

专题: 半导体物理与器件

基于机器学习力场的 AlN/GaN 超晶格 热导率应变与结构调控*

韩鹏¹⁾²⁾ 臧行^{1)2)†} 于艳¹⁾²⁾ 张凤¹⁾²⁾ 周诺丹¹⁾²⁾
石芝铭^{1)2)‡} 孙晓娟¹⁾²⁾ 黎大兵¹⁾²⁾

1) (中国科学院长春光学精密机械与物理研究所, 特种发光科学与技术全国重点实验室, 长春 130033)

2) (中国科学院大学, 北京 100049)

(2025 年 11 月 29 日收到; 2026 年 3 月 5 日收到修改稿)

本文针对宽禁带氮化物半导体 AlN, GaN 及其 AlN/GaN 超晶格结构, 构建出具有密度泛函理论 (DFT) 精度的机器学习力场, 并用于替代耗时的 DFT 计算, 高效精确地模拟了其热输运性质, 研究了应变与层数结构对热导率的影响. 研究表明, 所开发的力场在能量、力及声子谱预测上均达到 DFT 精度, 验证了其可靠性. 通过对不同双轴应变 ($\pm 5\%$) 下热导率的模拟, 发现压缩应变可显著提升热导率, 而拉伸应变则导致热导率下降; 其微观机制源于应变对声子群速度、寿命及散射率的调控. 尤为重要的是, 超晶格热导率远低于其组元材料, 主要归因于界面引起的本征散射增强导致声子寿命急剧降低. 此外, 在总层数固定的 AlN/GaN 超晶格中, 热导率随 AlN 势垒层增厚而显著提升, 据此提出“厚势垒、窄量子阱”的结构设计原则, 为高性能氮化物器件的热电协同优化与热管理提供了关键理论依据与设计路径.

关键词: 宽禁带氮化物半导体, 机器学习力场, 热力学性质, 应变

DOI: 10.7498/aps.75.20251623

CSTR: 32037.14.aps.75.20251623

1 引言

近二十年来, 半导体材料领域中有两个方向取得了显著进展: 一类是以 AlN, GaN 等为代表的 III 族氮化物, 即第三代半导体材料; 另一类是以超晶格结构为主的低维材料体系. III 族氮化物兼具宽直接带隙与优异的光学、电学特性以及良好的物理化学稳定性, 因此适用于光电器件和高压、高温及大功率器件的开发. 超晶格则通过在纳米尺度上交替生长不同半导体材料, 利用显著的量子限制效应, 实现对材料电子结构的调控, 进而催生了

“能带工程”等新兴研究方向. 随着研究的不断深入, III 族氮化物和超晶格在多个应用方向上展现出广阔的前景. 例如, AlN 材料由于具有高声速和高压电系数, 被广泛用于微机电系统 (MEMS) 中的谐振器与滤波器组件^[1-4]; GaN 则凭借其宽带隙和高电子饱和速度, 成为高频、高功率电子器件的理想候选材料^[5,6]. 此外, AlN/GaN 超晶格因在导带和价带分别存在 1.97 eV 和 0.8 eV 的较大带隙^[7], 表现出优异的电学和光学性能, 引起学界广泛关注. 目前, 基于该超晶格子带间跃迁机制所研制的近红外波段 (1.30—1.55 μm) 超高速光电器件, 已成为面向光纤通信应用的重要研究方向^[8-13]. 需要

* 国家重点研发计划 (批准号: 2023YFB3610400)、国家自然科学基金 (批准号: U21A20495, 12234018, 62121005, 61827813, 12574085)、吉林省科技发展计划 (批准号: SKL202602020JC) 和中国科学院稳定支持青年团队 (批准号: YSBR-056) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: zanghang@ciomp.ac.cn

‡ 通信作者. E-mail: shizm@ciomp.ac.cn

指出的是, 器件在实际运行中产生的热量会严重影响其工作寿命和可靠性; 尤其对于半导体超晶格结构, 目前在微电子学、光电子等多个领域都有应用, 但是不同的应用场景对超晶格热传导性能的要求各异, 如热电器件需要低热导率维持温度梯度, 而发光二极管需要高热导率来进行热管理. 因此, 系统研究该类材料体系中的热输运行为, 并进一步探讨应变和结构对热导率等关键参数的影响, 对优化器件热管理具有重要意义.

在深入研究此类材料的热输运机理时, 计算方法的选择面临显著挑战, 常用的计算方法包括第一性原理计算和基于传统经验势函数的分子动力学模拟, 但这两种方法都有一定的不足. 第一性原理方法虽然精度高, 但其巨大的计算成本严重限制了所能模拟的体系尺寸和时间尺度, 难以对超晶格等复杂结构进行全面的声子态和散射过程分析; 基于传统经验势函数的分子动力学计算高效, 但精度不足. 而机器学习力场 (MLFF) 可以很好地解决这一矛盾, 其巧妙地结合了二者的优势: 既能实现第一性原理的计算精度, 又具备接近经验势函数的计算效率, 为高通量筛选应变条件及大规模声子输运模拟提供了新的途径. 近年来, MLFF 的研究进展引起了广泛重视, 其常用建模方法涵盖高斯过程回归^[14]、线性回归^[15,16]、人工神经网络^[17]以及核岭回归^[18,19]等多种算法. 目前, MLFF 已在众多材料体系的热学性质模拟中取得显著成效, 例如, 在非晶硅^[20]和含空位晶体硅^[21]的研究中, 采用高斯近似势 (GAP) 拟合力场, 结合平衡分子动力学 (EMD) 和玻尔兹曼输运方程 (BTE) 计算热导率, 结果与实验值高度符合, 力场精度相比传统经验势提升 1 个数量级; 针对单层 $\text{MoS}_2(1-x)\text{Se}_{2x}$ 合金^[22], 使用谱邻域分析势 (SNAP) 描述原子间相互作用, 通过 EMD 模拟预测其热导率在合金成分变化时下降达一个数量级, 并识别出质量无序与力场无序的共同作用; 在纤锌矿 BAs ^[23]和 $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$ ^[24]的研究中, 分别采用矩张量势 (MTP) 和 GAP, 结合考虑四声子散射的 BTE 方法, 准确预测其高热导率 (如 $w\text{-BAs}$ 为 $1036 \text{ W}/(\text{m}\cdot\text{K})$), 计算结果与第一性原理及实验高度一致; LiF 晶体、 FLiBe 熔盐^[25]的研究采用 DeepPotential-SmoothEdition 机器学习势函数和 Green-Kubo 方法计算热导率, 力场拟合精度达能量误差 $10^{-5} \text{ eV}/\text{atom}$ 、力误差 $10\text{--}20 \text{ meV}/\text{\AA}$, 热导率预测与实验趋势一致但数值存在偏差; 而六

方氮化硼单层^[26]的研究中采用高斯近似势能拟合力场, 基于玻尔兹曼输运方程结合弛豫时间近似计算热导率, 在 300 K 以上温区与第一性原理基准结果误差小于 1.2% , 仅需 30% 训练数据即可实现高精度预测. 从非晶硅、二维材料到复杂氧化物, 上述研究表明 MLFF 在保持 DFT 精度的同时可将计算成本降低数个数量级. 然而, 这些研究多集中于单一均匀体系或简单界面, 对于 AlN/GaN 超晶格这类具有周期性异质界面和强声子非谐性的复杂结构, 界面散射与晶格非谐性的协同效应使力场开发面临独特挑战, 迄今缺乏系统性热输运研究.

