

核用AlN陶瓷纤锌矿/闪锌矿相界面热边界电导的分子动力学研究

杨官祥, 王立罡, 廖莉洪烨, 赵 强*

华北电力大学核科学与工程学院, 北京

收稿日期: 2026年5月25日; 录用日期: 2026年6月10日; 发布日期: 2026年7月15日

摘 要

纤锌矿/闪锌矿(wurtzite/zincblende, w/zb)相界面是AlN陶瓷在强辐照环境中可能出现的亚稳微结构之一。为评估该类界面对跨界面热输运的影响, 本文以Al端面w-AlN (0001)/N端面zb-AlN (111)相界面为研究对象, 采用非平衡分子动力学方法(NEMD)计算热边界电导, 并结合投影态密度(PDOS)、谱重叠因子和界面附近逐层原子统计分析热阻来源。结果表明: 在300 K条件下, 界面附近出现明显温度跳变, 热边界电导 $G \approx 2.55 \text{ GW}/(\text{m}^2 \cdot \text{K})$; 两侧体区谱重叠因子 $S = 0.6829$, 说明体相振动态失配不足以解释该界面的热阻; 界面核心区均方根偏差较体区增加约12%, 且热阻分布在界面两侧若干原子层范围内。结果提示, 近界面区域的局域散射和传输效率降低是该模型界面热阻的重要来源, 可为核用AlN陶瓷中辐照诱导相界面的热输运退化分析提供原子尺度参考。

关键词

AlN, 相界面, 热边界电导, 分子动力学, 投影态密度, 辐照损伤

Molecular Dynamics Study of Thermal Boundary Conductance at the Wurtzite/Zincblende Phase Boundary in AlN Ceramics for Nuclear Applications

Guanxiang Yang, Ligang Wang, Lihongye Liao, Qiang Zhao*

School of Nuclear Science and Engineering, North China Electric Power University, Beijing

Received: May 25, 2026; accepted: June 10, 2026; published: July 15, 2026

*通讯作者。

文章引用: 杨官祥, 王立罡, 廖莉洪烨, 赵强. 核用 AlN 陶瓷纤锌矿/闪锌矿相界面热边界电导的分子动力学研究[J]. 核科学与技术, 2026, 14(3): 144-152. DOI: 10.12677/nst.2026.143013

Abstract

The wurtzite/zincblende (w/zb) phase boundary is a metastable microstructure that may form in AlN ceramics under intense irradiation. To evaluate its influence on cross-interface thermal transport, this work investigates an Al-terminated w-AlN (0001)//N-terminated zb-AlN (111) phase boundary using nonequilibrium molecular dynamics (NEMD). The thermal boundary conductance is calculated and analyzed together with projected density of states (PDOS), spectral overlap factors, and layer-resolved atomic statistics near the interface. The results show a clear temperature jump near the interface at 300 K, with a thermal boundary conductance of $G \approx 2.55 \text{ GW}/(\text{m}^2 \cdot \text{K})$. The spectral overlap factor between the two bulk regions is $S = 0.6829$, indicating that vibrational-state mismatch alone is insufficient to explain the interfacial thermal resistance. The root-mean-square deviation in the interface core region increases by approximately 12% relative to the bulk region, and the thermal resistance is distributed over several atomic layers on both sides of the interface. These results suggest that local scattering and reduced transmission efficiency in the near-interface region are important contributors to the thermal resistance of this model interface.

Keywords

AlN, Phase Boundary, Thermal Boundary Conductance, Molecular Dynamics, Projected Density of States, Irradiation Damage

Copyright © 2026 by author(s) and Hans Publishers Inc.

This work is licensed under the Creative Commons Attribution International License (CC BY 4.0).

