

## 氮化镓/石墨烯/金刚石异质界面热输运调控研究\*

刘东静<sup>1)2)</sup> 王鹏博<sup>1)</sup> 胡志亮<sup>1)</sup> 陆佳琪<sup>1)</sup> 肖煜<sup>1)</sup> 黄家强<sup>1)†</sup>

1) (桂林电子科技大学机电工程学院, 广西高校微电子封装与组装技术重点实验室, 桂林 541004)

2) (桂林立德智兴半导体有限公司, 桂林 541004)

(2025年7月8日收到; 2025年8月19日收到修改稿)

为研究高功率氮化镓器件散热性能, 构建氮化镓/石墨烯/金刚石异质结构, 采用分子动力学方法调控异质界面热输运特性, 并从声子输运角度揭示异质界面传热机理与调控机制. 研究发现 Ga-C 接触方式的界面热导是 N-C 结构的 3 倍, 且氮化镓/石墨烯/金刚石异质结构不具有热整流特性. N 和 B 掺杂下界面热导先增大后减小, 但 Si 掺杂下界面热导单调增大. 两种 Si 掺杂势函数对应的界面热导差异不大, 但双势函数下的石墨烯结构更稳定. 线性掺杂和圆形掺杂两种掺杂形貌对界面热导影响不大, 但线性掺杂下石墨烯声子谱变化更具规律性. 氢化会严重阻碍界面传热, 但三种氢化结构下的界面热导均随氢化率增加而增大. 研究结果可为氮化镓器件热管理提供理论支持, 同时对突破大功率电子器件散热瓶颈具有指导价值.

**关键词:** 异质结构, 分子动力学, 界面热导, 氢化, 调控机理**PACS:** 02.70.Ns, 65.80.Ck, 68.55.Ln**DOI:** 10.7498/aps.74.20250895**CSTR:** 32037.14.aps.74.20250895

## 1 引言

随着第三代半导体器件向高频、高功率密度方向发展, 氮化镓电子器件面临严峻的热管理挑战<sup>[1]</sup>. GaN/石墨烯/金刚石热管理材料为解决高频氮化镓器件散热问题提供了新途径<sup>[2]</sup>, 但由晶格失配、声子谱差异导致的界面热阻仍制约着复合体系的散热性能, 需进一步改善界面条件降低界面热阻. 因此, 研究有效的界面热输运调控方法对提升氮化镓器件散热性能具有重要意义.

原子尺度的界面调控逐渐成为新兴研究方向<sup>[3]</sup>, 其中缺陷、掺杂和氢化是微尺度界面热输运常用的调控手段<sup>[4]</sup>. Liu 等<sup>[5]</sup>发现石墨烯/硅异质结构的界面热导随氮、硼掺杂缺陷比增加而下降, 且硼掺杂

对界面热导的影响高于氮掺杂. Lee 等<sup>[6]</sup>采用低压化学气相沉积法合成硅掺杂石墨烯, 研究发现 2% 的杂质浓度会使热导率降低 80%. Chegel<sup>[7]</sup>利用 Kubo-Greenwood 公式探究硼、氮和硅掺杂对石墨烯热电性能的影响, 发现 N 掺杂石墨烯结构的热性能大于 B 和 Si 掺杂. Song 等<sup>[8]</sup>发现石墨烯/C<sub>3</sub>N 的界面热导随着氮掺杂浓度增大而增大, 但 C<sub>3</sub>N/石墨烯的界面热导与掺杂浓度并非同步变化, 过高的掺杂浓度会使结构稳定性下降, 界面热导在掺杂浓度为 30% 时降低. Liu 等<sup>[9]</sup>发现 GR/h-BN 异质结构的界面热导随<sup>13</sup>C 和 N 的掺杂浓度增加而增加, 且 N 掺杂的界面热导高于<sup>13</sup>C 掺杂的界面热导. Yang 等<sup>[10]</sup>采用瞬态热脉冲法研究 N 掺杂对 Gr/Si 界面热导的影响, 结果表明 Gr/Si 异质结的 TBR 随着 N 掺杂浓度增加而降低, 在掺杂浓度为

\* 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)、南宁市科学研究与技术开发计划科技重大专项 (批准号: 20241026)、广西重点研发计划 (批准号: 桂科 AB25069315)、桂林电子科技大学研究生教育创新计划 (批准号: 2024YCX016) 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: [huangjiaqiang201@163.com](mailto:huangjiaqiang201@163.com)

3.5% 时 TBR 降低近 30%. Dong 等<sup>[11]</sup> 发现氢化可促进石墨烯/ $\beta$ - $\text{Ga}_2\text{O}_3$  界面热传输, 声子态密度变化显示, 氢原子的添加使得石墨烯 PDOS 明显软化, 在 87 THz 出现新的峰值, 促进了氢原子到  $\beta$ - $\text{Ga}_2\text{O}_3$  的热传导. Yang 等<sup>[12]</sup> 采用分子动力学法研究氢化对石墨烯/六方氮化硼平面热导率的影响, 研究发现 1% 的氢化率就能使热导率降低 55%, 但当氢化率超过 5% 时, 热导率趋于稳定. Liu 等<sup>[5]</sup> 研究发现, 氢原子随机分布破坏了界面的晶体结构, 导致石墨烯/硅界面热导率下降. 综上所述, 掺杂改性和氢化处理等界面工程会显著地影响界面热输运性能, 开展氮化镓/石墨烯/金刚石界面热输运调控研究并揭示热输运调控机理对提升界面传热具有重要意义.

除热输运调控研究外, 异质结构的热整流效应也受到广泛关注<sup>[13]</sup>, 当前微/纳米尺度热整流研究主要集中在新型材料热整流研发和非对称设计调控热整流方面. 在新型材料探索方面: Song 等<sup>[8]</sup> 发现石墨烯/ $\text{C}_3\text{N}$  异质结存在热整流效应, 其中石墨烯 $\rightarrow\text{C}_3\text{N}$  方向的热流密度比反向高 13.8%, 研究认为界面处声子传输特性方向相反导致热整流现象. Wang 等<sup>[14]</sup> 采用非平衡分子动力学研究石墨烯 (Graphene, Gra)/ZnO 异质结构界面的传热, 认为 Gra/ZnO 异质界面不存在整流效应. 在非对称设计方面, Farzadian 等<sup>[15]</sup> 利用 NEMD 研究石墨烯/BCN(G-BCN) 纳米结构的热整流, 发现冷热源温差、应变和两种类型的晶界 (扶手椅形和锯齿形) 均对异质结构热整流效应有影响. Yang 等<sup>[16]</sup> 发现在相同温度和氮掺杂浓度下, 三角形掺杂石墨烯结构的  $K(L\rightarrow R)$  不等于  $K(R\rightarrow L)$ . 分析认为, 氮原子形成的不对称界面区域抑制高频声子, 导致两个相反方向产生热流差异. 综上, 不同异质结构的热输运特性差距较大, 氮化镓/石墨烯/金刚石

异质结构的热整流效应有待研究. 特别是在金刚石 MOSFET 器件领域<sup>[17]</sup>, 随着最大漏极电流突破 0.7 A, 研究金刚石作热源的金刚石/石墨烯/氮化镓界面传热也具有实际意义.

本文采用非平衡分子动力学方法探究界面工程对氮化镓/石墨烯/金刚石异质界面热输运特性的影响. 在探究异质结构热整流效应基础上, 依次利用氢化以及掺杂对界面热输运进行调控, 通过声子重叠因子和声子局域化揭示界面热输运调控机制, 分析不同界面工程参数下的界面热导变化规律. 研究结果为原子尺度调控界面热输运提供理论参考, 同时为进一步降低氮化镓/石墨烯/金刚石异质结构的界面热阻提供支持.

## 2 模拟过程

本研究采用 MS 软件构建氮化镓/石墨烯/金刚石异质结构, GaN 采用纤锌矿结构<sup>[18]</sup>, 石墨烯为六方蜂窝晶格, 金刚石为立方结构, 模型如图 1 所示.

氮化镓 [0 0 0 1] 晶向为热输运方向, 晶格平面 (0001) 为  $xy$  平面, 对表 1 中的原始晶格参数进行扩胞, 异质结构的横截面积为  $32.08 \text{ \AA} \times 38.86 \text{ \AA}$ ,  $z$  轴长度为  $70.26 \text{ \AA}$ , 总原子数为 9932, GaN 与石墨烯界面的  $x, y$  方向失配率为 0.57% 和 1.69%, 石墨烯与金刚石界面的失配率为 0.38% 和 2.31%, 失配率均小于 5%, 符合实验外延生长条件<sup>[19]</sup>.

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

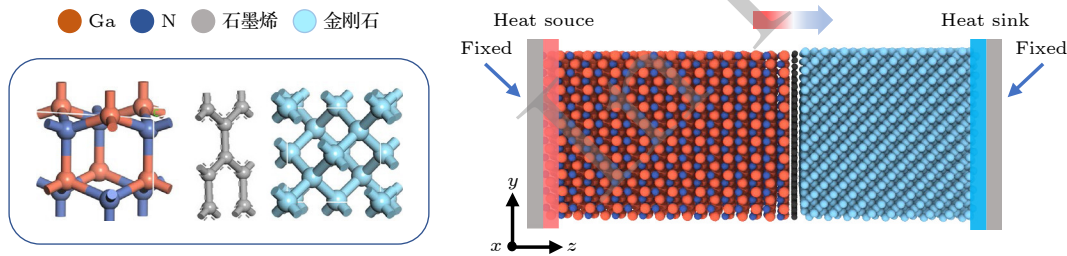


图 1 氮化镓/石墨烯/金刚石异质结构模型

Fig. 1. Heterostructure model of gallium nitride/graphene/diamond.

