

# $\beta$ -Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub>/金刚石异质键合界面强度的晶向匹配依赖性

朱亚琦 宋智功<sup>†</sup>

(江南大学机械工程学院, 江苏省食品先进制造装备技术重点实验室, 无锡 214122)

(2026年1月23日收到; 2026年2月24日收到修改稿)

$\beta$ -Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub>作为第四代半导体材料的代表,在功率器件中展现出巨大的应用潜力,然而 $\beta$ -Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub>具有极低的本征热导率,限制了其在高功率密度器件中的进一步应用.近年来,通过将 $\beta$ -Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub>与高热导率材料(如金刚石)进行异质键合以提升散热性能,已成为一种重要的技术方向.然而,其界面微观演变及界面键合强度对晶向的依赖关系尚不明确,制约了键合工艺的优化与器件可靠性的提升.为此,本研究通过构建具备第一性原理精度的百万原子级数据集并拟合矩张量势(moment tensor potential, MTP)势函数,系统地研究了界面键合强度的晶向依赖性.结果表明,所有弛豫后的键合界面均实现了原子级致密接触,且无明显缺陷.其中, $\beta$ -Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub>(010)/金刚石(100)组合表现出最优的力学性能.本研究从原子尺度揭示了界面键合强度的晶向匹配依赖性,对于优化晶圆键合工艺、提升高功率器件的机械稳定性与长期可靠性具有重要的理论指导意义.

**关键词:**  $\beta$ -Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub>/金刚石异质键合, 机器学习原子势函数, 分子动力学模拟, 矩张量势

**DOI:** 10.7498/aps.75.20260116

**CSTR:** 32037.14.aps.75.20260116

## 1 引言

$\beta$ -Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub>凭借4.6—4.9 eV的禁带宽度以及高达8 MV/cm的击穿电场,在下一代功率开关器件的设计中展现出了巨大的潜力<sup>[1-6]</sup>.且采用熔融生长技术可以实现高质量、大尺寸且低成本的 $\beta$ -Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub>衬底,进一步推动了其产业化进程<sup>[2,7]</sup>.然而, $\beta$ -Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub>极低的热导率(10—27 W/(m·K))导致的严重自发热效应,极大地制约了其器件的性能与可靠性,成为发展的主要瓶颈<sup>[8-11]</sup>.为突破这一散热限制,将 $\beta$ -Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub>与具有高热导率的材料进行异质集成,被认为是一种理想的热管理方案<sup>[12-17]</sup>.而金刚石凭借其超高的热导率(热导率>2000 W/(m·K))已被广泛研究用于AlGaN/GaN高电子迁移率晶体管(HEMT)等电子器件中消散局部自热<sup>[18,19]</sup>,对于 $\beta$ -Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub>器件来说,其也是一种有效的解决

方案. Matsumae等<sup>[20]</sup>通过等离子体活化直接键合技术实现了两者的物理连接.其实验结果表明,界面具有原子级的平整度且无明显的结构损伤,然而,关于界面微观演变、界面态分布及其晶向依赖性,仍缺乏在原子尺度上的深入机理解析,尤其是界面力学特性如何随晶向变化,尚未得到系统揭示,这成为优化键合工艺与提升器件热稳定性的关键问题.

通过模拟计算研究原子尺度的界面演变过程通常依赖量子力学计算.虽然传统的密度泛函理论(DFT)在精度上具有显著优势,但由于计算成本高昂,难以处理数百至数千个原子的复杂界面结构和长时标热力学过程<sup>[21,22]</sup>.与此不同,分子动力学(MD)模拟作为探索材料动态演变的核心工具,其优势在于能够跨越微观电子结构与宏观力学响应之间的尺度差距.通过数值积分原子运动方程,MD模拟不仅能够处理包含数万个原子的复杂界

<sup>†</sup> 通信作者. E-mail: song\_jnu@jiangnan.edu.cn

面体系,更重要的是,其可以引入温度和压力等热力学因素,真实地还原低温共价键合中的温度变化、界面形成及应力松弛过程<sup>[23]</sup>.这种对非平衡态动力学轨迹的实时捕捉,对于揭示界面缺陷的生成机制及演变过程至关重要.然而,传统的经验势函数(如 Tersoff 或 Meam)尽管具有较高的计算效率,但在描述  $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$  这种复杂的低对称性氧化物以及金刚石共价键断裂与重组的非平衡过程时,往往面临精度不足或鲁棒性差的问题<sup>[24,25]</sup>.

近年来,机器学习原子势函数(machine-learning interatomic potentials, MLIPs)的出现为这一难题提供了有效的解决方案.通过学习高精度的 DFT 数据集,MLIPs 能够以接近第一性原理的精度捕捉复杂的原子间相互作用,同时保持与经验势函数相媲美的计算效率<sup>[26,27]</sup>,已成为加速材料设计和评估其多种物理性质的强大工具.目前最广泛使用的 MLIPs 有 Gaussian 近似势(Gaussian approximation potential, GAP)、深度势(deep potential, DP)、原子团簇展开势(atomic cluster expansion potential, ACE)、矩张量势(moment tensor potential, MTP)和谱邻居分析势(spectral neighbor analysis potential, SNAP)<sup>[28-32]</sup>.这些主流的 MLIPs 主要依据其原子环境的数学描述方式(即描述符)进行区分.以 DP 为代表的神经网络模型,利用嵌入网络编码局部坐标,在多种复杂体系中表现优异<sup>[33,34]</sup>;基于核方法的 GAP 则结合 SOAP 描述符与高斯过程回归,展现了极高的拟合能力<sup>[35]</sup>.而采用线性基函数展开的方案,如 MTP, ACE 及 SNAP 提供了一种更具扩展性的替代路径.这类线性参数化模型成功规避了核方法的效率瓶颈,在计算速度与预测精度之间取得了更优的平衡.最近的相关研究表明, MTP 在保持高保真度的同时具有优越的效率,这使其成为本研究中模拟复杂氧化物界面的理想选择<sup>[36-38]</sup>.

本研究针对  $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$ /金刚石异质界面开发了一种高性能的 MTP 机器学习势函数,该势函数能够准确描述  $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$  与金刚石的力学特性以及界面处 C-O-Ga 复杂化学键的形成过程.基于此势函数,进一步开展了大规模分子动力学(MD)模拟,系统研究了键合过程中的界面重构、缺陷演化以及不同晶向的键合强度,为高性能氧化镓基功率器件的设计与优化提供了重要指导意义.