本文基于 DFT 计算构建了高质量、多样化的数据集, 并以此训练出适用于 AlN , GaN 及 AlN/GaN 超晶格多种体系的机器学习力场. 通过均方根误差 (RMSE) 与声子谱等多角度验证了力场的准确性, 同时, 通过对比 DFT 与 MLFF 计算时间, 发现使用 MLFF 可将计算时间缩短 $3\text{--}4$ 个数量级, 充分展现了所构建力场在保持精度的同时具备显著的计算效率优势. 在此基础上, 系统研究了应变对材料热导率的影响, 结合群速度、声子寿命及散射率等参数深入揭示了其微观调控机制, 并进一步探讨了热导率随超晶格层数变化的规律.

2 计算方法和模型

本研究采用基于神经网络架构的机器学习力场 (MLFF) 的方法. 计算工作通过 PWMLFF (PWmat machine learning force field) 软件包中的 DP 模型 (deep potential model) 完成^[27,28], 该开源软件提供完备的工具与数据管理方案, 可用于构建与从头算分子动力学 (AIMD) 精度相当的机器学习力场. 其中神经网络的线性变换和非线性激活函数如下:

$$\tilde{d}_k = \sum_l w_{kl} d_l^{\text{in}} + b_k, \quad (1)$$

$$d_k^{\text{out}} = \varphi(\tilde{d}_k), \quad (2)$$

其中 d_l^{in} 表示输入数据, w_{kl} 表示权重, b_k 表示偏置, \tilde{d}_k 表示输出结果, d_k^{out} 是非线性激活函数, 通过处理线性变换的输出, 使神经网络能够学习并模拟实际复杂的非线性关系. 本文研究过程中, 能量和力对损失函数的权重分别为 1 和 2, 平滑函数 (用于使模型输出或梯度变化更平缓、避免突变的连续可导函数) 的最小和最大截断半径设置为 0.5 \AA 和 6 \AA ,

训练的轮数 (epochs) 为 30 轮, 在每个 epoch 中, 训练数据集 (原子间受力和能量) 分为多个小批量样本, 依次输入到神经网络, 进行前向传播、损失计算和参数更新的反向传播过程。

机器学习力场所需的数据集由 VASP 提供, VASP (Vienna *ab-initio* simulation package) 是基于密度泛函理论的第一性原理计算软件包, 其可靠性已经得到了大量研究的验证 [29-32]. 计算中采用投影缀加波 (projector augmented wave, PAW) 赝势 [33] 描述离子和电子的相互作用, 并用广义梯度近似 (generalized gradient approximation, GGA) 下的 PBE(Perdew-Burke-Ernzerhof) 模型 [34] 处理电子交换与关联能. 研究对象包括 AlN, GaN 和 AlN/GaN 超晶格结构, 模型如图 1 所示, 蓝色小球表示 Al 原子, 绿色小球表示 Ga 原子, 灰色小球表示 N 原子. 具体数据生成流程如下: 首先对各类结构进行充分弛豫, 获得稳定的基态构型; 随后在 300 K 至材料熔点的温度范围内选择 5 个温度, 每个温度下使用 VASP 进行从头算分子动力学模拟, 模拟时长为 10 ps, 时间步长为 1 fs, 以充分采样相空间. 从分子动力学轨迹中每隔 20 步 (即 20 fs) 采样一个构型进行自洽计算, 确保能量与原子受力的数据准确可靠. 最终将所有自洽计算输出的 OUTCAR 文件作为初始数据集, 数据集共包含 2500 个构型, 将数据集随机打乱后, 按 80% 与 20% 的比例分别划分为训练集与验证集, 用于训练基于神经网络的机器学习力场模型。

力场训练完后, 采用大尺度原子/分子大规模并行模拟器 (LAMMPS) [35,36] 进行分子动力学模拟, 并结合 TDEP (temperature dependent effec-

tive potential technique) [37-39] 计算声子谱、热导率等. 通过 TDEP 可以得到有限温度下拟合 Born-Oppenheimer 分子动力学势能面的最佳二阶哈密顿量, 该哈密顿量直接从计算模拟中采集的原子位置与受力数据中提取, 因此自然包含了热激发引起的显式非谐效应, 其可以准确地描述固体物质的强烈的非谐性, 有效势可以给出精确的声子色散关系和自由能. 有限温度下的哈密顿量如下:

$$H = U_0 + \sum_i \frac{mp_i^2}{2} + \frac{1}{2!} \sum_{ij\alpha\beta} \Phi_{ij}^{\alpha\beta} u_i^\alpha u_j^\beta + \frac{1}{3!} \sum_{ijk\alpha\beta\gamma} \Psi_{ijk}^{\alpha\beta\gamma} u_i^\alpha u_j^\beta u_k^\gamma, \quad (3)$$

式中 U_0 是势能, $\Phi_{ij}^{\alpha\beta}$ 和 $\Psi_{ijk}^{\alpha\beta\gamma}$ 分别是二阶和三阶力常数, α, β, γ 是笛卡尔系数. 得到准确的力常数后, TDEP 通过模耦合理论结合 Green-Kubo 公式来计算热导率 κ :

$$\kappa^{\alpha\beta} = \frac{1}{VK_B T^2} \int_0^\infty dt \langle J^\alpha(0) J^\beta(t) \rangle, \quad (4)$$

其中 $J = \sum_i \langle R_i \rangle \dot{E}_i(t)$ 表示热流算符, R_i 和 E_i 为原子的位置矢量和局域能量, $VK_B T^2$ 是归一化因子, 作用是将微观热流涨落的相关函数 (具有任意单位) 转换为宏观的、具有标准单位 (W/(m·K)) 的热导率张量, 使其成为一个与系统尺寸无关的本征材料性质。

前面提到的热导率 (4) 式, $\kappa^{\alpha\beta}$ 可以分解成对角热导率和非对角热导率, 表达式如下:

$$\kappa^d = \frac{1}{V} \sum_{qs} v_q^s \otimes v_q^s \frac{C_s(q)}{2\Gamma_s^M(q)}, \quad (5)$$