在研究掺杂对界面热导的影响时,所有掺杂方式均选择替代掺杂<sup>[20]</sup>,氮、硼掺杂可直接在单层石墨烯结构中用对应原子替换碳原子实现,硅替代掺杂选用 Si3 掺杂模式,石墨烯晶格中的单个原子被硅替代,硅与三个相邻的碳原子形成  $sp^3$  杂化结构. 本文使用随机掺杂和规则掺杂两种方式,随机掺杂利用 NumPy 模块将石墨烯原子按编号排列为二维矩阵,使用随机抽样方法生成编号列表进行掺杂. 规则掺杂包括线性掺杂和圆形掺杂两类,线性掺杂在三条平行直线上按空间位置筛选原子,对满足条件的原子编号掺杂,圆形掺杂中的圆半径等于线性掺杂中相邻两条直线的线间距. 在构建氢化模型时,随机选择的原理与上述掺杂所述一致,在对应小节中不再叙述.

本文相关计算均使用 LAMMPS 软件包完成. 在势函数设置环节,采用 Tersoff 势描述 Ga-N-C 多体相互作用<sup>[21]</sup>;使用 AIREBO 势函数描述石墨烯原子间相互作用<sup>[22]</sup>,掺杂原子和石墨烯原子间的相互作用由 Tersoff 势函数描述,其中氮、硼掺杂选用 BNC.Tersoff 势<sup>[23]</sup>,Si 掺杂选用 SiC\_Erhart-Albe.tersoff 势<sup>[24]</sup>;中间层原子与氮化镓、金刚石的相互作用由 Lennard-Jones 势函数描述,如表 2 所列.

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

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

在分子动力学模拟中,相关参数设置如下:时间积分步长设定为 0.25 fs, Lennard-Jones 势函数截断半径取 10,对三维体系施加周期性边界条件. 模拟分为三个阶段:首先,运用共轭梯度算法对初始构型进行几何优化. 然后,利用 NVT 系综在 300 K 下对氮化镓/石墨烯/金刚石异质结构进行 0.25 ns 的弛豫以达到平衡状态. 恒温弛豫之后,在 NVE(恒定原子数和体积)系综下进一步弛豫 0.25 ns. 最后,保持 NVE 系综不变,在热源和热汇区域引入局部朗之万恒温器,通过朗之万方法实现局部热浴,热源和热汇区域的温度分别设置为 330 K 和 270 K,在 NVE 系综中持续 1 ns,同时固定两端的原子避免与热源和热汇的原子重叠. 待系

统中形成稳定的温度梯度后,收集 0.75 ns 的温度分布和累积能量,拟合界面处的温差以及沿  $z$  方向的热流量,并计算两组拟合结果的平均值,以减少统计误差. 图 2 所示为界面温差与热流量的统计结果,在此基础上据 (1) 式计算界面热导<sup>[25]</sup>.

$$G = \frac{J}{A\Delta T}, \quad (1)$$

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.

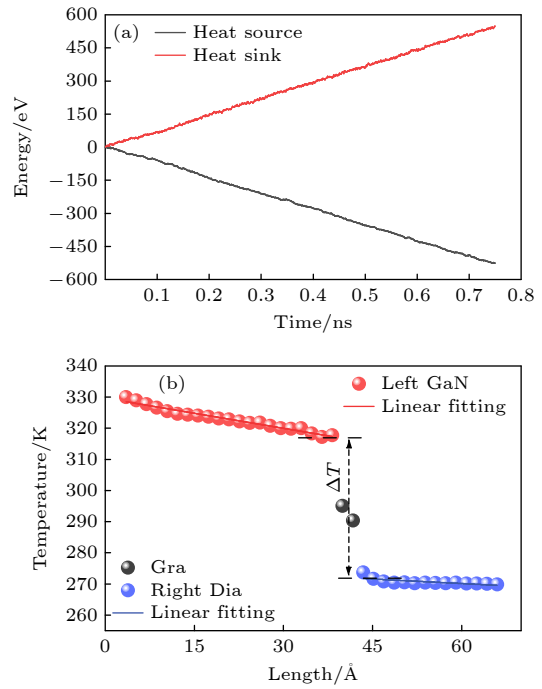


图 2 (a) 热源、热汇能量累积; (b) 沿热流方向的温度分布  
Fig. 2. (a) Accumulation of energy from heat source and heat sink; (b) temperature distribution along the direction of heat flow.

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):

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

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>[26]</sup>

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

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, 参与热运输的声子数减少, 具体计算式为 [27]

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

式中,  $N$  是原子总数,  $P_i(\omega)$  是对应频率下的 PDOS.

### 3 结果与讨论

#### 3.1 异质结构的热整流效应

热整流在微/纳米级散热、热电性能改善、热开关和热晶体管等方面具有重要研究价值 [28,29]. 因此, 本节对氮化镓/石墨烯/金刚石的整流效应展开研究, 为新型材料的热性能调控及设计制造提供参考.

在探究异质结构的热整流效应之前, 对比两种界面接触方式下的界面热学特性. Ga-石墨烯和 N-石墨烯异质结构模型如图 3 所示, 两种结构的界面热导计算结果如图 4 所示. 整体上, Ga-石墨烯结构的界面热导高于 N-石墨烯结构, 室温下 Ga-石墨烯结构的界面热导为  $0.198 \text{ GW}/(\text{K}\cdot\text{m}^2)$ , 而

N-石墨烯结构的界面热导为  $0.067 \text{ GW}/(\text{K}\cdot\text{m}^2)$ . 结果显示, 界面原子接触类型对传热具有明显影响, Ga-石墨烯接触类型更有利于界面传热.

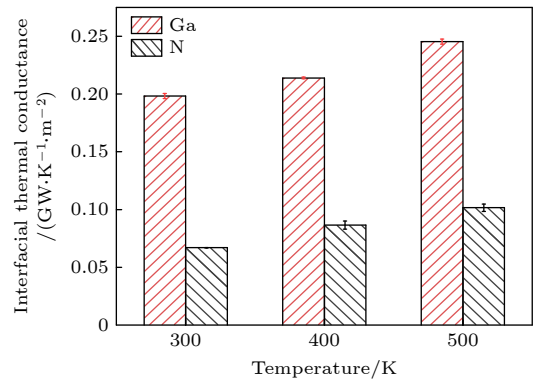


图 4 Ga-石墨烯和 N-石墨烯接触方式下的界面热导对比图  
Fig. 4. Comparison plot of interfacial thermal conductance for Ga-graphene and N-graphene contact configurations.

两种结构的 PDOS 计算结果如图 5 所示. Ga-C 结构中的氮化镓声子谱比 N-C 结构更宽, 石墨烯声子的截止频率在 N-C 结构为 20 THz, 而在 Ga-C 结构中超过 25 THz; 对比发现 Ga-C 结构中异质界面声子频谱更宽, 表明 Ga-C 界面允许传热的声子频率更高. N-C 界面石墨烯声子截止频率

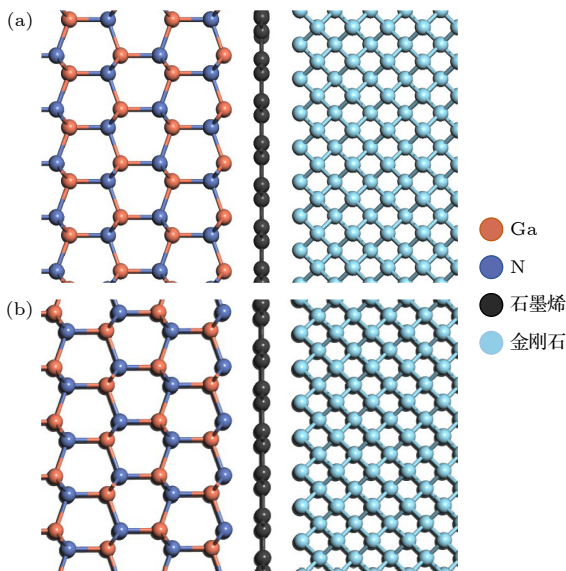


图 3 (a) Ga-石墨烯接触方式结构模型; (b) N-石墨烯接触方式结构模型

Fig. 3. Interface model of (a) Ga-graphene and (b) N-graphene contact configurations.

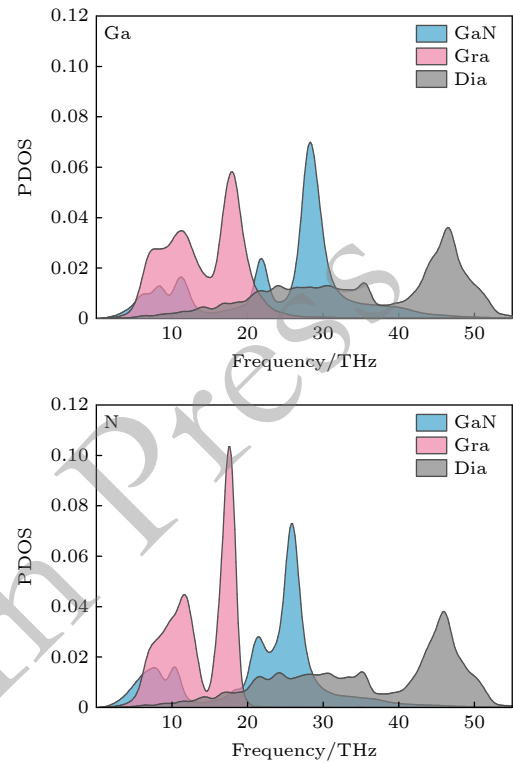


图 5 Ga-石墨烯和 N-石墨烯接触方式下的界面 PDOS 对比图  
Fig. 5. Comparison plot of interfacial PDOS for Ga-graphene and N-graphene contact configurations.