## 2 方法

### 2.1 矩张量势

本研究采用基于机器学习的 MTP 来描述原子间的相互作用. MTP 方法结合具有物理意义的描述符与灵活的参数拟合机制,并通过主动学习(active learning)策略有效扩展训练集,以覆盖构型空间中的未知区域.

MTP 属于局部原子势函数,其核心假设是将原子构型(configuration, cfg)的总能量  $E^{\text{mtp}}$  表示为系统中所有原子局部环境能量贡献的总和,如(1)式所示:

$$E^{\text{mtp}}(\text{cfg}) = \sum_{i=1}^N V(n_i), \quad (1)$$

其中,  $N$  为原子总数,  $V_{(n_i)}$  代表第  $i$  个原子的局部环境能量贡献,  $n_i$  包含了第  $i$  个原子在该环境中的原子类型及其邻近原子的相对位置信息.

为了描述局部原子环境, MTP 引入了矩张量(moment tensors)  $M_{\mu,\nu}$  作为描述符.这些描述符由径向部分和角向部分组成,如(2)式所示:

$$M_{\mu,\nu}(n_i) = \sum_j f_{\mu}(|r_{ij}|, z_i, z_j) \underbrace{r_{ij} \otimes \dots \otimes r_{ij}}_{\nu \text{ times}}, \quad (2)$$

其中,  $f_{\mu}$  是基于切比雪夫多项式等基函数展开的径向函数,用于描述原子间距离  $r_{ij}$  的影响,并受截断半径的限制;角向部分  $r_{ij} \times \dots \times r_{ij}$  是秩为  $\nu$  的张量,包含原子间的方向信息.

原子的局部能量  $V_{(n_i)}$  进一步展开为一组基函数  $B_{\alpha}$  的线性组合,如(3)式所示:

$$V(n_i) = \sum_{\alpha} \xi_{\alpha} B_{\alpha}(n_i), \quad (3)$$

其中基函数  $B_{\alpha}$  是通过时刻张量  $M_{\mu,\nu}$  进行张量收缩构建而成的标量,从而保证了势函数对原子系统的旋转、平移和置换操作具有不变性.

MTP 的训练过程旨在求解目标函数的最小值.目标函数((4)式)定义为预测值与 DFT 计算值在能量、力和应力张量上的加权均方误差之和:

$$\sum_{k=1}^K \left[ w_e (E_k^{\text{mtp}} - E_k^{\text{dft}})^2 + w_f \sum_i^N |f_{i,k}^{\text{mtp}} - f_{i,k}^{\text{dft}}|^2 + w_s \sum_{i,j=1}^3 |\sigma_{k,ij}^{\text{mtp}} - \sigma_{k,ij}^{\text{dft}}|^2 \right] \rightarrow \min, \quad (4)$$

其中,  $w_e$ ,  $w_f$  和  $w_s$  分别为能量、力和应力的权重因子, 在本工作中分别设置为 1, 0.01, 0.001.  $K$  是训练数据集中原子构型的总数,  $N$  是每个构型中的原子数. 对于第  $k$  个构型,  $E_k^{\text{mtp}}$  和  $E_k^{\text{dft}}$  表示能量,  $f_k^{\text{mtp}}$  和  $f_k^{\text{dft}}$  表示作用在第  $i$  个原子上的力,  $\sigma_k^{\text{mtp}}$  和  $\sigma_k^{\text{dft}}$  分别是由 MTP 和 DFT 计算得到的应力.

## 2.2 MTP 的训练流程

### 2.2.1 高精度初始数据集的构建

基于密度泛函理论构建了涵盖多组分、多相态的高精度初始数据集. 该数据集以 C, O, Ga 元素为基础, 系统地研究了纯组分 C(diamond, BCC, FCC, HCP), O(BCC, FCC, HCP) 及 Ga( $\alpha$ -phase,  $\beta$ -phase, Ga-II, Ga-III) 的多种同素异形体, 特别聚焦于  $\beta$ -Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub> 及其 C-O-Ga 异质结构的相互作用, 所有构型种类及数量见表 1.

表 1 初始数据集中各类构型的个数  
Table 1. Number of configurations in the initial dataset.

类型	晶体结构	原子数	初始数据集中的个数
C	Diamond	48	100
	fcc	4	100
	bcc	2	100
	hcp	4	100
	Surface	48	9
	Vacancy	1, 3, 47	400
O	fcc	4	100
	bcc	2	100
	hcp	4	100
Ga	$\alpha$ -phase	8	100
	$\beta$ -phase	4	100
	Ga-II	12	100
	Ga-III	2	100
	Surface	12	9
	Vacancy	1, 3, 7, 11	400
$\beta$ -Ga <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	$\alpha$ -phase	20	100
	Vacancy	19	100
	Surface	20	3
混合构型	fcc	4	100
	bcc	4	100
	hcp	4	100

为全面捕捉势能面的广泛特征, 对所有晶体结构进行了多维形变采样, 包括单轴、双轴及三轴的拉伸与压缩变形. 同时, 对关键构型引入空位缺陷

和不同表面构型, 以模拟局部配位环境的变化. 针对 C-O-Ga 界面层的非晶化特征, 利用 disorder package<sup>[39]</sup>, 结合 DFT 生成了具有代表性的异质结构. 本研究中所有第一性原理计算均使用 VASP 软件包<sup>[21]</sup>, 采用 GGA-PBE 交换相关泛函, 平面波截止能量设定为 550 eV, 确保能量与力的收敛精度满足研究级标准.

### 2.2.2 MTP 的初步拟合

利用 2.2.1 节构建的初始数据集, 在 MTP 框架下进行初代势函数的训练. 通过 MLIP 软件包<sup>[40]</sup>, 将 DFT 计算得到的总能量、原子受力和应力张量映射至 MTP 的基函数空间. 为了兼顾长程相互作用与计算效率, 根据 C, O, Ga 原子间截断距离, 将势函数的截断半径设置为 1.1—5.6 Å. 通过最小化目标函数, 获得初步具备描述多相体系能力的初代力场.

