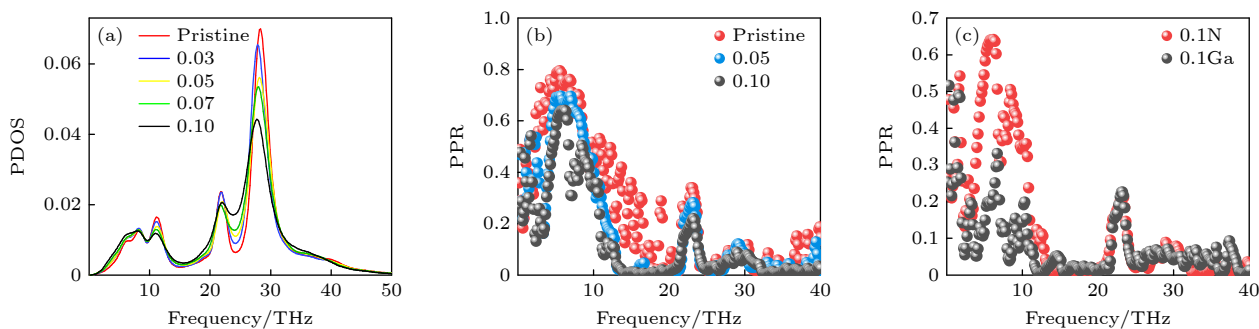


图 12 氮原子缺陷对 PDOS 的影响 (a) 氮化镓 PDOS; (b) 氮化镓 PPR; (c) 镓和氮的 PPR 对比

Fig. 12. Influence of N defects on PDOS: (a) PDOS diagram of GaN; (b) PPR diagram of GaN; (c) comparative PPR diagram of Ga and N.

位于 20—40 THz 的 PDOS 峰值减少, 12—20 THz 低频段的声子数增加. 缺陷散射增加 GaN 低频声子数量, 低频声子数的增加有利于界面热传导, 这与界面热导变化规律相反. Yang 等<sup>[54]</sup>在探究空位缺陷对 GaN/金刚石界面的影响时, 发现相同的 PDOS 变化规律, 缺陷激发的低频声子并未改善界面热导, 反而与热导变化呈现负相关趋势, 与之前 PDOS 所示的传热不符. 事实上, GaN 中的空位缺陷增强了非简谐声子散射, 能量在不同声子之间重新分配, 低频声子能量转移到高频, 导致低频声子传输的热流下降. 如图 11(b) 所示, 当 GaN 中存在空位缺陷时, 各频率下的声子大部分为局域声子, PPR 随着缺陷率增加而减小, 更多的声子被抑制并导致更严重的声子局域化, 阻碍声子传输通道. 为解释 Ga 原子缺陷界面热导更低的原因, 比较两种缺陷引起的 GaN 声子局域化程度. 从图 12(c) 可看出, Ga 原子缺陷会导致更大的声子局域化, 晶格振动更为无序, 声子输运受阻, 造成更低的界面热导.

## 4 结 论

针对 GaN 器件散热问题, 采用 NEMD 方法模拟 GaN/石墨烯/金刚石界面热传输. 研究发现, 界面热导随温度升高而增大, 温度升高会激发更多声子, 促进界面传热, 重叠因子随着温度增加而增加. 而且, 石墨烯层数变化只影响界面热导的大小, 对界面热导的温度变化规律影响不大. GaN 和石墨烯层数增加均使界面热导减少, GaN 层数增加使低频声子数减少, 造成重叠因子减少, 界面声子振动匹配度下降, 界面热导降低; 石墨烯层数增加使低频声子数大幅减少, 造成界面热导降低, 多层

石墨烯会加重声子局域化程度, 导致界面热导随石墨烯层数的增加不断减少. 四种缺陷都会引起界面热导变化, 金刚石 C 原子缺陷使界面热导增大, 其余缺陷均导致界面热导减少. 金刚石缺陷使低频声子数增加, 重叠因子增大, 界面热导增加; 石墨烯缺陷使声子局域化程度加重, 导致界面热导减小; Ga 原子和 N 原子缺陷均会加重声子局域化程度, 导致界面热导减小. 而且, Ga 原子缺陷会造成更大的声子局域化, 产生更低的界面热导. 研究结果对于制造高功率 GaN 器件具有参考意义, 并有望促进 GaN 器件在射频功率领域广泛应用.