较低,说明高频声子很难通过 N-C 界面传热,而 Ga-C 界面声子截止频率较高,允许更多声子参与界面热运输. Ga-C 界面 10—20 THz 和 20 THz 附近声子谱重合程度明显增加,进一步量化重叠因子,得到 Ga-C 界面和 N-C 界面的  $S$  因子分别为  $1.596 \times 10^{-4}$  和  $1.068 \times 10^{-4}$ ,表明 Ga-C 界面声子耦合程度更高,因此 Ga-C 界面的传热效果更好. 根据上述研究结果, Ga-C 界面接触方式更有利于界面传热,因此下面对 Ga-C 接触型异质结构展开热整流效应研究.

通过将异质结构置于正负温度梯度探究氮化镓/石墨烯/金刚石界面处的热整流特性,热源和热汇的温差为 60 K,氮化镓→金刚石和金刚石→氮化镓热流方向的界面热导结果如图 6 所示. 整体上看,两种结构的界面热导未表现出明显差异性,说明热流方向对异质界面热运输影响不大. 室温下,氮化镓→金刚石方向的界面热导为  $0.198 \text{ GW}/(\text{K}\cdot\text{m}^2)$ ,金刚石→氮化镓方向的界面热导为  $0.195 \text{ GW}/(\text{K}\cdot\text{m}^2)$ ,结果表明两者差异并不显著. 进一步采用 (5) 式计算热整流比<sup>[30]</sup>:

$$\gamma = \frac{\kappa_1 - \kappa_2}{\kappa_2}, \quad (5)$$

其中  $\gamma$  代表热整流比;  $\kappa_1$  和  $\kappa_2$  分别为氮化镓→金刚石和金刚石→氮化镓热流方向的界面热导.

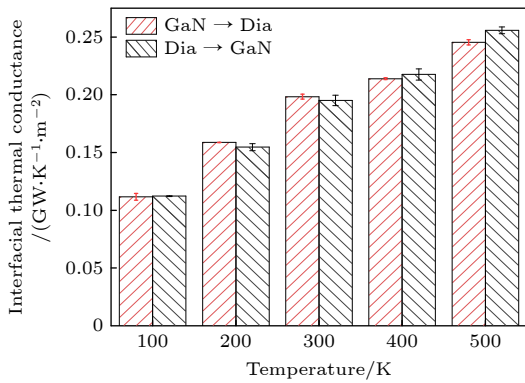


图 6 两种热流方向下的界面热导对比图

Fig. 6. Comparison plot of interfacial thermal conductance for two heat flow directions.

室温下,氮化镓/石墨烯/金刚石结构的热整流比为 1.641%. 为验证上述结论,构建中间层为双层石墨烯的氮化镓/石墨烯/金刚石异质结构,计算不同热流方向下的界面热导,结果如图 7 所示. 整体上看,热流方向不会对界面传热造成明显影响. 室温下,氮化镓→金刚石方向的界面热导为

$0.182 \text{ GW}/(\text{K}\cdot\text{m}^2)$ ,而金刚石→氮化镓的界面热导为  $0.187 \text{ GW}/(\text{K}\cdot\text{m}^2)$ ,热整流比为 2.575%. 根据上述计算结果,认为氮化镓/石墨烯/金刚石异质结构的热整流效应不理想.

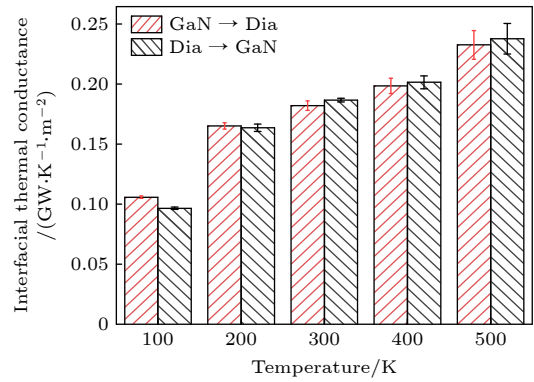


图 7 双层石墨烯结构在不同热流方向下的界面热导对比图  
Fig. 7. Comparison plot of interfacial thermal conductance in bilayer graphene structure under different heat flow directions.

表 3 为无热整流效应异质结构的调研结果<sup>[14,22,31,32]</sup>,对不同异质结构热整流数值进行对比,认为氮化镓/石墨烯/金刚石异质界面无热整流效应. 分析认为,在许多已发表的工作中,通过使用不对称设计,热整流现象很容易在面内异质结构或二维材料中实现. 这是因为二维材料中的原子通过异质结处的强共价键连接,并且沿异质结两侧的组成二维材料的面内热性能显著不同. 因此,声子热传输对热流方向敏感,异质结中会出现明显的热整流现象. 相比之下,在三维异质结构中,不同层之间通过弱范德瓦耳斯力相互作用,界面不同方向上的声子散射相对均匀,异质结构表现出较为对称的热流传导. 此外,上述研究只对氮化镓/石墨烯/金刚石基础模型进行研究,异质结构中并未添加原子掺杂,避免非对称设计对界面热整流效应的影响. 因此,氮化镓/石墨烯/金刚石异质结构无明显的热整流效应.

表 3 无热整流效应异质结构的调研结果表

Table 3. Investigation results of heterostructures without thermal rectification effect.

异质结构	一侧界面热导 / (GW·K <sup>-1</sup> ·m <sup>-2</sup> )	另一侧界面热导 / (GW·K <sup>-1</sup> ·m <sup>-2</sup> )	热整流比
Sn/h-BN <sup>[32]</sup>	$1.43 \times 10^{-2}$	$1.39 \times 10^{-2}$	2.86%
Gra/h-BN <sup>[31]</sup>	$2.35 \times 10^{-1}$	$2.51 \times 10^{-1}$	6.74%
Gra/SiC <sup>[22]</sup>	$3.77 \times 10^{-3}$	$3.69 \times 10^{-3}$	2.21%
Gra/ZnO <sup>[14]</sup>	$8.75 \times 10^{-2}$	$8.76 \times 10^{-2}$	0.15%

### 3.2 氢化对异质界面热导的影响

氢化是调节石墨烯热导率的有效方法, 利用氢化调控界面传热有望为纳米级热管理提供新策略. 本节采用非平衡分子动力学模拟氢化对氮化镓/石墨烯/金刚石异质结构热运输的影响, 构建三种氢化异质结构模型进行对比, 通过将石墨烯双侧 100% 氢化得到石墨烷<sup>[33,34]</sup>, 利用 python 随机函数删除氢原子得到双侧氢化模型. 在得到石墨烷后, 利用氢化的可逆性去除石墨烷一侧所有的氢原子得到石墨酮, 利用 python 随机函数对石墨酮脱氢得到单侧氢化模型, 构建的三种模型分别为双面氢化、氮化镓侧氢化和金刚石侧氢化模型, 具体如图 8 所示. 氢化率定义为单层石墨烯原子数与氢原子数的比值, C—H 键长设定为 1.14 Å. 由于氢化率过大会影响结构稳定性, 所以设定氢化率范围为 5% 到 25%.

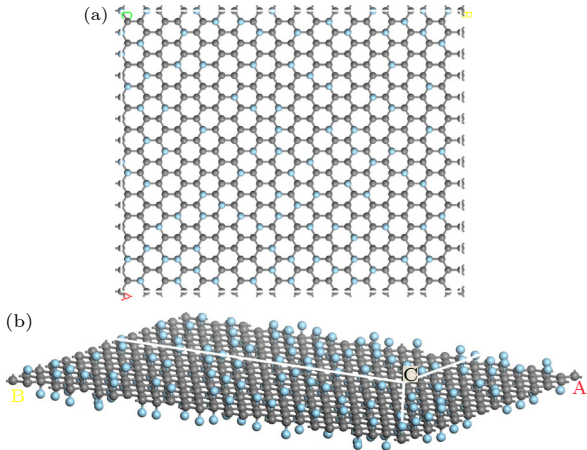


图 8 (a) 单侧氢化俯视图; (b) 双侧氢化侧视图  
Fig. 8. (a) Top view of single-side hydrogenation; (b) Side view of double-side hydrogenation.

图 9 为三种氢化结构界面热导随氢化率的变化关系. 整体来看, 氢化后的界面热导随氢化率单调增加. 当氢化率从 5% 增加到 25% 时, 双侧氢化结构的界面热导从 0.0288 GW/(K·m<sup>2</sup>) 增长到 0.0861 GW/(K·m<sup>2</sup>), 金刚石侧氢化的界面热导值从 0.0336 GW/(K·m<sup>2</sup>) 增长到 0.0704 GW/(K·m<sup>2</sup>), 氮化镓侧氢化的界面热导值从 0.0213 GW/(K·m<sup>2</sup>) 增长到 0.0447 GW/(K·m<sup>2</sup>). 对比三者差异, 双侧氢化的界面热导要高于单侧氢化结构, 单侧氢化结构中金刚石侧氢化的界面热导要高于氮化镓侧氢化. 另外, 同未氢化的模型 (0.198 GW/(K·m<sup>2</sup>)) 相比较, 氢化使界面热导大幅降低.