### 2.2.3 基于主动学习的 MD 训练集动态扩容

为进一步提升势函数在高温及复杂动力学过程中的鲁棒性, 采用主动学习策略扩充数据集. 基于初代 MTP 势函数, 扩充 diamond,  $\beta$ -Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub> 以及  $\beta$ -Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub>/金刚石异质键合构型的数据集, 在不同温度下对这些构型进行拉伸. 从低温到高温逐步生成新的构型, 并利用 VASP 进行筛选计算, 重新收集这些新构型的能量、力、应力等关键参数. 将收集到的新数据加入训练集, 用于拟合下一代势函数. 当数据集达到百万原子规模时, 开始验证势函数的刚度矩阵、空位形成能等能量与力相关参数. 当验证误差小于 5% 时, 即可终止势函数迭代, 并使用该代势函数进行后续计算. 势函数具体拟合流程如图 1 所示.

### 2.2.4 键合模型构建与界面演化表征

基于优化后的 MTP 势函数, 在 LAMMPS 环境下构建多层级键合模拟系统, 该系统包含金刚石层、不定形层以及  $\beta$ -Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub> 层. 每一层分别使用 2.2.3 节中的 MTP 势函数进行结构优化, 随后将各层按 3 Å 的间距放置于同一构型中, 并使用 MTP 势函数对整个构型进行动力学弛豫, 从而形成键合模型. 模拟参数设置如下: 环境温度 500 K, 优化时间为 50 ps. 本研究中所有的 MD 模拟均使用 LAMMPS 软件包进行<sup>[41]</sup>.

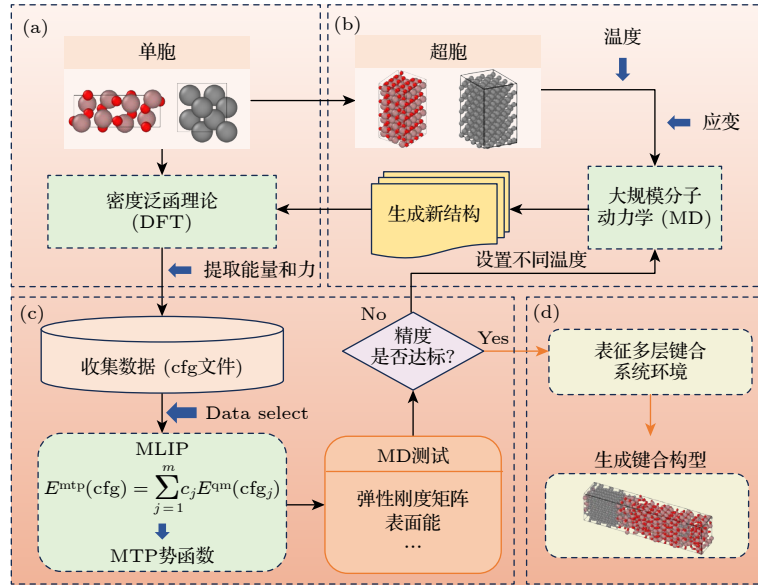


图1 MTP势函数训练流程图 (a) 第一性原理 (DFT) 计算部分; (b) 分子动力学 (MD) 计算部分; (c) 势函数训练部分; (d) 使用势函数表征键合模型部分

Fig. 1. Schematic illustration of the MTP training workflow: (a) DFT calculations; (b) MD simulations; (c) MTP training; (d) characterization of the bonding model.

## 3 结果与讨论

### 3.1 势函数验证

为验证所构建的 MTP 势函数在描述  $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$  与金刚石键合行为时的准确性, 对其晶体结构、力学特性和能量参数进行系统评估, 如表 2 所示. 计算结果表明, MTP 预测的晶格常数与 DFT 参考值的最大相对误差小于 0.5%, 表现出极高的几何描述精度. 此外, 通过对比两者的弹性刚度矩阵及单空位形成能 ( $E_{\text{vac}}$ ) 等关键性能指标, 进一步证实了该势函数在处理力学响应及点缺陷能量特性方面的高度可靠性. 综上所述, 该 MTP 势函数能够满足大规模异质键合模拟的精度要求.

### 3.2 键合模型的构建

本研究键合模型的构建基于金刚石与  $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$  的低温亲水键合工艺<sup>[20]</sup>. 该工艺核心在于利用表面活化键合 (SAB) 技术激发材料表面活性, 随后通过酸性溶液清洗以引入羟基官能团. 在 500 K 的环境温度下, 两界面通过脱水缩合反应形成稳固的 C-O-Ga 共价键, 如图 2(a) 所示. 实验观测表明, 界面处形成了一层厚度约为 1 nm 的过渡不定形层, 如图 2(b) 所示. 其元素组分比例近似为 C:O:Ga = 2.2:4.5:3<sup>[45]</sup>. 为平衡模拟计算的准确性与普适性, 本模型将不定形层中的组分比例设定

表 2 MTP 势函数各项参数验证

Table 2. Validation of MTP potential parameters.

	金刚石	实验值	DFT值	MTP值
$a/\text{\AA}$		3.57 <sup>[42]</sup>	3.573	3.572
$E/(\text{eV}\cdot\text{atom}^{-1})$			-9.093	-9.084
$E_{\text{vac}}/\text{eV}$			5.326	5.349
$C_{11}/\text{GPa}$		1079 <sup>[43]</sup>	1047	972
$C_{12}/\text{GPa}$		124	120	106
$C_{44}/\text{GPa}$		578	558	548
$\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$	实验值	DFT值	MTP值	
$a/\text{\AA}$	12.21 <sup>[44]</sup>	12.451	12.403	
$b/\text{\AA}$	3.03	3.111	3.124	
$c/\text{\AA}$	5.798	5.753	5.754	
$\beta/(\text{^\circ})$	103.83	104.12	104.18	
$E/(\text{eV}\cdot\text{atom}^{-1})$		-5.995	-5.991	
$E_{\text{vac}}/\text{eV}$		3.025	3.034	
$C_{11}/\text{GPa}$	223.1 <sup>[4]</sup>	222.0	212.2	
$C_{22}/\text{GPa}$	333.2	327.3	315.8	
$C_{33}/\text{GPa}$	333.0	333.6	312.2	
$C_{44}/\text{GPa}$	50.3	58.8	52.4	
$C_{55}/\text{GPa}$	68.6	78.3	65.9	
$C_{66}/\text{GPa}$	94.2	108.4	84.4	
$C_{12}/\text{GPa}$	116.5	125.2	100.4	
$C_{13}/\text{GPa}$	125.3	112.9	96.3	
$C_{15}/\text{GPa}$	-17.4	-1.7	-7.25	
$C_{23}/\text{GPa}$	75.0	79.9	70.6	
$C_{25}/\text{GPa}$	12.2	5.2	13.1	
$C_{35}/\text{GPa}$	7.3	7.0	6.3	
$C_{46}/\text{GPa}$	17.4	9.0	14.3	