<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>



Open Access

1. 引言

AlN 陶瓷具有高热导率、宽禁带、良好电绝缘性和高温稳定性,在先进核反应堆和聚变装置等服役环境中受到关注[1]-[4]。在高温气冷堆、铅冷快堆等第四代裂变堆以及 ITER 等聚变堆中,AlN 可作为陶瓷涂层、高导热绝缘基板和功能陶瓷候选材料:液态金属冷却包层通道需要兼具电绝缘性和导热性的陶瓷涂层,以降低磁流体学效应的影响;反应堆内部传感器、探测器和耐辐照芯片也依赖 AlN 基板实现散热与电绝缘。随着反应堆功率密度提高,界面热阻对整体散热性能的影响更加突出,跨界面热输运因而成为 AlN 基材料热管理研究中的关键问题之一[5] [6]。

高能中子辐照可在 AlN 中诱发级联碰撞并产生大量点缺陷。缺陷退火和应力松弛过程中,高密度点缺陷可能进一步聚集为位错环;位错环扩展后,可在纤锌矿(wurtzite, w)结构的基面上诱导堆垛层错(stacking faults)。从晶体学角度看,AlN 基面层错处的局部原子堆垛序列由 ABAB……转变为 ABCABC……,对应闪锌矿(zincblende, zb)结构特征[7]-[9]。因此, w-AlN/zb-AlN 相界面可作为辐照诱导亚稳相界面的简化模型,用于考察局域相变结构对声子跨界面输运的影响。

已有研究对 AlN 陶瓷在中子、质子和氦离子辐照下的损伤行为进行了较多讨论,涉及晶格肿胀、力学性能退化和热导率降低等问题[1]-[4] [7]。实验结果显示,高纯 AlN 陶瓷在 JOYO 快堆 650~1008 K 温度范围内经中子辐照后仍可保持较好的结构完整性,但其热导率会因缺陷散射而明显降低[2]-[4]。相比之下,现有工作更多关注点缺陷和晶界散射对热导率的影响,对 w/zb 异相界面这类辐照诱导亚稳相界面的热边界电导仍缺少针对性分析。

从物理图像看,界面热阻通常同时受两类因素影响[5] [6] [10]-[13]:一是界面两侧体相振动态分布的

匹配程度,即谱失配;二是界面局域结构对声子透射、模态转换和散射过程的影响。若两侧声子态密度差异较大,可参与传输的模态数量受限,热边界电导往往较低;但即使谱重叠较高,界面处成键环境和局域结构的变化仍可能削弱声子跨界面传输。因此,仅由热边界电导数值难以判断热阻来源,还需要结合频谱信息和界面附近原子层尺度的热振动行为进行分析。

分子动力学方法,特别是非平衡分子动力学(NEMD),常用于界面热输运研究[10]-[14]。通过施加稳态热流并提取界面温度跳变,可以计算热边界电导;结合速度自相关函数得到的投影态密度(PDOS),可进一步比较两侧声子模态的频谱匹配情况;对界面附近原子层的动能、温度和振动幅度进行统计,则有助于判断热阻是集中在几何界面处,还是分布在具有有限厚度的过渡区内。上述分析思路适用于辨析辐照诱导相界面热阻的主要来源。

基于上述问题,本文以 Al 端面 w-AlN (0001)/N 端面 zb-AlN (111)相界面为对象,采用 NEMD 方法研究其跨界面热输运行为。研究重点包括:(1) 确定 w-AlN/zb-AlN 相界面的热边界电导数量级;(2) 判断该界面热阻主要受体相振动态失配影响,还是与近界面局域散射和传输效率下降更密切相关。相关结果可为核用 AlN 陶瓷中辐照诱导相界面的热输运退化分析提供参考。