(5) 式表示每个声子模式对热导率的贡献:

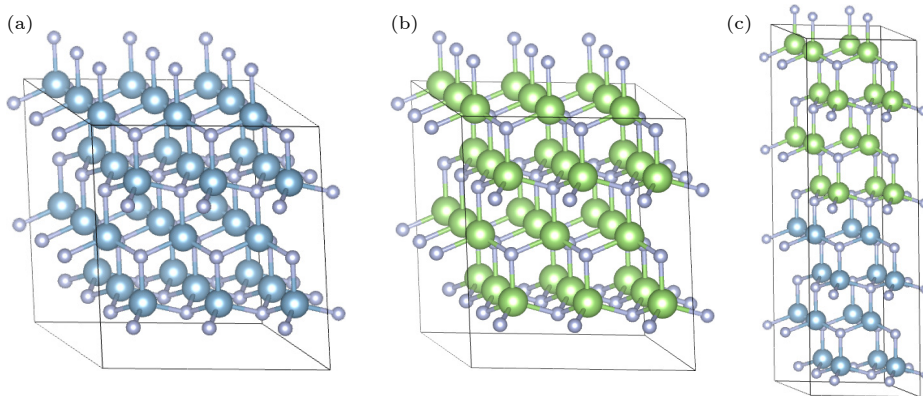


图 1 晶体结构示意图 (a) AlN, (b) GaN, (c) AlN₄/GaN₄ 超晶格

Fig. 1. Crystal structure schematic diagrams: (a) AlN, (b) GaN, (c) AlN₄/GaN₄ superlattices.

$$\kappa^{\text{nd}} \approx \frac{1}{V} \sum_q \sum_{s_1 \neq s_2} v_q^{s_1 s_2} \otimes v_q^{s_1 s_2} \frac{C_q^{s_1} + C_q^{s_2}}{2} \Gamma_{s_1 s_2}^M(q), \quad (6)$$

表示声子模式耦合对热导率的贡献. 其中 s 表示声子索引, q 表示声子的波矢, M 表示原子质量, \otimes 表示张量积, V 表示体积, v_q^s 表示群速度, $C_s(q)$ 表示热容, $\Gamma_s^M(q)$ 表示散射率 (声子寿命的倒数), 虽然热导率可以分为这两个部分, 但是所包含的物理量是一样的, 晶格热导率主要取决于这几个参数. 声子的群速度和热容主要反映的是体系的谐波特性, 而声子寿命和散射率直接源于体系的非谐波特性. 具体来说, 声子群速度直接来源于声子色散关系, 而色散关系是由晶体的二阶力常数构建的动力学矩阵求本征值得到的. 因此, 群速度本质上反映的是材料的谐波特性, 即原子在小振幅近似下的弹性响应. 声子寿命则是声子在传播过程中因相互作用而失去相干性的时间尺度, 寿命的主要决定因素是声子-声子三体相互作用 (即三阶非谐波常数), 这些非谐过程导致能量和动量的守恒散射, 使声子在有限时间内衰减.

3 结果与讨论

3.1 力场验证

MLFF 预测和 DFT 计算之间的一致性可以

用来验证模型的准确性, 验证过程中使用的验证集能量与力是由 DFT 计算得到的, 当机器学习力场的预测值与验证集数据越接近, 则代表所训练的机器学习力场越接近于第一性原理计算的精度. 图 2 显示了 MLFF 对能量和力的预测, 并与 DFT 计算的结果做了一个比较, 结果表明, 该力场能够有效再现系统的能量和原子间受力情况. 在 DP 模型中, 通常认为能量和力的均方根误差 (RMSE) 分别在 10 meV/atom 和 0.1 eV/Å 以下即为可接受的结果^[28], 具体地, AlN 和 GaN 体系的能量与力预测均表现优异: AlN 能量的 RMSE 为 1.0 meV/atom, 力的 RMSE 为 0.061 eV/Å; GaN 能量的 RMSE 为 1.7 meV/atom, 力的 RMSE 为 0.089 eV/Å. AlN₄/GaN₄ 超晶格, 能量的 RMSE 为 2.5 meV/atom, 仍处于较低水平, 力的 RMSE 为 0.139 eV/Å, 虽略高于常见的 0.1 eV/Å 阈值, 但考虑到超晶格体系的复杂性, 该精度仍可接受. 总体来看, 本工作的 MLFF 模型在能量预测上显著优于常规标准, 在力预测方面也表现良好.

随后, 采用 VASP 进行多个温度的从头算分子动力学模拟, 并利用 LAMMPS 开展经典分子动力学模拟. 通过 TDEP 方法对模拟结果进行处理, 提取了二阶及三阶力常数, 用于后续声子谱与热导率的计算.