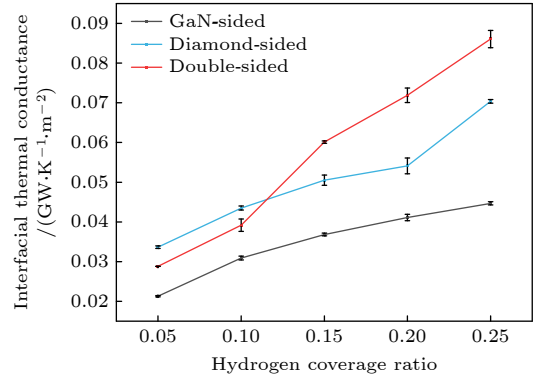


图 9 三种氢化结构的界面热导变化图  
Fig. 9. Plot of interfacial thermal conductance variation for three hydrogenated structures.

图 10 为双侧氢化异质结构在不同氢化率下的声子态密度. 图 10(a) 显示, 随着氢化率增加, 氢化石墨烯的 PDOS 峰值逐渐降低, 声子谱向高频方向移动, 20—40 THz 中频声子增加, 特别是在 25 THz 激发出新的中频峰. 氢原子的原子质量较小, 倾向于在高频下振动, 当氢化率增加时, 石墨烯结构中参与振动的氢原子数量增加, 在 PDOS 中高频段激发出新的声子. 另外, 石墨烯位于 0—20 THz 频段的 PDOS 峰值大幅下降, 但异质结构界面热导并未降低, 为探究两者变化的差异性, 给出不同氢化率下的界面声子态密度图. 图 10(b)—(f) 显示, 低频段声子耦合程度主要受氮化镓和金刚石影响, 氮化镓和金刚石在低频区域的重叠部分很小, 说明低频声子通过界面传递的能量已经接近最小值. 因此, 石墨烯低频段声子分布虽大幅减少, 但不会影响界面声子耦合程度. 还可以看出, 异质界面重叠因子随氢化率增加而增大, 证实氢化率的增加并未对界面声子耦合产生不利影响. 氢原子的出现激发出新的中频声子, 打开了面外声子耦合新通道, 引起界面声子耦合程度提高, 促进了界面热传输.

此外, 三种氢化结构的界面热导呈现明显差异, 双侧氢化的界面热导明显高于单侧氢化. 当氢化率为 25%, 双侧氢化界面热导是金刚石侧氢化的 1.2 倍, 是氮化镓侧氢化的 1.9 倍. 为探究氢化结构对界面热导的影响, 对三种氢化结构的声子局域化进行计算, 结果如图 11 所示. 同未氢化的异质结构相比, 三种氢化结构的声子局域化程度均呈现大幅下降, 说明氢化导致石墨烯声子局域化加重. 氢化后石墨烯碳原子之间的  $\pi$ — $\pi$  键被破坏, 碳原子与相邻氢原子形成  $\sigma$  键, 碳的杂化从  $sp^2$

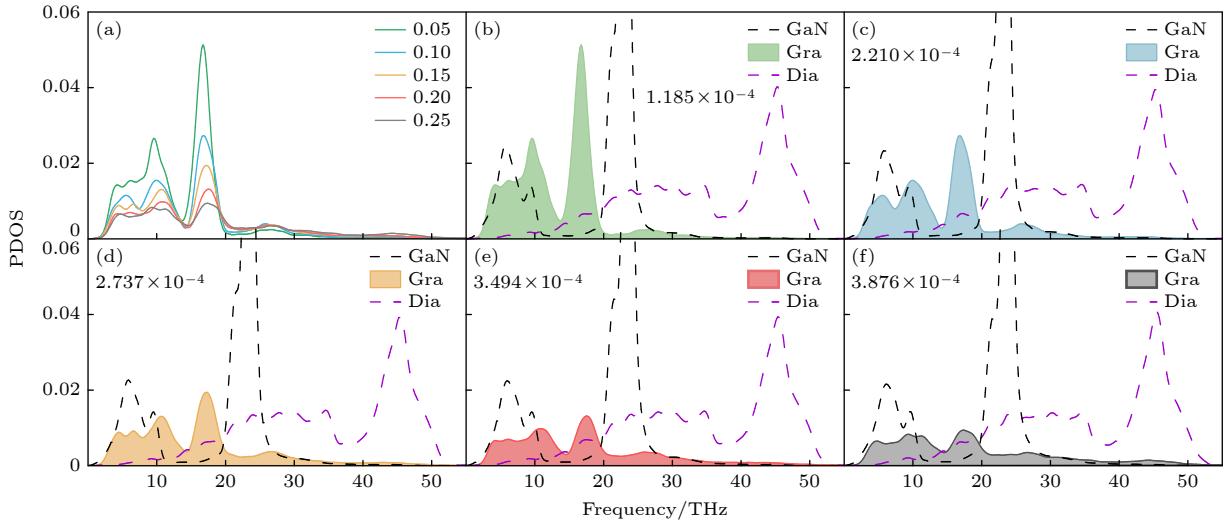


图 10 (a) 双侧氢化结构中的石墨烯 PDOS 变化图; (b), (c), (d), (e) 和 (f) 不同氢化率对应的界面 PDOS 变化图

Fig. 10. (a) Plot of graphene PDOS variation in the double-side hydrogenated structure; (b), (c), (d), (e), and (f) plots of interfacial PDOS variation corresponding to different hydrogenation ratios.

转变为  $sp^3$ .  $sp^3$  杂化导致键长和键角局部畸变, 破坏了石墨烯原有的周期性晶格排列<sup>[7]</sup>, 造成石墨烯声子局域化效应加重, 图中表现为石墨烯 PPR 数值大幅减小. 因此, 氢化后异质结构的界面热导要远低于初始结构. 另外, 相较于双侧氢化方式, 单侧氢化结构的声子局域化程度更重, 表明单侧氢化下声子传输通道更少, 界面热导更低. 由图 11 明显看出, 氮化镓侧氢化的声子局域化程度最重, 说明氮化镓侧氢化中参与界面热传输的声子数最少, 界面热导最低.

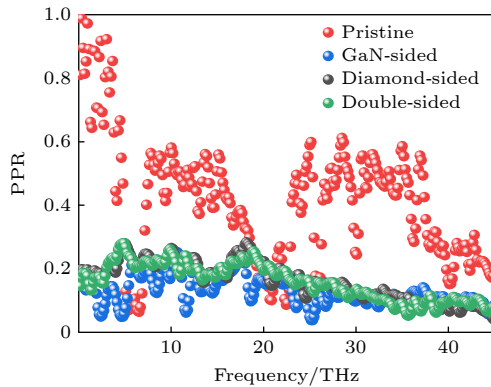


图 11 氢化对 PPR 的影响

Fig. 11. Effect of Hydrogenation on PPR.

分析认为, 氢化石墨烯结构中氢原子的随机性破坏了界面的晶体结构, 氢化导致碳杂化从  $sp^2$  转变为  $sp^3$ , 界面无序和杂化转变导致界面声子的传输路径受阻, 石墨烯声子局域化加重. 因此, 氢化导致氮化镓/石墨烯/金刚石界面热导大幅下降. 但

是, 随着氢覆盖率从 5% 增加到 25%, 异质结构中参与界面传热的氢原子数量增加, 氢原子为界面热传输开启了新的声子通道, 界面间的声子耦合程度增加, 界面热导逐渐增大.

### 3.3 掺杂对异质界面热导的影响

#### 3.3.1 掺杂元素对异质界面热导的影响

元素掺杂可以改善材料的物理性能, 石墨烯中的掺杂原子包括 B, N, S, P 和 Si, 由于石墨烯中碳的原子半径与 B 和 N 相似, 所以 B 和 N 是研究最广泛的掺杂原子<sup>[35]</sup>. 本节首先构建 B, N 和 Si 三种掺杂结构模型, 研究掺杂种类、掺杂浓度对氮化镓/石墨烯/金刚石异质结构热传输的影响, 在此基础上研究势函数选取及掺杂形貌对界面热导的影响, 并从声子传输角度解释界面传热调控机理.

当掺杂浓度超过 5% 时, 石墨烯结构会受到破坏, 本文设定最大掺杂比为 5%. 图 12 为掺杂三种元素后异质结构的界面热导与掺杂率的关系. 从界面热导整体变化趋势看出, 硅掺杂异质结构的界面热导随掺杂率增大而增加, 但氮、硼掺杂下界面热导呈现先增加后下降趋势. 从界面热导变化幅度可以看出, 氮、硼掺杂对界面热导影响较小, 当氮掺杂为 3% 时, 界面热导最大为  $0.207 \text{ GW}/(\text{K}\cdot\text{m}^2)$ ; 当硼掺杂为 4% 时, 界面热导最大为  $0.223 \text{ GW}/(\text{K}\cdot\text{m}^2)$ . 相比之下, 硅掺杂的异质结构的界面热导随着硅掺杂浓度的增加而显著增加. 在掺杂浓度为 5% 时, 硅掺杂氮化镓/石墨烯/金刚石结构的界

面热导达到  $0.346 \text{ GW}/(\text{K}\cdot\text{m}^2)$ , 远高于氮、硼元素掺杂异质结构的界面热导. 结果表明, 硅元素掺杂可以显著增大界面热导, 改善界面传热性能.