## 参考文献

- [1] Liu Q B, Yu C, Guo J C, Ma M Y, He Z Z, Zhou C J, Gao X D, Yu H, Feng Z H 2023 *Acta Phys. Sin.* **72** 098104 (in Chinese) [刘庆彬, 蔚翠, 郭建超, 马孟宇, 何泽召, 周闯杰, 高学栋, 余浩, 冯志红 2023 *物理学报* **72** 098104]
- [2] Jia X, Wei J J, Huang Y B, Shao S W, Kong Y C, Liu J L, Chen L X, Li C M, Ye H T 2020 *Surf. Technol.* **49** 111 (in Chinese) [贾鑫, 魏俊俊, 黄亚博, 邵思武, 孔月婵, 刘金龙, 陈良贤, 李成明, 叶海涛 2020 *表面技术* **49** 111]
- [3] Wu Y J, Fang L, Xu Y 2019 *npj Comput. Mater.* **5** 1
- [4] Feng J J, Fan Y M, Fang D, Deng X G, Yu G H, Wei Z P, Zhang B S 2022 *J. Synth. Cryst.* **51** 730 (in Chinese) [冯家驹, 范亚明, 房丹, 邓旭光, 于国浩, 魏志鹏, 张宝顺 2022 *人工晶体学报* **51** 730]
- [5] Francis D, Faili F, Babić D, Ejeckam F, Nurmikko A, Maris H 2010 *Diamond Relat. Mater.* **19** 229
- [6] Cho J, Francis D, Altman D H, Asheghi M, Goodson K E 2017 *J. Appl. Phys.* **121** 055105
- [7] Zhou Y, Anaya J, Pomeroy J, Sun H, Gu X, Xie A, Beam E, Becker M, Grotjohn T A, Lee C, Kuball M 2017 *ACS Appl. Mater. Interfaces* **9** 34416
- [8] Huang X, Guo Z 2021 *Int. J. Heat Mass Transfer* **178** 121613
- [9] Mu F, Xu B, Wang X, et al. 2022 *J. Alloys Compd.* **905** 164076
- [10] Tao L, Theruvakkattil Sreenivasan S, Shahsavari R 2017 *ACS Appl. Mater. Interfaces* **9** 989
- [11] Jia X, Huang L, Sun M, Zhao X, Wei J, Li C 2022 *Coatings* **12** 672