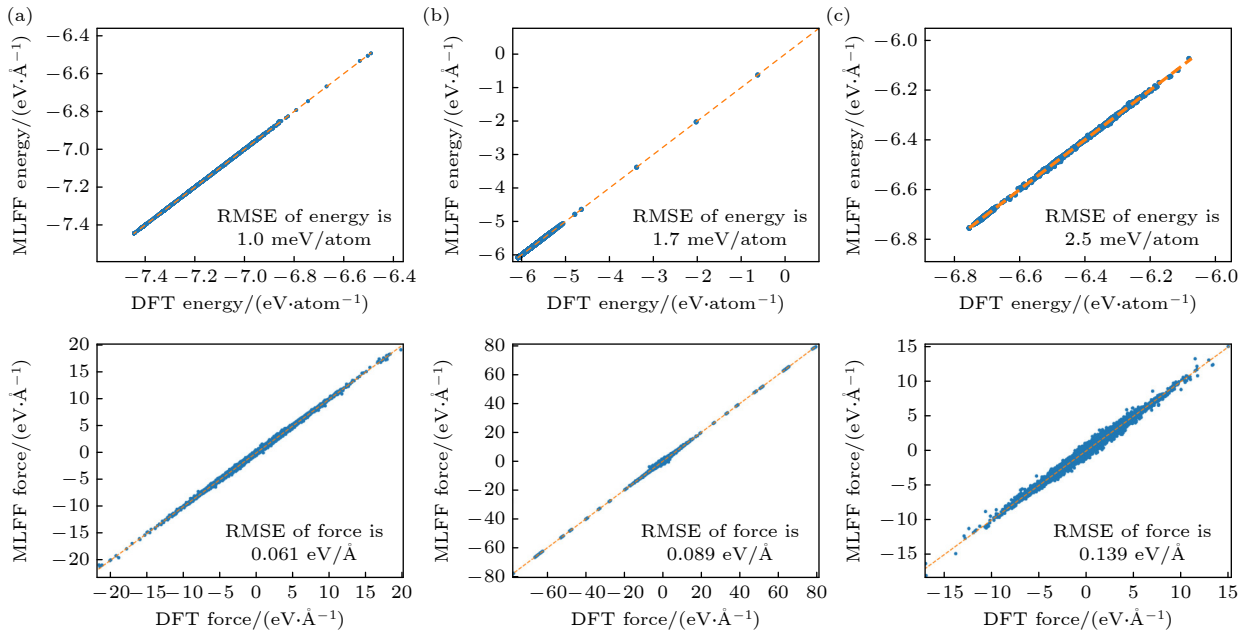


图 2 MLFF 预测的能量和力与 DFT 计算值比较 (a) AlN, (b) GaN, (c) AlN₄/GaN₄ 超晶格

Fig. 2. Comparison of the energy and force predicted by MLFF with the calculated values of DFT: (a) AlN, (b) GaN, (c) AlN₄/GaN₄ superlattices.

首先分析了不同结构对应室温的声子谱,如图3所示, MLFF 预测的趋势和 DFT 结果完全符合,可以很好地描述声子色散关系,进一步验证了力场的准确性. 从这3种结构的声子色散可以看出,高频光学分支的色散曲线是比较平坦的,根据群速度和色散曲线的关系 $v_g = d\omega/dq$ 可知,这直接导致其群速度很低,而声子对热运输的贡献强烈依赖于群速度,因此这些平坦的光学模式对总热导率的贡献通常很小. 声子谱中包含二阶力常数的信息,这也是后续研究热导率的基础.

为定量评估 MLFF 在计算效率方面的优势,我们对比了 DFT 与 MLFF 在不同体系中进行 10 ps 分子动力学模拟的计算时间,结果如表1所示. MLFF 将模拟时间缩短了 3—4 个数量级,显著提升了计算效率,为系统研究多种应变状态及不同层数结构的热运输性质提供了可行途径.

3.2 热导率计算分析

图4所示为我们计算的热导率随温度变化的

情况,室温下 AlN, GaN 和 AlN₄/GaN₄ 超晶格的热导率分别为 273.09, 210.76 和 71.93 W/(m·K). 随着温度的升高,所有体系的热导率均呈现单调下降趋势,该变化规律与第一性原理计算结果一致. 值得注意的是,超晶格的热导率显著低于其任一组成材料 (AlN 或 GaN) 的对应值,表明超晶格结构本身对声子运输具有强烈的抑制作用,这主要归因于超晶格结构中引入的异质界面,这些界面会通过散射作用,极大地阻碍声子的定向运输.

经过多个角度验证,本研究所构建的机器学习力场已具备较高精度. 在此基础上,我们将进一步利用该力场探究宽禁带氮化物中应力与微观结构对热导率的协同调控机制. 首先,在实际应用中,AlN 和 GaN 中不可避免地会存在应变,特别是在结合成 AlN/GaN 超晶格时,由于材料中的晶格和热膨胀不匹配,残存的应变和晶格缺陷更加显著;另外,面内应力比面间应力更常见,单轴应变也几乎不会影响导热性^[40,41]. 因此本工作只研究双轴应变效应.

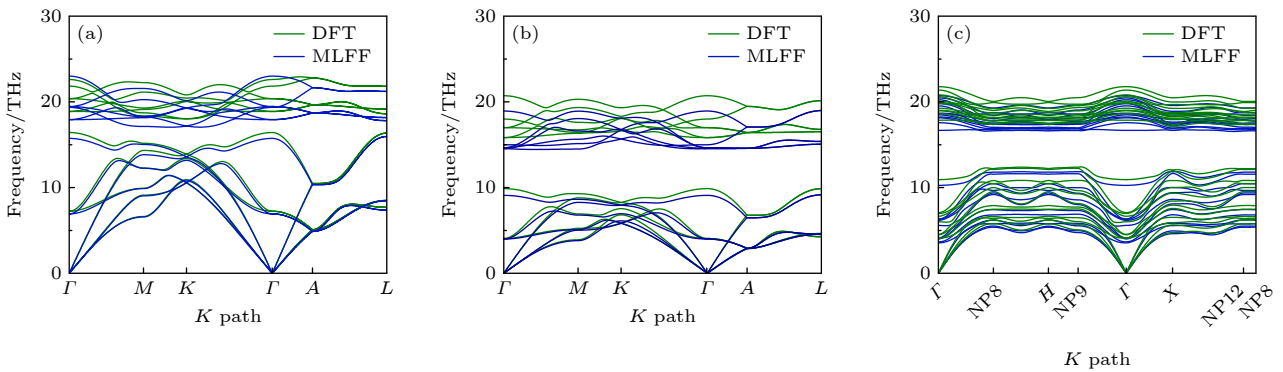


图3 MLFF 预测的声子谱与 DFT 计算值比较 (a) AlN, (b) GaN, (c) AlN₄/GaN₄ 超晶格

Fig. 3. Comparison of phonon spectra predicted by MLFF with DFT calculated values: (a) AlN, (b) GaN, (c) AlN₄/GaN₄ superlattices.

表1 不同应力的结构计算时间对比

Table 1. Comparison of structural calculation times under different stresses.

施加不同应力的结构	原子数	K点密度	计算时间/s	
			DFT	MLFF
AlN(Free state)			104138.3	64
AlN(-5% strain state)	72	4×4×3	195027.0	121
AlN(+5% strain state)			209727.8	117
GaN(Free state)			256882.3	72
GaN(-5% strain state)	72	4×4×3	761197.0	120
GaN(+5% strain state)			815716.4	116
AlN ₄ /GaN ₄ (Free state)			159420.9	158
AlN ₄ /GaN ₄ (-5% strain state)	64	9×9×1	285584.7	162
AlN ₄ /GaN ₄ (+5% strain state)			386639.7	163

通过修改结构的晶格常数来施加应变, 应变大小在-5%和+5%, 然后固定晶格常数 a 和 b 并允许 c 轴及所有原子位置充分弛豫, 得到每个应变状态下能量最低且仍保持 $P6_3/mmc$ 对称性. 计算结果如图 5 所示, 可以看出在不同的应变下, 热导率随温度变化的趋势是类似的, AlN, GaN 和 AlN₄/GaN₄ 超晶格的热导率在压缩应变下分别提升了 11.3%, 20.5% 和 15.3%, 而在拉伸应变下热导率下降了 21.1%, 50% 和 36.7%.