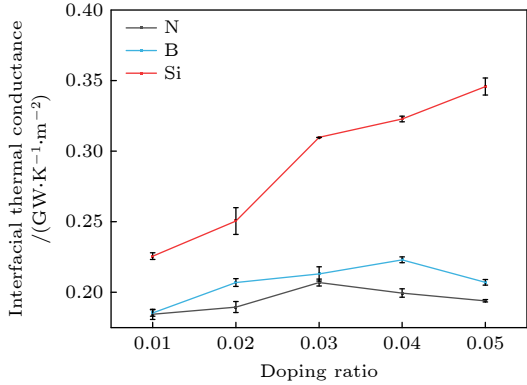


图 12 引入不同掺杂元素后的界面热导变化图  
Fig. 12. Effects of three dopant elements on interfacial thermal conductance.

为探究掺杂对氮化镓/石墨烯/金刚石异质结构界面热导的影响机制, 对不同体系的 PDOS 进行分析. 图 13 为 N, B 掺杂后异质界面的重叠因子计算结果. 如图 13(a) 所示, N 掺杂后重叠因子变

化呈现先增加后降低的趋势, 在掺杂率为 3% 时达到最大值  $1.86 \times 10^{-4}$ , 随后开始下降. 如图 13(b) 所示, B 掺杂后重叠因子也呈现先增加后下降的趋势, 在掺杂率为 4% 时达到最大值  $2.08 \times 10^{-4}$ . N 和 B 掺杂下界面声子谱具有相似的变化趋势, 掺杂浓度的增加使界面声子耦合程度先增加后降低, 所以界面热导的变化也呈现先增加后降低趋势.

先前的研究表明, Si 掺杂对石墨烯热导率的抑制效应比 N 掺杂更明显 [36,37], 但 Si 掺杂能够显著提升异质界面的传热性能 [19]. 与 B, N 元素相比, Si 与石墨烯碳原子之间的质量差更大, Si 掺杂石墨烯和氮化镓衬底间的层间相互作用更强, 强相互作用有利于界面热运输. 图 14(a) 为不同 Si 掺杂浓度所对应的石墨烯 PDOS, 随着 Si 掺杂浓度的增加, 石墨烯低频峰值逐渐下降, 20—30 THz 频段声子数增加. 与原始的氮化镓/石墨烯/金刚石异质结构相比, 在 Si 掺杂的异质结构界面中, 氮化镓、石墨烯和金刚石的 PDOS 有更多的重叠, 界面声子谱的耦合程度更高.

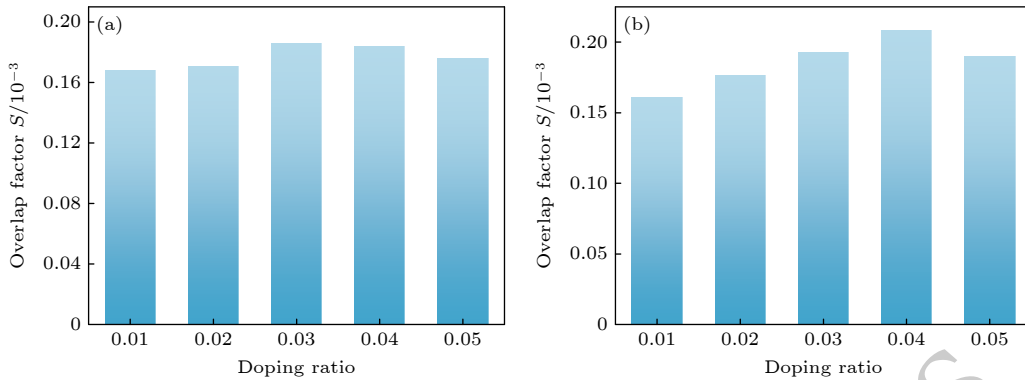


图 13 氮和硼掺杂对重叠因子的影响 (a) 氮掺杂后的重叠因子; (b) 硼掺杂后的重叠因子  
Fig. 13. Effects of nitrogen and boron doping on overlap factor: (a) Overlap factor after nitrogen doping; (b) overlap factor after boron doping.

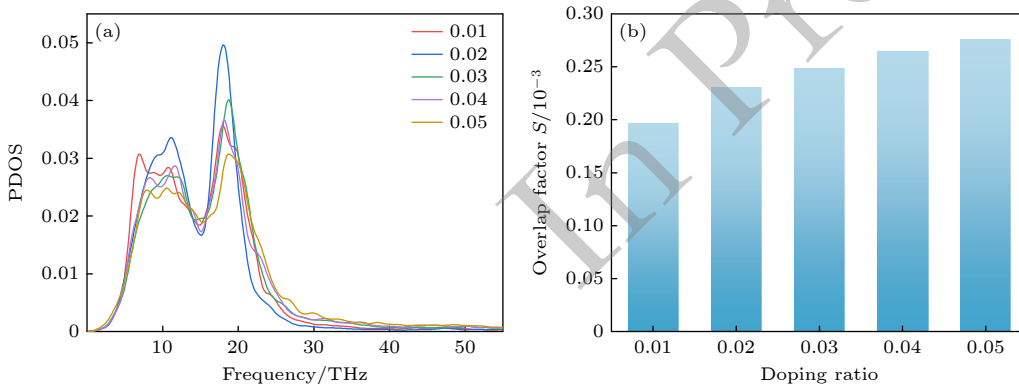


图 14 硅掺杂对 PDOS 的影响 (a) 石墨烯 PDOS; (b) 重叠因子  
Fig. 14. Effect of silicon doping on PDOS; (a) Graphene PDOS; (b) overlap factor.

分析认为,这一热导增强可归因于声子聚焦效应<sup>[38]</sup>,该机制在一定条件下导致面内与跨面热输运呈现负相关趋势.另一方面,在石墨烯中引入Si元素掺杂可以有效促进界面间声子谱的重叠.与B、N元素掺杂相比, Si掺杂的界面声子耦合更强,当掺杂浓度为5%时, B、N和Si掺杂异质结构的声子匹配系数分别为  $1.90 \times 10^{-4}$ 、 $1.76 \times 10^{-4}$ 和  $2.76 \times 10^{-4}$ .这证实Si掺杂后氮化镓/石墨烯/金刚石异质界面的声子耦合程度增大,引起异质结构界面热导增加.

结果还表明,1%的氮掺杂会导致界面热导低于初始结构.为探究掺杂对原始结构的影响,图15(b)给出N掺杂后石墨烯的PPR变化图.相较于未掺杂的石墨烯,掺杂1%会使石墨烯的PPR下降.同时给出掺杂1%和5%时的PPR对比图(图15(d)),能够看出两者差异并不明显,即掺杂会改变石墨烯声子局域化程度,但掺杂浓度的增加对声子局域化程度影响并不显著.

同理,图15(a)给出B掺杂率为1%时石墨烯的PPR变化情况,掺杂后的PPR局域化程度更严重,特别是在15—20 THz频段.同时从图15(c)

得到,1%和5%的B掺杂石墨烯的PPR差异并不显著,再次证明掺杂会加重石墨烯声子局域化程度,但研究范围内掺杂浓度的增加不会影响声子局域化程度.

### 3.3.2 势函数对异质界面热导的影响

上文研究表明Si掺杂可有效增大氮化镓/石墨烯/金刚石界面热导,利用Si掺杂调控界面传热具有一定的应用潜力,文献调研显示, Si掺杂石墨烯的势函数主要有两种:一种使用 Tersoff 势来描述掺杂石墨烯原子间的相互作用<sup>[39,40]</sup>;另一种使用 AIREBO 势描述C原子之间的相互作用,利用 Tersoff 势描述C和Si相互作用<sup>[36,41]</sup>.为探究势函数选取对掺杂结果的影响,本节分别选用两种势函数进行模拟,对比两种势函数对界面传热的影响.

首先,研究随机掺杂方式中势函数选取对界面热导的影响.图16显示,两种势函数下的界面热导均随掺杂率增加而增加,且两者间并未表现出明显的差异性.当掺杂率最大时,单势函数的界面热导为  $0.375 \text{ GW}/(\text{K} \cdot \text{m}^2)$ ,对应双势函数的界面热导为  $0.346 \text{ GW}/(\text{K} \cdot \text{m}^2)$ ,两者误差为7.73%.计算结果表明,势函数选择对界面热导的影响较小.