为 C:O:Ga = 2.5:4.5:3, 以此还原真实实验中的界面结构特征。

本研究的异质键合模型由  $\beta$ -Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub>、金刚石及不定形界面层构建而成, 各组分物理模型如图 3(a)–(h) 所示. 为  $\beta$ -Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub> 选取了 (100), (010),

(001) 三个常见晶面作为键合面, 金刚石选取了常见单晶的 (100) 与 (111) 晶面进行匹配. 对于不定形层的构建, 本研究采用随机置换法: 在包含 20 个原子的  $\beta$ -Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub> 晶胞中, 随机选取 2 个 Ga 原子与 3 个 O 原子, 并将其替换为 C 原子, 以模拟界面

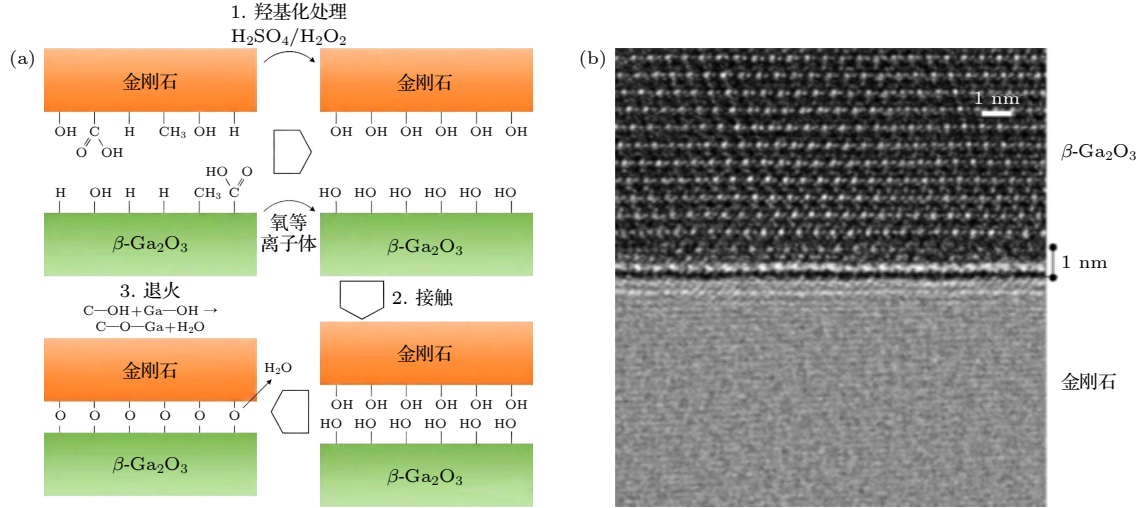


图 2 键合原理示意图与扫描电镜图 (a) 亲水性键合原理图, 其中退火温度为 500 K; (b) 键合界面电镜图片, 其中不定形层约为 1 nm

Fig. 2. Bonding mechanism and SEM characterization: (a) Hydrophilic bonding schematic at 500 K; (b) SEM image of the interface revealing a  $\sim 1$  nm amorphous layer.

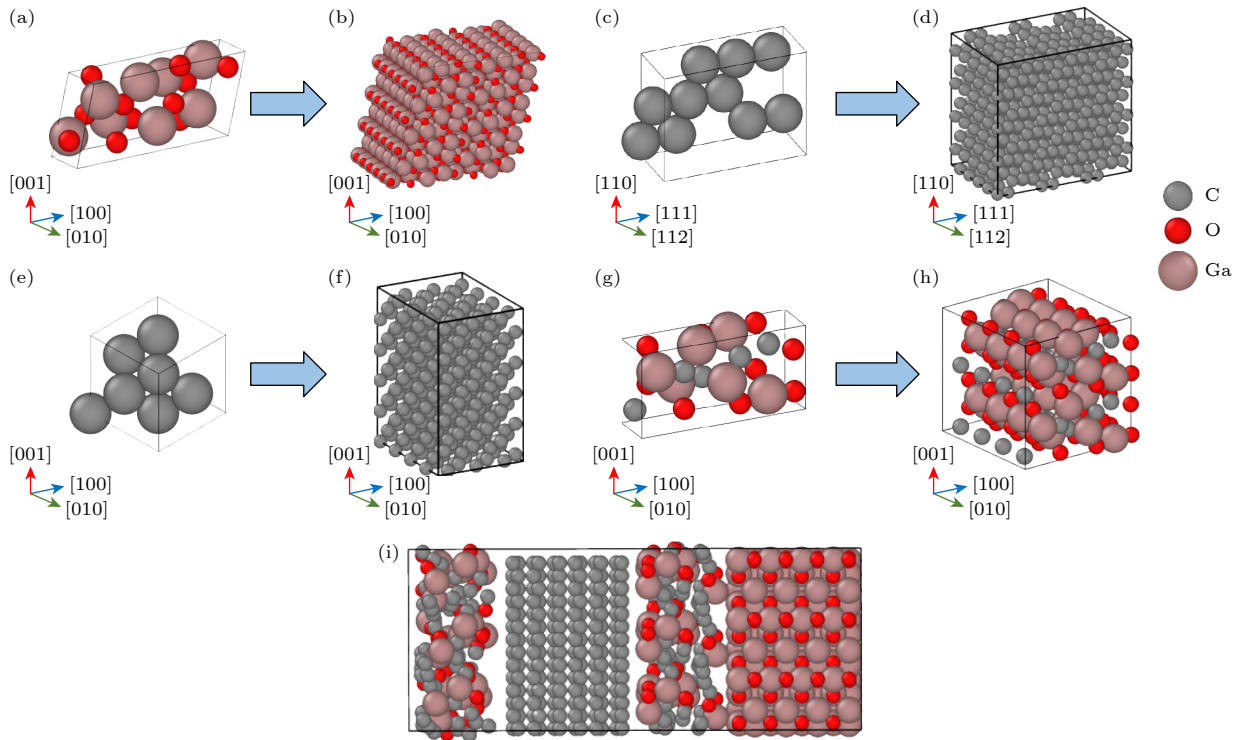


图 3 键合中各模块模型图 (a)  $\beta$ -Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub> 单胞; (b)  $\beta$ -Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub> 超胞; (c) 金刚石 (111) 单胞; (d) 金刚石 (111) 超胞; (e) 金刚石 (100) 单胞; (f) 金刚石 (100) 超胞; (g) 不定形层单胞; (h) 不定形层超胞; (i) 初始键合模型

Fig. 3. Atomistic models of the components used in the bonding simulation: (a)  $\beta$ -Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub> unit cell; (b)  $\beta$ -Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub> supercell; (c) diamond (111) unit cell; (d) diamond (111) supercell; (e) diamond (100) unit cell; (f) diamond (100) supercell; (g) amorphous layer unit cell; (h) amorphous layer supercell; (i) initial bonding model.