为揭示这一应变调控规律的微观机制, 进一步分析了声子群速度、寿命及散射率的变化. 如图 6 所示, AlN, GaN 与 AlN₄/GaN₄ 超晶格的声子群速度均表现出随应变从+5%(拉伸)向-5%(压缩)变化而逐渐增大的趋势. 声子群速度的提高有助于增强声子的运输能力, 这与图 5 中观察到的热导率随-5%压缩应变增大的行为相一致. 与此同时, 声子寿命(图 7)与声子散射率(图 8)从不同角度共同揭示了非谐性在应变调控中的关键作用. 在压缩应变下, 声子寿命显著延长, 而散射率则相应降低, 表明晶格的非谐相互作用减弱, 声子-声子散射

被抑制, 从而有利于热导率的提升. 相反, 在拉伸应变下, 声子寿命缩短与散射率升高则指向非谐性的增强, 加剧了声子散射, 进而导致热导率下降. 图 7 和图 8 所呈现的互补变化关系, 从声子动力学的角度共同证实: 应变通过调控晶格非谐性, 改变声子散射过程, 最终实现对材料热导率的有效调制.

从图 6—图 8 可以进一步分析不同结构热导率差异的微观机理. 首先, 从声子群速度来看, AlN 的群速度显著高于 GaN, 这直接解释了为何 AlN 的热导率优于 GaN. 然而, 对于热导率更低的超晶格, 其平均声子群速度虽略低于 AlN 单体, 但与 GaN 相比并未出现明显的差异. 这一关键现象表明, 群速度的差异并非导致超晶格热导率远低于两种组元材料的主要原因. 因此, 问题的核心矛盾不在于声子运输的“快慢”, 而应聚焦于其他强烈影响声子寿命的散射机制.

声子寿命与散射率的分析为理解热导率降低提供了关键证据. 本文计算清晰地显示, 超晶格中的声子寿命系统地、显著地短于 AlN 和 GaN, 相差约 1 个数量级; 与之直接对应的是, 其声子散射

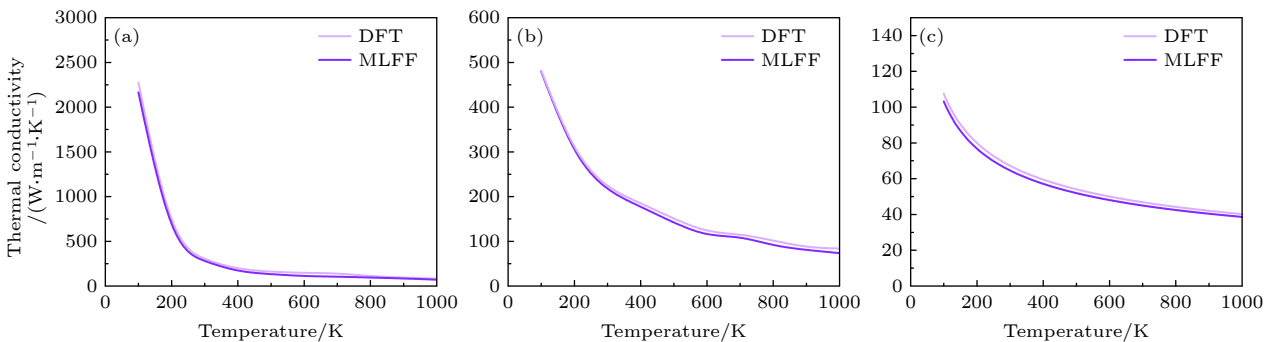


图 4 MLFF 预测的热导率与 DFT 计算值比较 (a) AlN, (b) GaN, (c) AlN₄/GaN₄ 超晶格

Fig. 4. Comparison of the thermal conductivity predicted by MLFF with the calculated value of DFT: (a) AlN, (b) GaN, (c) AlN₄/GaN₄ superlattice.

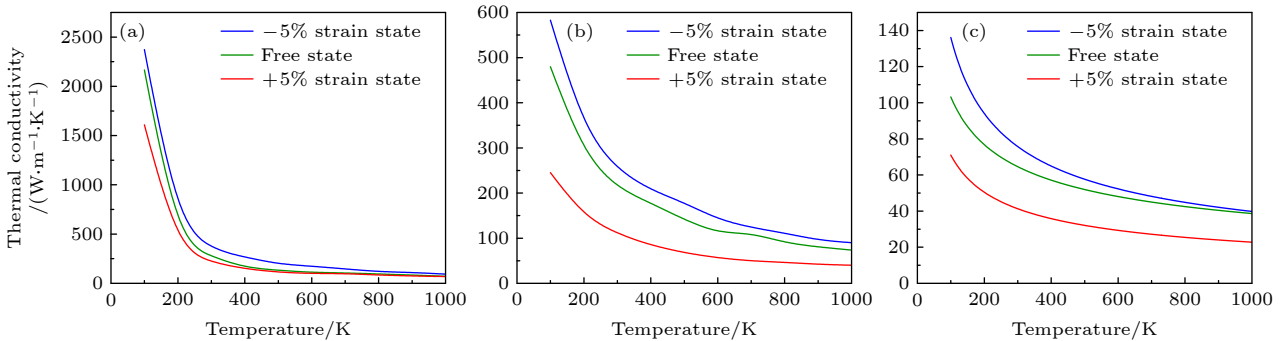


图 5 施加不同应力热导率的变化 (a) AlN, (b) GaN, (c) AlN₄/GaN₄ 超晶格

Fig. 5. The changes in thermal conductivity under different stresses: (a) AlN, (b) GaN, (c) AlN₄/GaN₄ superlattices.

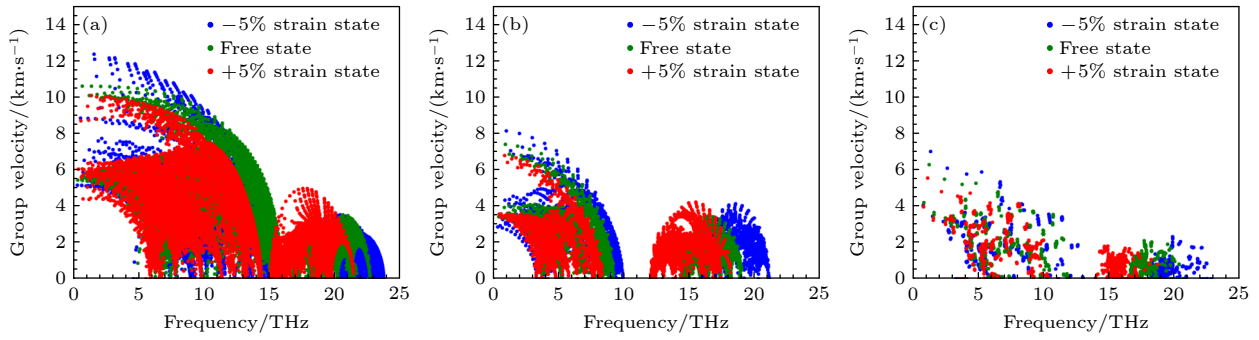


图 6 不同应变状态下的群速度 (a) AlN, (b) GaN, (c) AlN₄/GaN₄ 超晶格

Fig. 6. Group velocities under different strain states: (a) AlN, (b) GaN, (c) AlN₄/GaN₄ superlattices.