2. 模型与方法

2.1. 界面模型构建

本文采用 Tersoff 型 AlN 势函数描述 w-AlN 和 zb-AlN 两相[15]。该势函数可表征 Al-N 体系中的短程成键、键角作用和局域配位环境变化,参数取自 Tungare 等给出的 AlN 势函数。w-AlN 超胞取 $8 \times 8 \times 12$ 原胞($192 \times 8 = 1536$ 个 AlN 单元,共 3072 个原子),沿[0001]方向厚度约 52 Å; zb-AlN 超胞取 $8 \times 8 \times 6$ 原胞($192 \times 6 = 1152$ 个 AlN 单元,共 2304 个原子),沿[111]方向厚度约 36 Å。沿面内方向,二者晶格常数分别为 $a_w = 3.110$ Å 和 $a_{zb} = 4.380$ Å (对应 $\sqrt{2} \times \sqrt{2} \times 45^\circ$ 面内匹配),面内失配率约为 0.3%,满足低失配界面模型的构建要求。

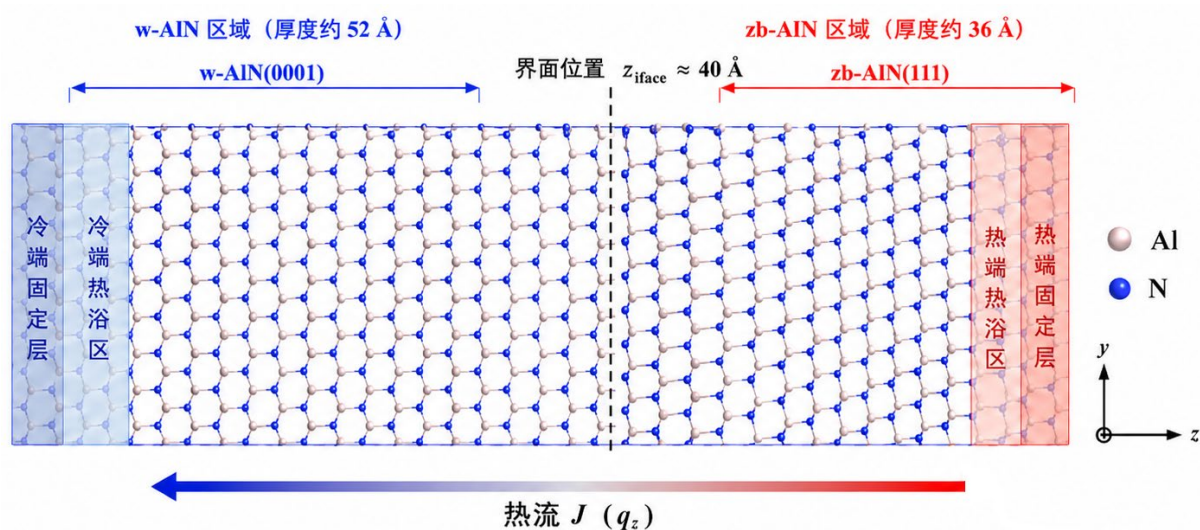


Figure 1. NEMD simulation model of the w-AlN (0001)/zb-AlN (111) phase boundary. The w-AlN and zb-AlN regions have thicknesses of approximately 52 Å and 36 Å, respectively, and the phase boundary is located at $z \approx 39.68$ Å. Fixed layers and Langevin thermostatted regions are placed near the two ends to generate a steady heat flux along the z direction

图 1. w-AlN (0001)/zb-AlN (111)相界面的 NEMD 模拟模型。w-AlN 与 zb-AlN 区域厚度分别约为 52 Å 和 36 Å, 界面位置约为 $z \approx 39.68$ Å。模型两端设置固定层与 Langevin 热浴区, 以沿 z 方向产生稳态热流

如图 1 所示, 界面模型由 w-AlN (0001) 与 zb-AlN (111) 沿法向拼接而成, 界面位置约为 $z = 39.68 \text{ \AA}$ 。w-AlN 一侧为 Al 端面, zb-AlN 一侧为 N 端面, 对应 Al 端面 w-AlN (0001)/N 端面 zb-AlN (111) 异相界面。该模型保留了两侧体相的典型堆垛特征, 可用于表征局域相变界面附近的原子排布。