处复杂的元素混杂状态. 各层模型首先在500 K环境下利用 MTP 势函数进行独立的结构弛豫. 随后, 将弛豫后的各层按预设顺序组装成整体模型, 如图 3(i) 所示, 从左至右各层依次为不定形层、金刚石层、不定形层、 $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$  层. 在 500 K 温度下进行长时间尺度的 MD 模拟, 从而诱导不定形层界面自发重构, 形成最终的稳定键合模型.

### 3.3 键合界面分析

利用开发的 MTP 势函数, 对所有晶向组合的键合初始构型在 500 K 下进行 100 ps 的动力学弛豫, 且确保构型已经达到稳定状态. 弛豫后的平衡态界面形貌如图 4(a)–(f) 所示. 从图中可以发现, 所有异质键合模型在界面处均实现了原子级的紧密接触, 特别是不定形层内原子的自发重排, 有效消除了不同晶面的  $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$ /金刚石键合时的几何重叠与不合理空隙. 在整个界面层范围内, 未观测到明显的空洞、裂纹或分层缺陷, 这表明 C, O, Ga 原子在弛豫过程中通过有效的相互作用形成了连续的化学键合网络. 这种致密且无缺陷的界面特征不仅体现了该体系良好的界面相容性, 也为后续准确评估界面的热力学稳定性及力学响应提供了可靠的物理模型基础.

### 3.4 键合强度测量

将弛豫后的键合模型置于 300 K 室温环境下稳定 100 ps 后, 执行单轴拉伸模拟, 加载速率设定为 0.1%/ps. 通过对模拟断裂构型的分析发现, 所有体系的断裂位置均发生于不定形层内部 (如图 5(a), (b) 所示), 这一观测结果与实际中的键合界面断裂特征高度符合.

应力-应变曲线 (图 5(c)–(e)) 定量揭示了键合界面的力学各向异性:  $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3(010)$  与金刚石的键合构型, 其极限抗拉强度显著优于  $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3(100)$  和  $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3(001)$  晶面组合. 其中,  $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3(010)$  与金刚石 (100) 表现出最优的力学响应, 其最大拉伸强度接近 5 GPa, 对应失效应变约为 6%, 为所有模拟键合构型中的最高值. 此外,  $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3(100)$ /金刚石 (111) 与  $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3(001)$ /金刚石 (111) 亦展现出可观的结合强度, 峰值应力分别约为 2.7 GPa(应变 3.3%) 和 2.8 GPa(应变 4.9%).

综合评估界面拉伸强度与最大应变可知,  $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3(010)$ /金刚石 (100) 组合均表现出最优的力学响应 (5 GPa, 6%). 因此确定其为最优的晶面组合. 在该过程中, 通过 MD 弛豫, 使得键合界面处的不定形层重新排布, 消除了  $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$  与金刚石之间

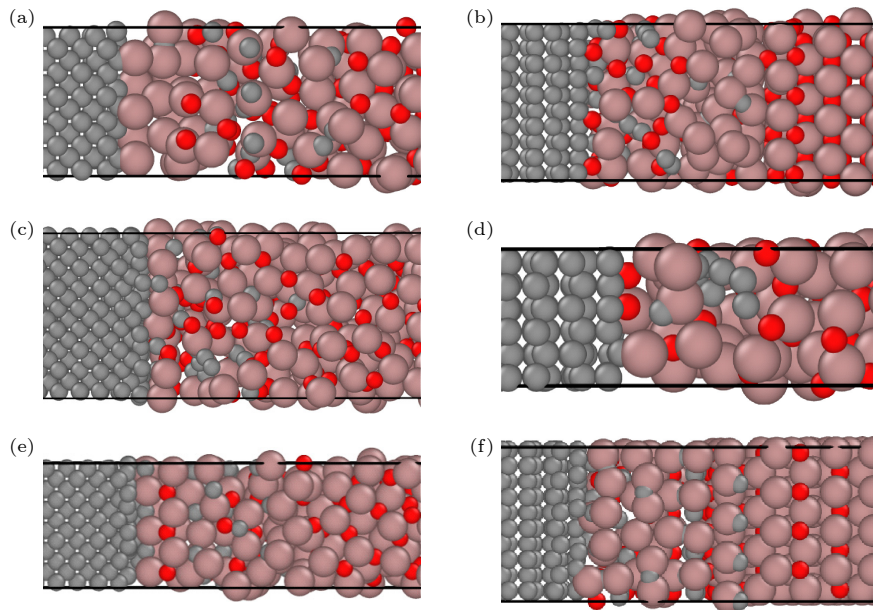


图 4 不同晶向键合处界面 (a) (100) 晶向的  $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$  与 (100) 晶向金刚石键合界面; (b) (100) 晶向的  $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$  与 (111) 晶向金刚石键合界面; (c) 010 晶向的  $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$  与 100 晶向金刚石键合界面; (d) (010) 晶向的  $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$  与 (111) 晶向金刚石键合界面; (e) (001) 晶向的  $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$  与 (100) 晶向金刚石键合界面; (f) (001) 晶向的  $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$  与 (111) 晶向金刚石键合界面

Fig. 4. Bonding interfaces with different crystal orientations: (a)  $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3(100)$ /diamond(100) interface; (b)  $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3(100)$ /diamond(111) interface; (c)  $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3(010)$ /diamond(100) interface; (d)  $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3(010)$ /diamond(111) interface; (e)  $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3(001)$ /diamond(100) interface; (f)  $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3(001)$ /diamond(111) interface.