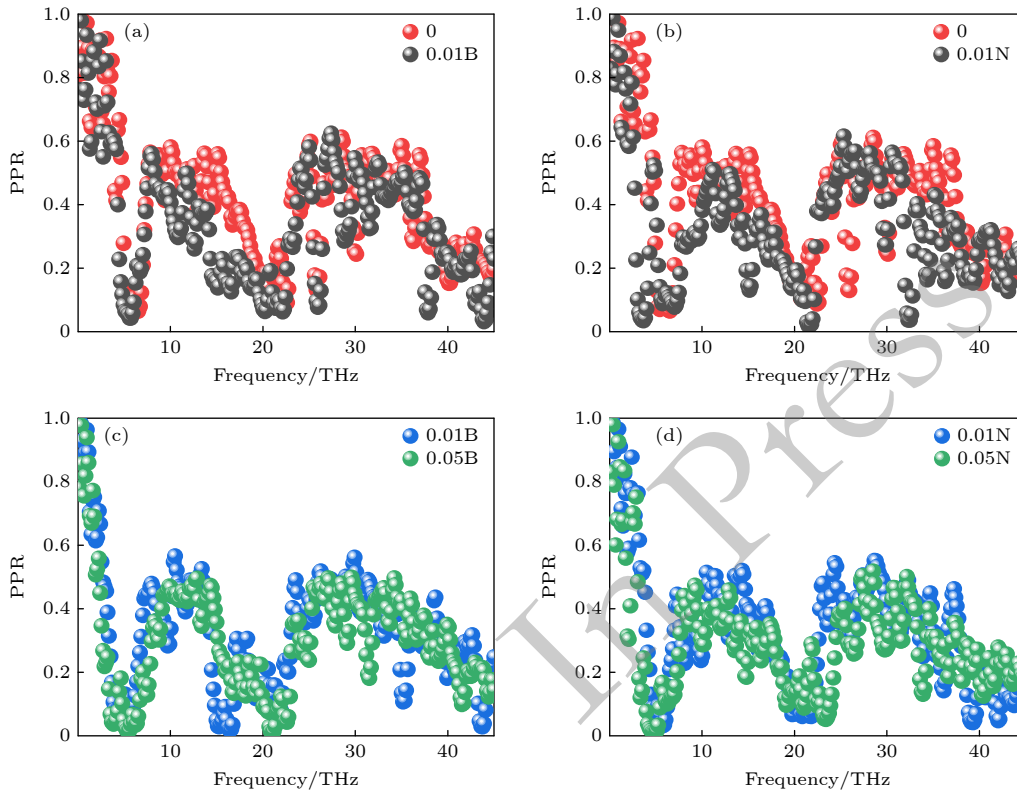


图 15 氮和硼掺杂对 PPR 的影响 (a) 硼掺杂后的 PPR; (b) 氮掺杂后的 PPR; (c) 不同硼掺杂率对应的 PPR; (d) 不同氮掺杂率对应的 PPR  
Fig. 15. Effects of nitrogen and boron doping on PPR: (a) PPR after boron doping; (b) PPR after nitrogen doping; (c) PPR corresponding to different boron doping ratios; (d) PPR corresponding to different nitrogen doping ratios.

为减小随机掺杂方式对计算结果的影响, 进一步探究规则掺杂方式下两种势函数选取对界面传热的影响, 计算结果如图 17 所示. 两种势函数下的界面热导未表现出明显差异, 当掺杂浓度最大时, 选用单势函数得到的界面热导为  $0.335 \text{ GW}/(\text{K}\cdot\text{m}^2)$ , 对应双势函数的计算结果为  $0.329 \text{ GW}/(\text{K}\cdot\text{m}^2)$ , 两者误差为 1.79%. 结果表明, 两种势函数对掺杂结果的影响并不显著.

图 18 给出同为规则掺杂方式下两种势函数的界面 PDOS 变化曲线. 整体上, 势函数的选取对氮化镓和金刚石的 PDOS 影响不大, 但不同势函数

下的石墨烯 PDOS 出现较大变化. 氮化镓中 20—40 THz 中频峰值下降, PDOS 呈现蓝移趋势, 10—20 THz 低频段声子数增加. 金刚石中 0—20 THz 低频段声子数增加, 高频峰值呈下降趋势. 石墨烯 PDOS 受到势函数显著影响, 其中采用单一势函数的 PDOS 峰值完全消失, 等掺杂率下的 PDOS 变化更为剧烈; 但两者也有相同的变化趋势, 图 18(b) 和图 18(e) 显示, 两种势函数下石墨烯 PDOS 峰值随掺杂率的增加而下降, 最大声子截止频率均在 30 THz, 且均具有蓝移趋势. 分析认为, 势函数选取对界面热导的影响并不显著, 采用双势函数时掺

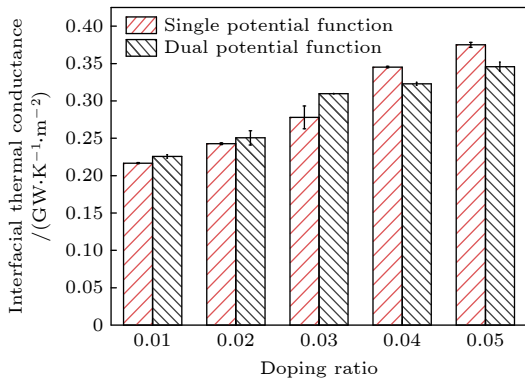


图 16 两种势函数在随机掺杂方式下的界面热导对比图  
Fig. 16. Comparison plot of interfacial thermal conductance for two potential functions under random doping configurations.

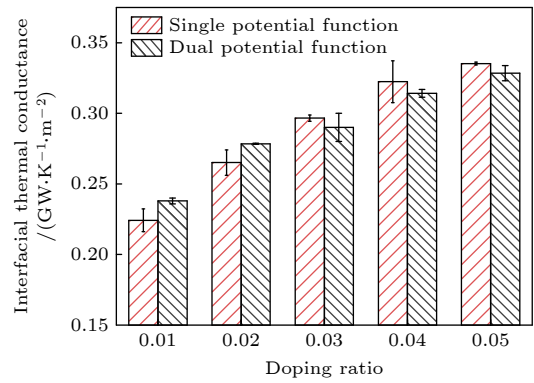


图 17 两种势函数在规则掺杂方式下的界面热导对比图  
Fig. 17. Comparison plot of interfacial thermal conductance for two potential functions under regular doping configurations.

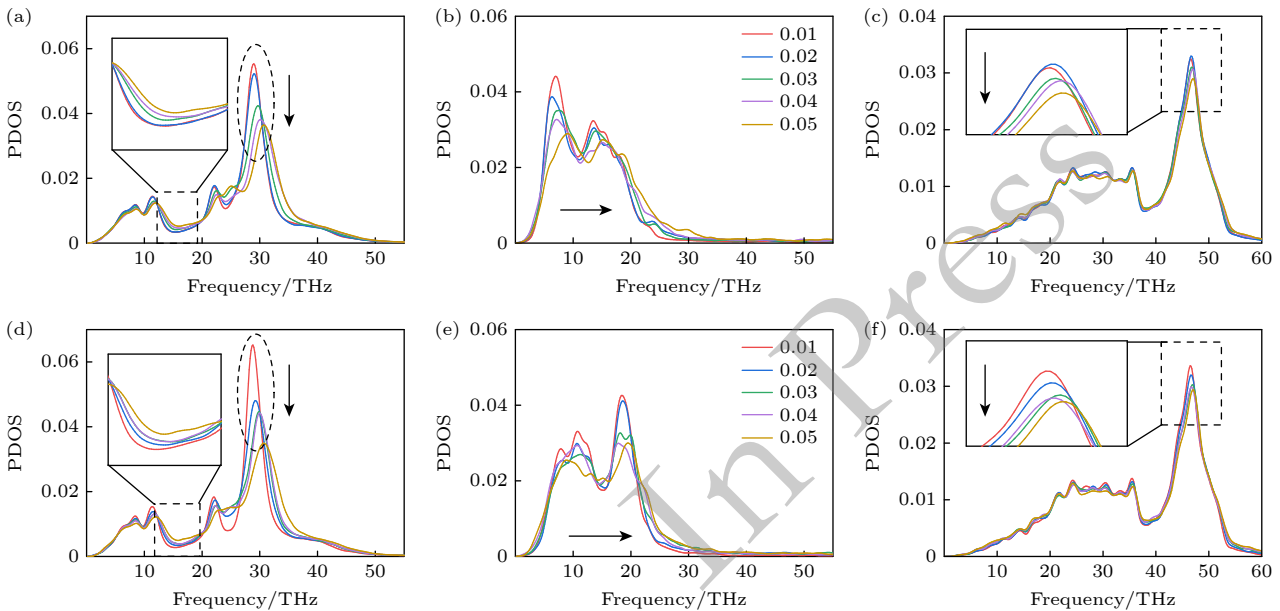


图 18 (a), (b), (c) 单势函数下的氮化镓、石墨烯和金刚石的 PDOS 变化图; (d), (e), (f) 双势函数下的氮化镓、石墨烯和金刚石的 PDOS 变化图  
Fig. 18. (a), (b), (c) Plots of PDOS variation for gallium nitride, graphene, and diamond under the single potential function; (d), (e), (f) plots of PDOS variation for gallium nitride, graphene, and diamond under the double potential functions.

杂石墨烯结构更稳定. 另外, 对比随机掺杂和规则掺杂的计算误差, 发现选用规则掺杂时, 两种势函数的计算结果差值较小, 相较于势函数选择, 掺杂形貌似乎对界面热导也有影响.

### 3.3.3 掺杂形貌对异质界面热导的影响

在石墨烯热学特性的掺杂研究中, 已有涉及掺杂形貌对热运输的影响研究, Zhang 等<sup>[42]</sup>通过改变氮掺杂位置调控双层石墨烯热导率, 随着掺杂位置从热源移到热汇, 双层石墨烯热导率呈现先降后升趋势. Liang 和 Wei<sup>[23]</sup>发现平行多硼掺杂石墨烯的热导率比三角单硼掺杂更低. Yang 等<sup>[16]</sup>利用非平衡分子动力学研究三角形氮掺杂石墨烯的热性能, 发现石墨烯热导率随着氮浓度增加急剧下降. 已有的掺杂形貌的研究, 大多数只针对单一石墨烯材料, 不同掺杂形貌下异质结构界面热运输的研究较少.