- [12] Qi Z, Shen W, Li R, Sun X, Li L, Wang Q, Wu G, Liang K 2023 *Appl. Surf. Sci.* **615** 156419
- [13] Middleton C, Chandrasekar H, Singh M, et al. 2019 *Appl. Phys. Express* **12** 024003
- [14] Wu L, Sun X, Gong F, Luo J, Yin C, Sun Z, Xiao R 2022 *Nanomaterials* **12** 894
- [15] Liu F, Zou R, Hu N, Ning H, Yan C, Liu Y, Wu L, Mo F, Fu S 2019 *Nanoscale* **11** 4067
- [16] Hu S, Ju S, Shao C, Guo J, Xu B, Ohnishi M, Shiomi J 2021 *Mater. Today Phys.* **16** 100324
- [17] Hu M, Poulikakos D 2013 *Int. J. Heat Mass Transfer* **62** 205
- [18] Mischke J, Pennings J, Weisenfeld E, Kerger P, Rohwerder M, Mertin W, Bacher G 2020 *2D Mater.* **7** 035019
- [19] Suntornwipat N, Aitkulova A, Djurberg V, Majdi S 2023 *Thin Solid Films* **770** 139766
- [20] Shen B, Ji Z, Lin Q, Gong P, Xuan N, Chen S, Liu H, Huang Z, Xiao T, Sun Z 2022 *Chem. Mater.* **34** 3941
- [21] Jiang M, Chen C, Wang P, Guo D, Han S, Li X, Lu S, Hu X 2022 *Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A.* **119** e2201451119
- [22] Li D, Zou W, Jiang W, Peng X, Song S, Qin Q H, Xue J M 2020 *Ceram. Int.* **46** 10885
- [23] Badokas K, Kadys A, Mickevičius J, Ignatjev I, Skapas M, Stanionytė S, Radiumas E, Juška G, Malinauskas T 2021 *J. Phys. D: Appl. Phys.* **54** 205103
- [24] Barbier C, Largeau L, Gogneau N, et al. 2023 *Cryst. Growth Des.* **23** 6517
- [25] Sun H, Simon R, Pomeroy J, Francis D, Faili F, Twitchen D, Kuball M 2015 *Appl. Phys. Lett.* **106** 111906
- [26] Wang J, Shen Y, Yang P 2023 *Compos. Commun.* **40** 101616
- [27] Tang Y, Liu J K, Yu Z H, Sun L G, Zhu L L 2023 *Chin. Phys. B* **32** 066502
- [28] Liu D 2020 *Phys. Lett. A* **384** 126077
- [29] Ou B, Yan J, Wang Q, Lu L 2022 *Molecules* **27** 905
- [30] Sang L X, Li Z K 2024 *Acta Phys. Sin.* **73** 103105 [桑丽霞, 李志康 2024 物理学报 **73** 103105]
- [31] Liu D J, Zhou F, Chen S Y, Hu Z L, 2023 *Acta Phys. Sin.* **72** 157901 (in Chinese) [刘东静, 周福, 陈帅阳, 胡志亮 2023 物理学报 **72** 157901]
- [32] Qu G D, Deng Z Y, Guo W, et al. 2023 *IEEE Trans. Compon. Packag. Manuf. Technol.* **13** 816
- [33] Wu B Y, Zhou M, Xu D J, Liu J J, Tang R J, Zhang P 2022 *Surf. Interfaces* **32** 102119
- [34] Tang Y Q, Zhang Z, Li L, Guo J, Yang P 2022 *Int. J. Therm. Sci.* **171** 107231
- [35] Wu X, Han Q 2021 *ACS Appl. Mater. Interfaces* **13** 32564
- [36] Huang H, Zhong Y, Cai B, Wang J, Liu Z, Peng Q 2023 *Surf. Interfaces* **37** 102736
- [37] Ma D, Zhang L 2020 *J. Phys. Condens. Matter* **32** 425001
- [38] Danilchenko B A, Paszkiewicz T, Wolski S, Jeżowski A, Plackowski T 2006 *Appl. Phys. Lett.* **89** 061901
- [39] Liu D J, Wang S M, Yang P 2021 *Acta Phys. Sin.* **70** 187302 (in Chinese) [刘东静, 王韶铭, 杨平 2021 物理学报 **70** 187302]
- [40] Yang N, Luo T, Esfarjani K, et al. 2015 *J. Comput. Theor. Nanosci.* **12** 168
- [41] Liu Y, Qiu L, Liu J, Feng Y 2023 *Int. J. Heat Mass Transfer* **209** 124123
- [42] Wei N, Zhou C, Li Z, Ou B, Zhao K, Yu P, Li S, Zhao J 2022 *Mater. Today Commun.* **30** 103147
- [43] Li M, Zhou H, Zhang Y, Liao Y, Zhou H 2018 *Carbon* **130** 295
- [44] Esfahani M N, Jabbari M, Xu Y, Soutis C 2021 *Mater. Today Commun.* **26** 101856
- [45] Liu X, Zhang G, Zhang Y W 2016 *Nano Lett.* **16** 4954
- [46] Wu K, Zhang L, Li F, et al. 2024 *Carbon* **223** 119021
- [47] Loh G C, Teo E, Tay B K 2011 *Diamond Relat. Mater.* **20** 1137
- [48] Yang B, Yang H, Li T, Yang J, Yang P 2021 *Appl. Surf. Sci.* **536** 147828
- [49] Koh Y R, Bin Hoque M S, Ahmad H, et al. 2021 *Phys. Rev. Mater.* **5** 104604
- [50] Li Y, Zhao Q, Liu Y, Huang M, Ouyang X P 2024 *Phys. Scr.* **99** 025944
- [51] Liu Y, Qiu L, Wang Z, Li H, Feng Y 2024 *Composites, Part A* **178** 108008
- [52] Wu S, Wang J, Xie H, Guo Z 2020 *Energies* **13** 5851
- [53] Yang Y, Ma J, Yang J, Zhang Y 2022 *ACS Appl. Mater. Interfaces* **14** 45742
- [54] Yang C, Wang J, Ma D, Li Z, He Z, Liu L, Fu Z, Yang J Y 2023 *Int. J. Heat Mass Transfer* **214** 124433

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

Liu Dong-Jing<sup>1)2)†</sup>    Hu Zhi-Liang<sup>1)</sup>    Zhou Fu<sup>1)</sup>    Wang Peng-Bo<sup>1)</sup>  
 Wang Zhen-Dong<sup>1)</sup>    Li Tao<sup>1)</sup>

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

2) (*Guilin Research and Creation Semiconductor Technology Limited Liability Company, Guilin 541004, China*)

( Received 13 April 2024; revised manuscript received 18 May 2024 )

### Abstract

Gallium nitride chips are widely used in high-frequency and high-power devices. However, thermal management is a serious challenge for gallium nitride devices. To improve thermal dissipation of gallium nitride

devices, the nonequilibrium molecular dynamics method is employed to investigate the effects of operating temperature, interface size, defect density and defect types on the interfacial thermal conductance of gallium nitride/graphene/diamond heterostructure. Furthermore, the phonon state densities and phonon participation ratios under various conditions are calculated to analyze the interface thermal conduction mechanism.