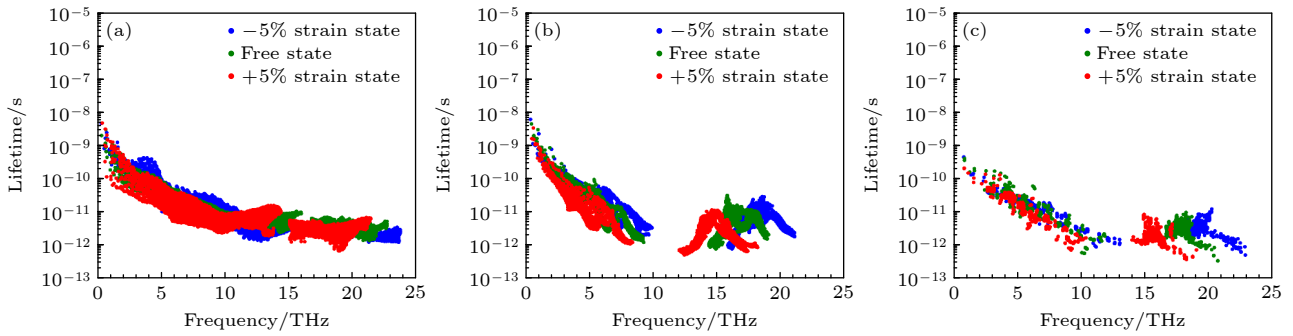


图 7 不同应变状态下的声子寿命 (a) AlN, (b) GaN, (c) AlN₄/GaN₄ 超晶格

Fig. 7. Phonon lifetimes under different strain states: (a) AlN, (b) GaN, (c) AlN₄/GaN₄ superlattices.

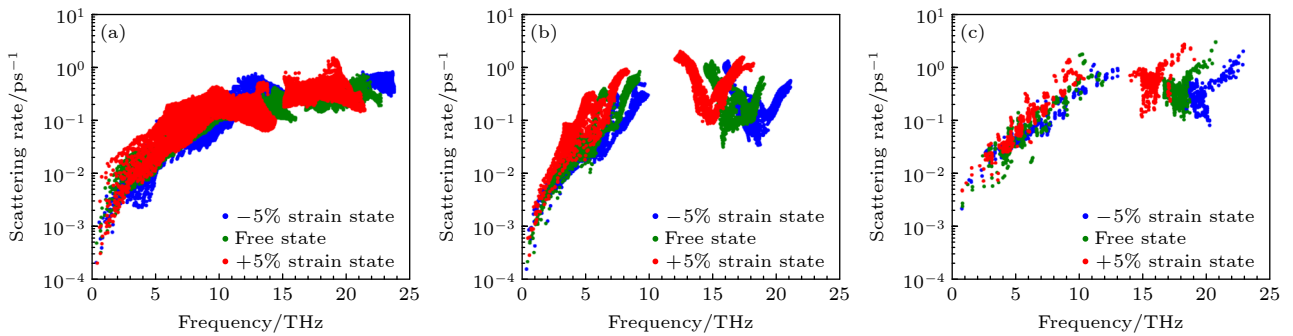


图 8 不同应变状态下的散射率 (a) AlN, (b) GaN, (c) AlN₄/GaN₄ 超晶格

Fig. 8. Scattering rates under different strain states: (a) AlN, (b) GaN, (c) AlN₄/GaN₄ superlattices.

率在整个频率范围内均大幅提升. 这一现象直接表明, 在超晶格结构中, 声子在传输过程中遭遇更频繁、更强烈的散射事件, 从而导致寿命缩短、散射率提升, 进而抑制了声子热输运. 这种散射的增强主要源于超晶格周期异质结构引入的强烈本征散射. 尽管在我们的模型中界面是完美的, 但 AlN 和 GaN 层之间固有的原子质量、键强等物理差异, 在纳米尺度周期性叠加后, 改变了体系的声子模式及其相互作用. 这种内在的结构扰动, 极大地增大了三声子散射过程的相空间, 使得满足能量与动量守恒的散射通道远多于单一的体材料, 从而表现为

散射率的全局性提升. 最终, 这些被显著增强的散射过程极大地缩短了声子寿命, 严重阻碍了声子的有效传播, 从而直接导致了超晶格热导率远低于其组元材料的宏观现象.

在探究应变效应的基础上, 我们进一步研究层数结构对热导率的调控规律. 在 AlN/GaN 超晶格中, 依据常规的电子能带划分, GaN 层被视为量子阱. 图 9 是室温下 AlN/GaN 超晶格不同层数的热导率情况, 可以看出热导率随量子阱 (GaN 层) 变短而增大, 即 $\text{AlN}_2/\text{GaN}_6 < \text{AlN}_3/\text{GaN}_5 < \text{AlN}_4/\text{GaN}_4 < \text{AlN}_5/\text{GaN}_3 < \text{AlN}_6/\text{GaN}_2$. 这一趋势源于组

分效应与界面效应的协同作用: AlN 本征热导率高于 GaN, 其占比增大直接提升整体热导率; 同时, AlN 层增厚使声子在高导热层内平均自由程延长, 单位长度界面散射次数减少, 界面热阻贡献降低。

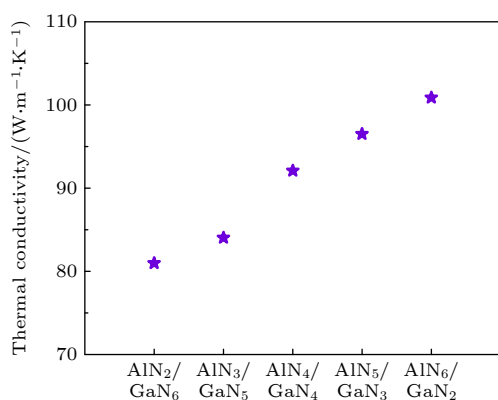


图 9 不同层数 AlN/GaN 超晶格的热导率

Fig. 9. Thermal conductivities of AlN/GaN superlattices with different number of layers.