为研究掺杂形貌对氮化镓/石墨烯/金刚石界面热导的影响, 构建两种 Si 掺杂形貌, 分别为线性 Si 掺杂和圆形 Si 掺杂, 两种石墨烯掺杂形貌如图 19 所示.

界面热导计算如图 20 所示, 两种掺杂形貌下的界面热导均随掺杂率增加而增大, 且两种掺杂形貌对应的界面热导未表现出明显差异. 当掺杂浓度最大时, 圆形掺杂的界面热导为  $0.312 \text{ GW}/(\text{K}\cdot\text{m}^2)$ ,

线性掺杂的界面热导为  $0.329 \text{ GW}/(\text{K}\cdot\text{m}^2)$ , 两者误差为 5.44%. 结果表明, 掺杂形貌对界面热导的

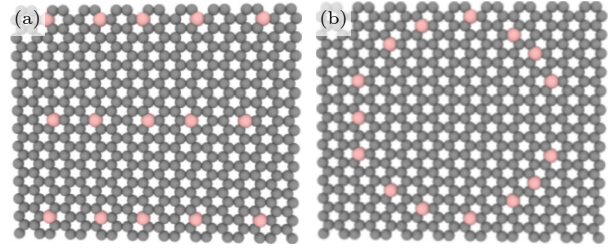


图 19 两种规则掺杂形貌 (a) 线性 Si 掺杂; (b) 圆形 Si 掺杂

Fig. 19. Two regular doping morphologies: (a) Linear Si doping; (b) circular Si doping.

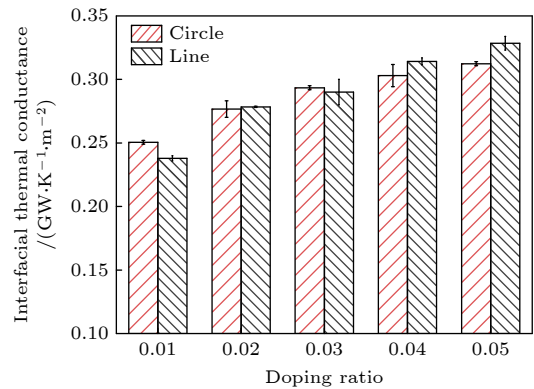


图 20 两种掺杂形貌下的界面热导对比图

Fig. 20. Comparison plot of interfacial thermal conductance under two doping morphologies.

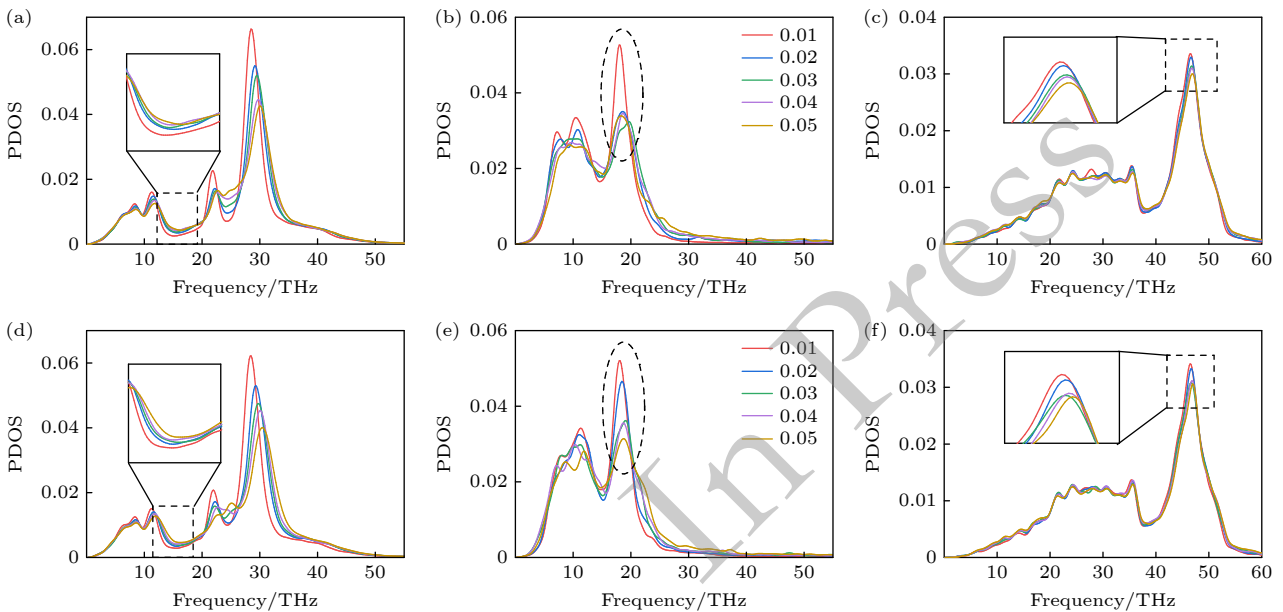


图 21 (a), (b), (c) 圆形掺杂下的氮化镓、石墨烯和金刚石的 PDOS 变化图; (d), (e), (f) 线性掺杂下的氮化镓、石墨烯和金刚石的 PDOS 变化图

Fig. 21. (a), (b), (c) Plots of PDOS variation for gallium nitride, graphene, and diamond under circular doping; (d), (e), (f) plots of PDOS variation for gallium nitride, graphene, and diamond under linear doping.

影响并不显著. 进一步考虑随机掺杂计算结果, 掺杂率为 5% 的界面热导为  $0.346 \text{ GW}/(\text{K}\cdot\text{m}^2)$ , 三者平均误差为 6.95%. 结果表明, 在 5% 的掺杂范围内, 三种掺杂形貌并未表现出明显差异性, 掺杂形貌对界面热导影响有限, 在传热性能上未展现出某一掺杂方式的显著优势.

为了揭示掺杂形貌对热运输的影响, 图 21 给出了两种掺杂形貌下界面声子态密度变化曲线. 整体上, 两种掺杂形貌下的界面 PDOS 随掺杂浓度同步变化, 氮化镓低频声子增加, 高频峰值下降, 以及整体声子谱蓝移; 石墨烯声子峰值下降, 最大声子截止频率右移, 金刚石声子谱高频峰值随掺杂率增加规律下降. 界面材料声子谱的同步变化证实两种掺杂形貌下的热导差异并不明显. 但是, 两种掺杂形貌下的石墨烯声子谱存在略微差异, 对比图 21(b) 和图 21(e), 线性掺杂下石墨烯的声子谱变化更具有规律性, 而圆形掺杂下的石墨烯声子谱更具有突变性. 分析认为, 圆形掺杂受限于石墨烯尺寸和圆半径, 当掺杂浓度超过 2% 时, Si 原子与石墨烯中 C 原子的相互作用面积已经接近极限, 而线性掺杂中 Si 原子与石墨烯原子间的作用面积更大, 参与界面传热的 Si 声子随着掺杂原子的增加而增多, 所以线性掺杂下的石墨烯声子谱呈现规律性变化. 分析认为, 掺杂形貌对界面热导的影响很小, 在一定的掺杂浓度范围内, 未观察到某一掺杂方式具有显著优势. 但在特定的掺杂浓度下, 掺杂形貌会影响石墨烯 PDOS 分布.

## 4 结 论

为进一步提升氮化镓器件散热性能, 采用分子动力学方法对氮化镓/石墨烯/金刚石界面热运输进行调控, 研究发现:

1) Ga-C 型界面原子接触结构更有利于界面传热, 这是由于 Ga-C 界面具有更大的声子截止频率, 参与界面热运输的低频和中频声子数更多, 所以 Ga-C 结构的界面热导更大. 在不引入任何界面掺杂的前提下, 氮化镓/石墨烯/金刚石异质结构不具有热整流特性.

2) 氢化导致界面热导大幅下降, 但三种氢化结构下的界面热导均随氢化率增加逐渐增大, 而且双侧氢化结构的界面热导要高于单侧氢化结构. 这是由于氢原子的引入破坏了晶体结构, 界面无序和

杂化转变加剧声子局域化, 导致界面热导大幅下降, 由于双侧氢化的局域化程度较低, 界面热导相对更高. 但氢原子的引入为界面开启新的传热通道, 所以界面热导随氢化率逐渐增大.

3) 氮、硼掺杂下的界面热导随掺杂率先升后降, 但硅掺杂使界面热导单调增加. 氮、硼掺杂下界面声子耦合程度随掺杂率先增大后减小, 对应界面热导先升高后降低. 由于较大的质量失配, 硅掺杂石墨烯增强了层间相互作用, 界面声子耦合程度增大促使界面热导增加. 硅掺杂势函数的选取对界面热导影响不大, 但采用双势函数描述的硅掺杂石墨烯结构更为稳定. 线性掺杂和圆形掺杂下界面热导无明显差异, 但线性掺杂下石墨烯的声子谱变化更具规律性.

研究结果对于氮化镓/石墨烯/金刚石异质界面高效传热及应用优化具有参考意义, 并有望促进氮化镓高功率密度器件在功率转换、变频和逆变领域的应用.