The results indicate that interfacial thermal conductance increases with temperatures rising, highlighting the inherent self-regulating heat dissipation capabilities of heterogeneous. The interfacial thermal conductance of monolayer graphene structures is increased by 2.1 times as the temperature increases from 100 to 500 K. This is attributed to the overlap factor increasing with temperature rising, which enhances the phonon coupling between interfaces, leading the interfacial thermal conductance to increase.

Additionally, in the study it is found that increasing the number of layers of both gallium nitride and graphene leads the interfacial thermal conductance to decrease. When the number of gallium nitride layers increases from 10 to 26, the interfacial thermal conductance decreases by 75%. The overlap factor diminishing with the layer number increasing is ascribed to the decreased match of phonon vibrations between interfaces, resulting in lower thermal transfer efficiency. Similarly, when the number of graphene layers increases from 1 to 5, the interfacial thermal conductance decreases by 74%. The increase in graphene layers leads the low-frequency phonons to decrease, consequently lowering the interfacial thermal conductance. Moreover, multilayer graphene enhances phonon localization, exacerbates the reduction in interfacial thermal conductance.

It is found that introducing four types of vacancy defects can affect the interfacial thermal conductance. Diamond carbon atom defects lead its interfacial thermal conductance to increase, whereas defects in gallium, nitrogen, and graphene carbon atoms cause their interfacial thermal conductance to decrease. As the defect concentration increases from 0 to 10%, diamond carbon atom defects increase the interfacial thermal conductance by 40% due to defect scattering, which increases the number of low-frequency phonon modes and expands the channels for interfacial heat transfer, thus improving the interfacial thermal conductance. Defects in graphene intensify the degree of graphene phonon localization, consequently leading the interfacial thermal conductance to decrease. Gallium and nitrogen defects both intensify the phonon localization of gallium nitride, impeding phonon transport channels. Moreover, gallium defects induce more severe phonon localization than nitrogen defects, consequently leading to lower interfacial thermal conductance.

This research provides the references for manufacturing highly reliable gallium nitride devices and the widespread use of gallium nitride heterostructures.

**Keywords:** interface thermal conductance, temperature effect, size effect, vacancy defect

**PACS:** 02.70.Ns, 65.80.Ck, 68.55.Ln

**DOI:** [10.7498/aps.73.20240515](https://doi.org/10.7498/aps.73.20240515)

---

\* Project supported by the Guangxi Key Laboratory of Manufacturing System & Advanced Manufacturing Technology, China (Grant No. 19-050-44-002Z), the 2024 Project on Enhancement of Basic Research Ability for Young and Middle-aged Teachers in Guangxi Universities, China (Grant No. 2024KY0203), the Innovation Project of Graduate Education of Guilin University of Electronic Science and Technology, China (Grant No. 2024YCXS016), and the 2023 Guangxi Zhuang Autonomous Region New Engineering Research and Practice Project, China (Grant No. XGK202309).

† Corresponding author. E-mail: [ldj168168@126.com](mailto:ldj168168@126.com)



## 基于分子动力学的氮化镓/石墨烯/金刚石界面热导研究

刘东静 胡志亮 周福 王鹏博 王振东 李涛

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

Liu Dong-Jing Hu Zhi-Liang Zhou Fu Wang Peng-Bo Wang Zhen-Dong Li Tao

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 73, 150202 (2024) DOI: 10.7498/aps.73.20240515

CSTR:  $\{\text{metaArticle.multidivStyle}\}$

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.73.20240515>

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>

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>

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>

金刚石/碳纳米管异质界面热导及声子热输运特性

Interface thermal conductance and phonon thermal transport characteristics of diamond/carbon nanotube interface

物理学报. 2024, 73(13): 138102 <https://doi.org/10.7498/aps.73.20240323>

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>

Au-TiO<sub>2</sub>光电极界面声子热输运特性的分子动力学模拟

Molecular dynamics simulation of thermal transport properties of phonons at interface of Au-TiO<sub>2</sub> photoelectrode

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