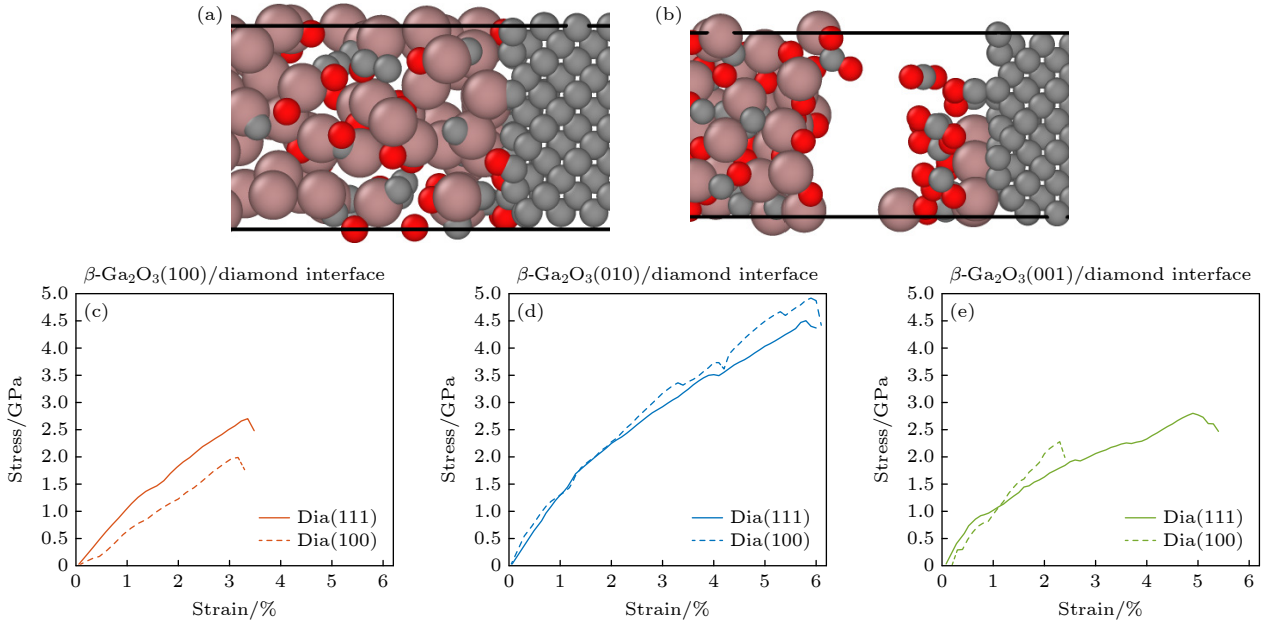


图 5 拉伸断裂示意图以及不同晶面的应力应变曲线 (a) 拉伸前断裂处完整界面示意图; (b) 拉伸后断裂处界面示意图, 所有模型断裂处均发生在不定形层; (c) (100) 晶向的  $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$  与金刚石键合模型的应力应变曲线; (d) (010) 晶面的  $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$  与金刚石键合模型的应力应变曲线; (e) (001) 晶向的  $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$  与金刚石键合模型的应力应变曲线

Fig. 5. Schematics of tensile fracture and stress-strain curves for different crystal orientations: (a) Schematic of the intact interface prior to tensile loading; (b) schematic of the fractured interface after tensile loading, showing that failure occurs within the amorphous layer for all models; (c) stress-strain curves of the  $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$  (100)/diamond bonding models; (d) stress-strain curves of the  $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$  (010)/diamond bonding models; (e) stress-strain curves of the  $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$  (001)/diamond bonding models.

的晶格失配. 这一过程在宏观实验中表现为界面处的原子互扩散现象. 在此过程中, 非晶层的形成优化了界面应力分布, 有效缓解了应力集中, 从而使界面更加稳定, 显著增强了键合强度. 值得注意的是, 本研究发现  $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3(010)/\text{金刚石}(100)$  的键合强度为各晶面中键合强度最高的组合 (5 GPa), 而 Sun 等<sup>[46]</sup> 报道了  $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3/\text{金刚石}$  不同晶面组合的界面热阻, 其计算表明  $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3(010)/\text{金刚石}(100)$  组合的界面热阻 (TBR) 为各组中最低值 (2.14  $\text{m}^2\cdot\text{K}/\text{GW}$ ), 显著低于其余各组界面热阻 (2.53—4.53  $\text{m}^2\cdot\text{K}/\text{GW}$ ), 通常而言, 高键合强度有利于促进声子跨界面传输, 从而对应较低的热边界电阻<sup>[47]</sup>.

## 4 结 论

在本研究中构建了一个百万原子规模、具有 DFT 级精度的高质量数据集, 并基于该数据集, 使用 MTP 框架开发了适用于 C-O-Ga 三元体系的机器学习原子势函数. 利用该高性能势函数, 我们系统地模拟并预测了多种晶面组合下  $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$  与金刚石的异质键合界面演化过程. 通过定量评估界

面键合强度与最大应变, 揭示了界面结合性能的各向异性特征, 并选出最优的力学晶面匹配方案为  $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3(010)/\text{金刚石}(100)$  组合, 其次, 对于  $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3(100)$  晶面与  $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3(001)$  晶面而言, 金刚石 (111) 晶面是其最优选择.

本研究的意义在于构建了高精度的  $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3/\text{金刚石}$  异质键合机器学习势函数, 该势函数能够准确描述界面处复杂的化学键合过程及力学特性, 为进一步优化  $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$  与金刚石异质集成工艺提供了理论基础. 此外, 本研究所采用的机器学习势函数为高效模拟大规模异质界面结构提供了可靠工具, 未来可广泛拓展至其他新型半导体异质结的界面行为预测与设计, 从而有力推动材料科学机理探索与器件工程应用的深度融合.