## 参考文献

- [1] Sajjad Hossain Rafin S M, Ahmed R, Haque M A, Hossain M K, Haque M A, Mohammed O A 2023 *Micromachines-Basel* **14** 2045
- [2] Liu D J, Hu Z L, Zhou F, Wang P B, Wang Z D, 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]
- [3] Zha J W, Wang F, Wan B Q 2025 *Prog. Mater. Sci.* **148** 101362
- [4] Giri A, Walton S G, Tomko J, Bhatt N, Johnson M J, Boris D R, Lu G, Caldwell J D, Prezhdov O V, Hopkins P E 2023 *ACS Nano* **17** 14253
- [5] Liu D, Wang S, Zhu J, Li H, Zhu H 2022 *Phys. Lett. A* **426** 127895
- [6] Lee W, Kihm K D, Kim H G, Lee W, Cheon S, Yeom S, Lim G, Pyun K R, Ko S H, Shin S 2018 *Carbon* **138** 98
- [7] Chegel R 2023 *Diamond Relat. Mater.* **137** 110154
- [8] Song J, Xu Z, He X 2020 *Int. J. Heat Mass Transfer* **157** 119954
- [9] Liu F, Zou R, Hu N, Ning H, Yan C, Liu Y, Wu L, Mo F, Fu S 2019 *Nanoscale* **11** 4067
- [10] Yang H, Gao S, Pan Y, Yang P 2024 *Int. Commun. Heat Mass Transfer* **155** 107521
- [11] Dong S, Yang B, Xin Q, Lan X, Wang X, Xin G 2022 *Phys. Chem. Chem. Phys.* **24** 12837
- [12] Yang Y, Ma J, Yang J, Zhang Y 2022 *ACS Appl. Mater. Interfaces* **14** 45742
- [13] Chen G F, Bao W L, Chen J, Wang Z L 2022 *Carbon* **190** 170
- [14] Wang J, Shen Y, Yang P 2023 *Compos. Commun.* **40** 101616
- [15] Farzadian O, Yousefi F, Shafiee M, Khoeiini F, Spitas C, Kostas K V 2024 *J. Mol. Graph. Model.* **129** 108763
- [16] Yang B, Li D, Qi L, Li T, Yang P 2019 *Phys. Lett. A* **383** 1306
- [17] Oi N, Okubo S, Tsuyuzaki I, Hiraiwa A, Kawarada H 2024 *IEEE Electron Device Lett.* **45** 1554

- [18] Wang Y, Wang S, Zhang Y, Cheng Z, Yang D, Wang Y, Wang T, Cheng L, Wu Y, Hao Y 2024 *Nanoscale* **16** 15170
- [19] Yang B, Wang J, Yang Z, Xin Z, Zhang N, Zheng H, Wu X 2023 *Mater. Today Phys.* **30** 100948
- [20] Zhu H T, Li G R, Fang C, Zhou Y P, Fang Z J, Zhao K 2023 *ACTA Petrol. Mineral.* **42** 673 (in Chinese) [朱洪涛, 黎广荣, 方诚, 周义朋, 方志杰, 赵凯 2023 *岩石矿物学杂志* **42** 673]
- [21] Tao L, Theruvakkattil Sreenivasan S, Shahsavari R 2017 *ACS Appl. Mater. Interfaces* **9** 989
- [22] Islam M S, Mia I, Ahammed S, Stampfl C, Park J 2020 *Sci. Rep.* **10** 22050
- [23] Liang Q, Wei Y 2014 *Phys. B: Condens. Matter* **437** 36
- [24] Erhart P, Albe K 2005 *Phys. Rev. B* **71** 035211
- [25] Yang B 2021 *Ph. D. Dissertation* (ZhenJiang: Jiangsu University) (in Chinese) [杨兵 2021 博士学位论文 (镇江: 江苏大学)]
- [26] 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]
- [27] 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]
- [28] Shao C K, Tang Y, Chen G, Yu S D, Yan C M, Ding X R, Yuan W, Zhang S W 2024 *J. Mech. Eng.* **60** 271 (in Chinese) [邵常焜, 汤勇, 陈恭, 余树东, 颜才满, 丁鑫锐, 袁伟, 张仕伟 2024 *机械工程学报* **60** 271]
- [29] Ding H B, He J R, Ding L M, He T 2024 *DeCarbon* **4** 100048
- [30] Zhao H, Yang X, Wang C, Lu R, Zhang T, Chen H, Zheng X 2023 *Mater. Today Phys.* **30** 100941
- [31] Yang Y, Ma J, Pei Q X, Yang J, Zhang Y 2023 *Int. J. Heat Mass Transfer* **216** 124558
- [32] Das P, Paul P, Hassan M, Morshed A M, Paul T C 2025 *Comput. Mater. Sci* **246** 113359
- [33] Kochaev A, Maslov M, Katin K, Efimov V, Efimova I 2022 *Mater. Today Nano* **20** 100247
- [34] Tong Z, Yang Y L, Xu J, Liu W, Chen L 2023 *Acta Phys. Sin.* **72** 068201 (in Chinese) [佟赞, 杨银利, 徐晶, 刘伟, 陈亮 2023 *物理学报* **72** 068201]
- [35] Xiang X, Liu L, Ba J W 2023 *J. Atom. Mol. Phys.* **40** 032002 (in Chinese) [向鑫, 刘浪, 把静文 2023 *原子与分子物理学报* **40** 032002]
- [36] Yang B, Li D, Yang H, Wang J, Yang P 2020 *Int. Commun. Heat Mass Transfer* **117** 104735
- [37] Goharshadi E K, Mahdizadeh S J 2015 *J. Mol. Graphics Modell* **62** 74
- [38] Weng Y K, Yousefzadi Nobakht A, Shin S, Kihm K D, Aaron D S 2021 *Int. J. Heat Mass Transfer* **169** 120979
- [39] Majeti V K, Roy A, Gupta K K, Dey S 2020 *IOP Conf. Ser.: Mater. Sci. Eng.* **2020** 012188
- [40] Habibur Rahman M, Mitra S, Motalab M, Bose P 2020 *RSC Adv.* **10** 31318
- [41] Rajasekaran G, Kumar R, Parashar A 2016 *Mater. Res. Express* **3** 035011
- [42] Zhang X, Zhang J, Yang M 2020 *Solid State Commun.* **309** 113845

# Thermal transport regulation at GaN/graphene/diamond heterojunction interfaces\*

LIU Dongjing<sup>1)2)</sup> WANG Pengbo<sup>1)</sup> HU Zhiliang<sup>1)</sup> LU Jiaqi<sup>1)</sup>XIAO Yu<sup>1)</sup> HUANG Jiaqiang<sup>1)†</sup>

1) (*Guangxi Education Department Key Laboratory of Microelectronic Packaging and Assembly Technology, College of Mechanical and Electrical Engineering, Guilin University of Electronic Technology, Guilin 541004, China*)

2) (*Guilin LDZX Semiconductor Co., Ltd., Guilin 541004, China*)

( Received 8 July 2025; revised manuscript received 19 August 2025 )

## Abstract

In order to ascertain the heat dissipation performance of high-power gallium nitride devices, the thermal transport characteristics of GaN/graphene/diamond heterostructures are investigated at heterogeneous interfaces through molecular dynamics simulations. This study focuses on phonon transport mechanisms and regulatory strategies in the interfacial regions. The key findings are summarized below.

Comparative analysis of two contact configurations reveals that the Ga-C structure exhibits an interfacial thermal conductance three times higher than that of the N-C structure, which is attributed to its larger phonon cutoff frequency and enhanced interfacial phonon coupling as evidenced by phonon spectral analysis. The intrinsic heterostructure demonstrates no thermal rectification characteristics without interface engineering. The analysis of hydrogenation effects shows that although hydrogenation generally hinders interfacial heat transfer, the thermal conductance increases paradoxically with the increase of hydrogenation ratio. This counterintuitive phenomenon arises from hydrogen-induced lattice disorder/hybridization scattering causing phonon localization (particularly severe in GaN-side hydrogenation), while generating new phonon coupling channels. The elemental doping investigations show that nitrogen and boron doping leads to an initial increase and subsequent decrease in interfacial thermal conductance, while silicon doping produces monotonic enhancement. Overlap factor analysis indicates that N and B doping first strengthens then weakens interfacial phonon coupling, whereas Si doping significantly improves coupling through synergistic effects of strong interfacial interactions and phonon focusing. Comparative evaluation of two Si doping potential functions shows that the difference in thermal conductance results is negligible. The studies on doping morphology show that although linear doping configurations can cause systematic changes in graphene phonon spectra, their influence on interfacial thermal conductance is minimal.

These findings offer critical theoretical insights into thermal management optimization of GaN-based devices and provide fundamental guidance for overcoming thermal dissipation bottlenecks in high-power electronic systems.

**Keywords:** heterostructure, molecular dynamics, interfacial thermal conductivity, hydrogenation, regulation mechanism

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

**DOI:** [10.7498/aps.74.20250895](https://doi.org/10.7498/aps.74.20250895)

**CSTR:** [32037.14.aps.74.20250895](https://cstr.cn/32037.14.aps.74.20250895)

\* Project supported by the 2024 Project on Enhancement of Basic Research Ability for Young and Middle-aged Teachers in Guangxi Universities, China (Grant No. 2024KY0203), the Nanning Scientific Research and Technology Development Plan Major Science and Technology Project, China (Grant No. 20241026), the Guangxi Key Research and Development Program, China (Grant No. Gui Ke AB25069315), the Guilin University of Electronic Technology's Graduate Education Innovation Program, China (Grant No. 2024YCXS016), and the 2023 Guangxi Zhuang Autonomous Region Project for Research and Practice on New Engineering Disciplines, China (Grant No. XGK202309).

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