研究表明, 在总层数固定的 AlN/GaN 超晶格中, 热导率随 AlN 势垒层增厚而显著提升. 据此, 我们提出“厚势垒、窄量子阱”的设计原则: 通过增大高导热 AlN 层厚度以提升声子平均自由程, 同时减薄 GaN 量子阱厚度, 从而有效抑制界面声子散射这一主导热阻机制. 该原则为定向优化超晶格结构的热管理能力提供了明确的实验指导。

4 结 论

本文搭建了 AlN, GaN 和 AlN/GaN 超晶格 3 种结构, 训练出适用于不同体系的机器学习力场, 并通过 RMSE、声子谱和热导率验证力场的准确性, 紧接着探究了施加不同应变下热导率的变化加以分析, 从群速度、声子寿命和散射率的分析可以很好地解释这一现象, 进一步分析表明, 超晶格热导率低于 AlN 和 GaN 的主要原因在于本征散射的显著增强导致声子寿命大幅降低. 尽管声子群速度有一定程度的降低, 但其是相对次要的因素. 本研究从微观上证实, 超晶格结构本身即是一个高效的“声子散射器”, 通过强化内部的本征散射机制, 能有效抑制声子输运, 获得低于其所有组元体材料的极低热导率. 这一结论为通过超晶格工程调控热输运性质提供了关键依据. 另外, 我们还探究了不同层数对超晶格热导率的影响, 并得出热导率随着量子阱变短而增加的结论. 为高性能氮化物器件的

热管理设计提供了核心指导原则, 即采用“厚势垒、窄量子阱”的超晶格结构, 为缓解高功率电子器件的自热效应、提升其工作寿命与可靠性提供了新的材料工程思路。

数据可用性声明

支撑本研究成果的数据集可在科学数据银行 <https://doi.org/10.57760/sciencedb.j00213.00212> 中访问获取。

参考文献

- [1] Zhu Y, Wang N, Sun C L, Merugu S, Singh N, Gu Y D 2016 *IEEE Electron. Device Lett.* **37** 1344
- [2] Kaletta U C, Santos P V, Wolansky D, Scheit A, Fraschke M, Wipf C, Zaumseil P, Wenger C 2013 *Semicond. Sci. Technol.* **28** 065013
- [3] Cassella C, Piazza G 2015 *IEEE Electron. Device Lett.* **36** 1192
- [4] Yang K, Lin F H, Wu Z Y, Fu D Y, Wu L, Zuo C J 2022 *Proceedings of the IEEE International Conference on Microwave Acoustics and Mechanics* Munich, Germany, July 18–20, 2022 p106
- [5] Takahashi K, Yoshikawa A, Sandhu A 2007 *Wide Bandgap Semiconductors* (Berlin: Springer-Verlag) p239
- [6] Millán J, Godignon P, Perpiñà X, Pérez-Tomás A, Rebollo J 2013 *IEEE Trans. Power Electron.* **29** 2155
- [7] Quay R 2008 *Gallium Nitride Electronics* (Berlin: Springer) p3
- [8] Kishino K, Kikuchi A, Kanazawa H, Tachibana T 2002 *Appl. Phys. Lett.* **81** 1234
- [9] Tcherynycheva M, Nevou L, Doyennette L, Julien F H, Warde E, Guillot F, Monroy E, Bellet-Amalric E, Remmele T, Albrecht M 2006 *Phys. Rev. B* **73** 125347
- [10] Hofstetter D, Baumann E, Giorgetta F R, Graf M, Maier M, Guillot F, Bellet-Amalric E, Monroy E 2006 *Appl. Phys. Lett.* **88** 121112
- [11] Nicolay S, Feltin E, Carlin J F, Grandjean N, Nevou L, Julien F H, Schmidbauer M, Remmele T, Albrecht M 2007 *Appl. Phys. Lett.* **91** 061927
- [12] Bayram C, Péré-Laperne N, McClintock R, Fain B, Razeghi M 2009 *Appl. Phys. Lett.* **94** 121902
- [13] Cen L B, Shen B, Qin Z X, Zhang G Y 2009 *Chin. Phys. B* **18** 3905
- [14] Bartók A P, Payne M C, Kondor R, Csányi G 2010 *Phys. Rev. Lett.* **104** 136403
- [15] Shapeev A V 2016 *Multiscale Model. Simul.* **14** 1153
- [16] Thompson A P, Swiler L P, Trott C R, Foiles S M, Tucker G J 2015 *J. Comput. Phys.* **285** 316
- [17] Behler J, Parrinello M 2007 *Phys. Rev. Lett.* **98** 146401
- [18] Botu V, Ramprasad R 2015 *Phys. Rev. B* **92** 094306
- [19] Huan T D, Batra R, Chapman J, Krishnan S, Chen L, Ramprasad R 2017 *npj Comput. Mater.* **3** 37
- [20] Qian X, Peng S, Li X, Wei Y, Yang R 2019 *Mater. Today Phys.* **10** 100140
- [21] Babaei H, Guo R, Hashemi A, Lee S 2019 *Phys. Rev. Mater.* **3** 074603

- [22] Gu X K, Zhao C Y 2019 *Comput. Mater. Sci.* **165** 74
- [23] Liu Z C, Yang X L, Zhang B, Li W 2021 *ACS Appl. Mater. Interfaces* **13** 53409
- [24] Liu Y B, Yang J Y, Xin G M, Liu L H, Csányi G, Cao B Y 2020 *J. Chem. Phys.* **153** 144501
- [25] Rodriguez A, Lam S, Hu M 2021 *ACS Appl. Mater. Interfaces* **13** 55367
- [26] Zhang Y X, Shen C, Long T, Zhang H B 2020 *J. Phys. Condens. Matter* **33** 105903
- [27] Wang H, Zhang L F, Han J Q, E W 2018 *Comput. Phys. Commun.* **228** 178
- [28] Wen T Q, Zhang L F, Wang H, E W, Srolovitz D J 2022 *Mater. Futures* **1** 022601
- [29] Meng X Q, Fang Y Z, Wu F M 2012 *Chin. Phys. Lett.* **29** 016801
- [30] Niu X L, Deng Y F, Li X 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** 7317 (in Chinese) [牛雪莲, 邓玉福, 李雪 2009 物理学报 **58** 7317]
- [31] Zhou T G, Liu Z Q, Zuo X 2012 *Chin. Phys. Lett.* **29** 047503
- [32] Ji Z H, Zeng X H, Cen J P, Tan M Q 2010 *Acta Phys. Sin.* **59** 1219 (in Chinese) [季正华, 曾祥华, 岑洁萍, 谭明秋 2010 物理学报 **59** 1219]
- [33] Kresse G, Joubert D 1999 *Phys. Rev. B* **59** 1758
- [34] Perdew J P, Burke K, Ernzerhof M 1996 *Phys. Rev. Lett.* **77** 3865
- [35] Plimpton S 1995 *J. Comput. Phys.* **117** 1
- [36] Lin C P, Rao Z H 2017 *Appl. Therm. Eng.* **110** 1411
- [37] Hellman O, Abrikosov I A, Simak S I 2011 *Phys. Rev. B* **84** 180301
- [38] Hellman O, Abrikosov I A 2013 *Phys. Rev. B* **88** 144301
- [39] Hellman O, Steneteg P, Abrikosov I A, Simak S I 2013 *Phys. Rev. B* **87** 104111
- [40] Tang D S, Qin G Z, Hu M, Cao B Y 2020 *J. Appl. Phys.* **127** 035102
- [41] Seijas-Bellido J A, Rurali R, Íñiguez J, Colombo L, Melis C 2019 *Phys. Rev. Mater.* **3** 065401