## 参考文献

- [1] Higashiwaki M, Jessen G H 2018 *Appl. Phys. Lett.* **112** 060401
- [2] He Y J, Zhao F Y, Huang B, Zhang T Y, Zhu H 2024 *Materials* **17** 1870
- [3] Green A J, Chabak K D, Baldini M, Moser N, Gilbert R, Fitch R C, Wagner G, Galazka Z, Mccandless J, Crespo A 2017 *IEEE Electr. Device Lett.* **38** 790
- [4] Furthmüller J, Bechstedt F 2016 *Phys. Rev. B* **93** 115204

- [5] Chabak K, Walker D, Green A, Crespo A, Lindquist M, Leedy K, Tetlak S, Gilbert R, Moser N, Jessen G 2018 *IEEE MTT-S International Microwave Workshop Series on Advanced Materials and Processes for RF and THz Applications (IMWS-AMP)* Ann Arbor, MI, USA, July 16–18, 2018 pp1–3
- [6] Wong M H, Sasaki K, Kuramata A, Yamakoshi S, Higashiwaki M 2015 *IEEE Electr. Device Lett.* **37** 212
- [7] Qu Z Y, Xie Y F, Zhao T C, Xu W H, He Y, Xu Y Z, Sun H R, You T G, Han G Q, Hao Y, Qu X 2024 *ACS Appl. Mater. Interfaces* **16** 57816
- [8] Kim S H, Shoemaker D, Chatterjee B, Green A J, Chabak K D, Heller E R, Liddy K J, Jessen G H, Graham S, Choi S 2022 *IEEE Trans. Electron Dev.* **69** 1251
- [9] Gaska R, Osinsky A, Yang J, Shur M S 1998 *IEEE Electr. Device Lett.* **19** 89
- [10] Baliga B J 2013 *Semicond. Sci. Technol.* **28** 074011
- [11] Zhou Y, Ramaneti R, Anaya J, Korneychuk S, Derluyn J, Sun H R, Pomeroy J, Verbeeck J, Haenen K, Kuball M 2017 *Appl. Phys. Lett.* **111** 041901
- [12] Kim S H, Shoemaker D, Green A J, Chabak K D, Liddy K J, Graham S, Choi S 2023 *IEEE Transactions on Electron Devices* **70** 1628
- [13] Noh J, Si M, Zhou H, Tadjer M J, Ye P D 2018 *76th Device Research Conference (DRC)* Santa Barbara, CA, USA, June 24–27, 2018 pp1–2
- [14] Ning J, Yang Z C, Wu H D, Dong X M, Zhang Y N, Chen Y F, Zhang X B, Wang D, Hao Y, Zhang J C 2025 *Nat. Commun.* **16** 8144
- [15] Cheng Z, Wheeler V D, Bai T, Shi J, Tadjer M J, Feygelson T, Hobart K D, Goorsky M S, Graham S 2020 *Appl. Phys. Lett.* **116** 062105
- [16] Xu W H, Wang Y B, You T G, Ou X, Han G, Hu H Q, Zhang S B, Mu F W, Suga T, Zhang Y H, Hao Y, Wang X 2019 *IEEE International Electron Devices Meeting (IEDM)* San Francisco, CA, USA, December 7–11, 2019 pp12.5. 1–12.5. 4
- [17] Song Y W, Shoemaker D, Leach J H, McGray C, Huang H L, Bhattacharyya A, Zhang Y Y, Gonzalez-Valle C U, Hess T, Zhukovsky S, Hess T, Zhukovsky S, Ferri K, Lavelle R M, Perez C, Snyder D W, Maria J P, Ramos-Alvarado B, Wang X J, Krishnamoorthy S, Hwang J, Foley B M, Choi S 2021 *ACS Appl. Mater. Interfaces* **13** 40817
- [18] Yussof A M M, Abdullah M F, Ridzwan M N A M, Abd Aziz N, Lee H W 2024 *Microelectron. Reliab.* **161** 115496
- [19] Sang L W 2021 *Funct. Diam.* **1** 174
- [20] Matsumae T, Kurashima Y, Umezawa H, Tanaka K, Ito T, Watanabe H, Takagi H 2020 *Appl. Phys. Lett.* **116** 141602
- [21] Hafner J 2008 *J. Comput. Chem.* **29** 2044
- [22] Behler J 2016 *J. Chem. Phys.* **145** 170901
- [23] Binder K, Horbach J, Kob W, Paul W, Varnik F 2004 *J. Phys. : Condens. Mat.* **16** S429
- [24] Behler J 2011 *J. Chem. Phys.* **134**
- [25] Mishin Y 2021 *Acta Mater.* **214** 116980
- [26] Kwon D, Kim D 2024 *J. Mater. Chem. A* **12** 23837
- [27] Ryltsev R, Chtchelkatchev N 2022 *J. Mol. Liq.* **349** 118181
- [28] Bartók A P, Payne M C, Kondor R, Csányi G 2010 *Phys. Rev. Lett.* **104** 136403
- [29] Wang H, Zhang L F, Han J Q, E W 2018 *Comput. Phys. Commun.* **228** 178
- [30] Drautz R 2019 *Phys. Rev. B* **99** 014104
- [31] Shapeev A V 2016 *Multiscale Model. Sim.* **14** 1153
- [32] Thompson A P, Swiler L P, Trott C R, Foiles S M, Tucker G J 2015 *J. Comput. Phys.* **285** 316
- [33] Bian R J, He R, Pan E, Li Z F, Cao G M, Meng P, Chen J G, Liu Q, Zhong Z C, Li W W, Liu F C 2024 *Science* **385** 57
- [34] Oh J M, Venters C C, Di C, Pinto A M, Wan L, Younis I, Cai Z, Arai C, So B R, Duan J 2020 *Nat. Commun.* **11** 1
- [35] Deringer V L, Bartók A P, Bernstein N, Wilkins D M, Ceriotti M, Csányi G 2021 *Chem. Rev.* **121** 10073
- [36] Zuo Y X, Chen C, Li X G, Deng X, Chen Y M, Behler J, Csányi G, Shapeev A V, Thompson A P, Wood M A, Ong S P 2020 *J. Phys. Chem. A* **124** 731
- [37] Zhao K J, Song Z G 2025 *Chin. Phys. B* **34** 066101
- [38] Liu Y H, Li Z, Song Z G 2025 *Chem. Eng. J.* 170640
- [39] Lian J C, Wu H Y, Huang W Q, Hu W Y, Huang G F 2020 *Phys. Rev. B* **102** 134209
- [40] Novikov I S, Gubaev K, Podryabinkin E V, Shapeev A V 2020 *Mach. Learn. Sci. Technol.* **2** 025002
- [41] Thompson A P, Aktulga H M, Berger R, Bolintineanu D S, Brown W M, Crozier P S, In't Veld P J, Kohlmeyer A, Moore S G, Nguyen T D 2022 *Comput. Phys. Commun.* **271** 108171
- [42] Ganesan S, Maradudin A, Oitmaa J 1970 *Ann. Phys.* **56** 556
- [43] McSkimin H, Andreatch Jr P, Glynn P 1972 *J. Appl. Phys.* **43** 985
- [44] Åhman J, Svensson G, Albertsson J 1996 *Cryst. Struct. Commun.* **52** 1336
- [45] Matsumae T, Okita S, Fukumoto S, Hayase M, Kurashima Y, Takagi H 2023 *ACS Appl. Nano Mater.* **6** 14076
- [46] Sun Z P, Zhang D L, Qi Z J, Wang Q J, Sun X, Liang K, Dong F, Zhao Y, Zou D W, Li L J, Wu G, Shen W, Liu S 2024 *ACS Appl. Mater. Interfaces* **16** 31666
- [47] Losego M D, Grady M E, Sottos N R, Cahill D G, Braun P V 2012 *Nat. Mater.* **11** 502