SPECIAL TOPIC—Semiconductor physics and devices

Strain and structural modulation of thermal conductivity in AlN/GaN superlattices via machine learning force fields*

HAN Peng¹⁾²⁾ ZANG Hang^{1)2)†} YU Yan¹⁾²⁾ ZHANG Feng¹⁾²⁾
 ZHOU Nuodan¹⁾²⁾ SHI Zhiming^{1)2)‡} SUN Xiaojuan¹⁾²⁾ LI Dabing¹⁾²⁾

1) (*National Key Laboratory of Special Luminescence Science and Technology, Changchun Institute of Optics, Fine Mechanics and Physics, Chinese Academy of Sciences, Changchun 130033, China*)

2) (*University of Chinese Academy of Sciences, Beijing 100049, China*)

(Received 29 November 2025; revised manuscript received 5 March 2026)

Abstract

This paper focuses on the wide bandgap nitride semiconductors AlN, GaN, and their AlN/GaN superlattice structures. A machine learning force field with the accuracy of density functional theory (DFT) is constructed and used to replace the time-consuming first-principles calculations. It efficiently and accurately simulates their thermal transport properties. The influence laws and microscopic mechanisms of strain control and layer structure on thermal conductivity are systematically studied. In the study, a high-quality dataset consisting of 2500 configurations was constructed based on multi-temperature *ab initio* molecular dynamics simulations. The force field was trained using a neural network architecture, and its reliability was verified through comparisons of root mean square error, phonon spectra, and thermal conductivity. The results show that the developed force field achieves DFT accuracy in energy, atomic forces, and phonon spectrum predictions, and the computational

* Project supported by the National Key R&D Program (Grant No. 2023YFB3610400), the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. U21A20495, 12234018, 62121005, 61827813, 12574085), the Jilin Province Science and Technology Development Plan, China (Grant No. SKL202602020JC), and the Stably Supported Youth Team Program of the Chinese Academy of Sciences (Grant No. YSBR-056).

† Corresponding author. E-mail: zanghang@ciomp.ac.cn

‡ Corresponding author. E-mail: shizm@ciomp.ac.cn

efficiency is increased by 3-4 orders of magnitude. In terms of the strain effect, through simulations of the thermal conductivity under $\pm 5\%$ biaxial strain, it is found that compressive strain significantly increases the thermal conductivity (AlN increases by 11.3%, GaN increases by 20.5%, and superlattice increases by 15.3%), while tensile strain leads to a decrease in thermal conductivity (decreasing by 21.1%, 50%, and 36.7%, respectively). Microscopic mechanism analysis indicates that the strain alters the phonon transport behavior by regulating the phonon group velocity, phonon lifetime, and scattering rate: compressive strain enhances the group velocity, prolongs the lifetime, and suppresses scattering; tensile strain, on the contrary, enhances non-harmonicity and intensifies phonon scattering. It is particularly important that the thermal conductivity of the AlN/GaN superlattice is much lower than that of its constituent materials (71.93 W/(m·K) at room temperature, approximately 26% of AlN and 34% of GaN). This is mainly attributed to the enhanced intrinsic scattering caused by the hetero-interface. Further studies have shown that in superlattices with a fixed total number of layers, the thermal conductivity significantly increases with the thickening of the AlN barrier layer. Based on this, the “thick barrier, narrow quantum well” structural design principle is proposed, providing a theoretical basis for regulating the thermal transport properties through superlattice engineering. This study has demonstrated the powerful capabilities of machine learning force fields in the research of thermal transport in complex heterogeneous interface systems, revealing the synergistic regulation mechanism of strain and structure on thermal conductivity, and providing key theoretical guidance and design paths for the thermal management optimization of high-power nitride devices.

Keywords: wide bandgap nitride semiconductors, machine learning force fields, thermodynamic properties, strain

DOI: [10.7498/aps.75.20251623](https://doi.org/10.7498/aps.75.20251623)

CSTR: [32037.14.aps.75.20251623](https://cstr.cn/32037.14.aps.75.20251623)

基于机器学习力场的AlN/GaN超晶格热导率应变与结构调控

韩鹏 臧行 于艳 张凤 周诺丹 石芝铭 孙晓娟 黎大兵

Strain and structural modulation of thermal conductivity in AlN/GaN superlattices via machine learning force fields

HAN Peng ZANG Hang YU Yan ZHANG Feng ZHOU Nuodan SHI Zhiming SUN Xiaojuan LI Dabing

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 75, 080710 (2026) DOI: 10.7498/aps.75.20251623

CSTR: 32037.14.aps.75.20251623

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.75.20251623>

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

钕铁硼永磁材料氢破过程的热力学性质

Thermodynamic properties of hydrogen decrepitation process in Nd₂Fe₁₄B permanent magnet materials

物理学报. 2025, 74(17): 177501 <https://doi.org/10.7498/aps.74.20250578>

氩-碳-硅等离子体热力学性质和输运系数计算

Calculation of thermodynamic properties and transport coefficients of Ar-C-Si plasma

物理学报. 2023, 72(12): 125202 <https://doi.org/10.7498/aps.72.20222390>

LLM-105的分子间相互作用和热力学性质

Intermolecular interactions and thermodynamic properties of LLM-105

物理学报. 2024, 73(4): 046501 <https://doi.org/10.7498/aps.73.20231696>

应变对单氢空位锗烷电子结构和输运性质的调控

Regulation of structural, electronic, and transport properties of single hydrogen vacancy germanane by strain

物理学报. 2025, 74(17): 176801 <https://doi.org/10.7498/aps.74.20250529>

双轴应变对单层Janus过渡金属硫族化合物热输运和热电性能的影响

Influence of biaxial strain effects on thermal transport and thermoelectric performance of Janus transition metal dichalcogenide monolayers

物理学报. 2025, 74(13): 137202 <https://doi.org/10.7498/aps.74.20250295>

机器学习模型预测稀土化合物的热力学稳定性

Machine learning model predicted thermodynamic stability of rare earth compounds

物理学报. 2025, 74(13): 130201 <https://doi.org/10.7498/aps.74.20250362>