# Dependence of interfacial bonding strength on crystallographic matching in $\beta$ -Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub>/diamond heterogeneous bonding

ZHU Yaqi    SONG Zhigong<sup>†</sup>*(Jiangsu Provincial Key Laboratory of Food Advanced Manufacturing Equipment Technology,**School of Mechanical Engineering, Jiangnan University, Wuxi 214122, China)*

( Received 23 January 2026; revised manuscript received 24 February 2026 )

## Abstract

As a representative fourth-generation ultra-wide-bandgap semiconductor,  $\beta$ -Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub> has shown great promise for high-voltage, high-frequency, and high-power electronic devices because of its ultra-wide bandgap, high breakdown electric field, and low fabrication cost. However, its intrinsically low thermal conductivity makes it difficult to dissipate heat efficiently during device operation. This severely limits its performance and reliability under high power density. In recent years, heterogeneous bonding of  $\beta$ -Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub> with high-thermal-conductivity materials such as diamond has emerged as an important strategy to overcome this thermal bottleneck. Such structures can potentially combine excellent electrical properties with efficient thermal management. However, the microscopic evolution of the  $\beta$ -Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub>/diamond interface and the crystal-orientation dependence of interfacial bonding strength remain unclear. This knowledge gap has hindered interface design, bonding process optimization, and reliability improvement. To address these issues, this study combined large-scale molecular dynamics simulations with density functional theory calculations. A million-atom training dataset with first-principles accuracy was constructed. Based on this dataset, a high-accuracy Moment Tensor Potential (MTP) was developed. Using the fitted potential, we systematically investigated the interfacial structural evolution of  $\beta$ -Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub>/diamond heterogeneous bonding models containing an amorphous transition layer during relaxation. We also examined how interfacial bonding strength depends on different crystal orientation combinations. The results show that, for all orientation combinations, the amorphous interlayer effectively relieves lattice mismatch and local stress concentration during relaxation. As a result, atomically dense contact is achieved at the bonded interface without obvious defects such as voids, cracks, or delamination. These findings indicate that the introduction of an amorphous interlayer improves interfacial structural integrity and bonding stability. Further mechanical analysis shows that the  $\beta$ -Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub>(010)/diamond(100) configuration exhibits the best interfacial bonding strength and overall mechanical performance, demonstrating a clear orientation-matching advantage. This work reveals, at the atomic scale, the evolution mechanism of  $\beta$ -Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub>/diamond heterogeneous bonding interfaces and the crystal-orientation dependence of their bonding strength. It provides important theoretical guidance for interface design, wafer bonding process optimization, and the improvement of mechanical stability and long-term reliability in high-power devices.

**Keywords:**  $\beta$ -Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-diamond hetero-bonding, machine learning interatomic potential, molecular dynamics simulation, moment tensor potential

DOI: [10.7498/aps.75.20260116](https://doi.org/10.7498/aps.75.20260116)CSTR: [32037.14.aps.75.20260116](https://cstr.cn/32037.14.aps.75.20260116)

---

<sup>†</sup> Corresponding author. E-mail: [song\\_jnu@jiangnan.edu.cn](mailto:song_jnu@jiangnan.edu.cn)

$\beta$ -Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub>/金刚石异质键合界面强度的晶向匹配依赖性

朱亚琦 宋智功

Dependence of interfacial bonding strength on crystallographic matching in  $\beta$ -Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub>/diamond heterogeneous bonding

ZHU Yaqi SONG Zhigong

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 75, 110802 (2026) DOI: 10.7498/aps.75.20260116  
CSTR: 32037.14.aps.75.20260116

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.75.20260116>

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

金刚石/环氧树脂复合物热导率的分子动力学模拟

Molecular dynamics simulation of thermal conductivity of diamond/epoxy resin composites

物理学报. 2023, 72(16): 168102 <https://doi.org/10.7498/aps.72.20222270>

基于深度学习势函数的[EMIm]<sup>+</sup>Cl+AlCl<sub>3</sub>离子液体扩散动力学性质的分子动力学模拟

Molecular dynamics simulation of diffusion dynamic behavior in [EMIm]<sup>+</sup>Cl+AlCl<sub>3</sub> ionic liquid based on deep learning potential function

物理学报. 2025, 74(19): 198201 <https://doi.org/10.7498/aps.74.20250818>

AlN/ $\beta$ -Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub>异质结电子输运机制

Electron transport mechanism in AlN/ $\beta$ -Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub> heterostructures

物理学报. 2023, 72(2): 028501 <https://doi.org/10.7498/aps.72.20221545>

孕镶金刚石基底Co原子嵌入深度对金刚石涂层膜基界面结合强度的影响

Influence of Co atom embedding depth in impregnated diamond substrate on bonding strength of diamond coating film substrate interface

物理学报. 2025, 74(10): 106701 <https://doi.org/10.7498/aps.74.20250149>

蛋白质计算中的机器学习

Machine learning for *in silico* protein research

物理学报. 2024, 73(6): 069301 <https://doi.org/10.7498/aps.73.20231618>

WO<sub>3</sub>/ $\beta$ -Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub>异质结深紫外光电探测器的高温性能

Investigation of high-temperature performance of WO<sub>3</sub>/ $\beta$ -Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub> heterojunction deep-ultraviolet photodetectors

物理学报. 2023, 72(16): 160201 <https://doi.org/10.7498/aps.72.20230638>