为确定较稳定的界面构型, 本文对面内平移量(s_x, s_y)和初始界面间距进行筛选。通过比较不同堆垛注册构型及不同初始间距下的总能、残余压力和弛豫后结构, 确定面内注册参数为 $s_x = 0.25$ 、 $s_y = 0.00$, 初始界面间距为 $2.20 \text{ \AA}$ 。该构型弛豫后保持合理的 Al-N 配位关系, 界面附近原子层清晰可辨; 界面总面积 $A = 797.48 \text{ \AA}^2$, 对应 x 和 y 方向投影长度分别为 $24.777 \text{ \AA}$ 和 $32.186 \text{ \AA}$ 。

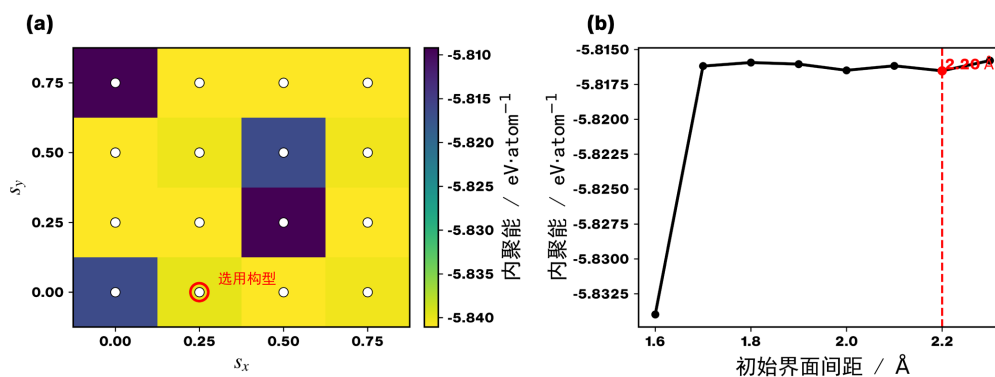


Figure 2. Interface configuration optimization: (a) cohesive-energy distribution from in-plane registry scan; (b) effect of initial interface spacing on cohesive energy

图 2. 界面构型优化结果: (a) 面内平移注册扫描得到的内聚能分布; (b) 初始界面间距对内聚能的影响

图 2(a)显示, 不同面内平移注册构型的内聚能存在差异, 部分低能构型同时伴随较高残余压力。综合界面结合能、残余应力和弛豫后配位关系, 本文选取 $s_x = 0.25$ 、 $s_y = 0.00$ 的构型用于热输运计算。由图 2(b)可见, 初始界面间距为 $2.20 \text{ \AA}$ 时界面结合状态较稳定, 因此后续模拟均采用该间距参数。

2.2. 结构弛豫与平衡

采用共轭梯度法对界面模型进行结构弛豫, 能量和力的收敛阈值分别设置为 $1.0 \times 10^{-10} \text{ eV/atom}$ 和 $1.0 \times 10^{-10} \text{ eV/\AA}$ 。弛豫后体系总能量为 -5.8165 eV/atom , 平均静水压约为 5.7 GPa , 显示该界面处于亚稳压缩构型。随后在 300 K 下进行 50 ps 的 NVT 平衡, 热浴时间常数为 0.1 ps 。平衡后的构型作为 NEMD 和 PDOS 分析的初始结构。

2.3. NEMD 热边界电导计算

NEMD 计算采用非平衡稳态方案, 并通过 Langevin 热浴施加稳态热流[14]。热端设置在 zb-AlN 一侧远离界面的区域, 目标温度为 330 K ; 冷端设置在 w-AlN 一侧远离界面的区域, 目标温度为 270 K 。两端热浴时间常数均为 0.1 ps , 并记录热浴与体系之间的累计能量交换。为避免自由表面对热流统计的影响, 在模型两端设置厚度约 $5 \text{ \AA}$ 的固定层。模拟时间步长为 0.5 fs , 生产运行时间为 1 ns 。

温度剖面沿 z 方向以 $1 \text{ \AA}$ 为间隔进行分层统计, 并在整个生产阶段内取时间平均。分别对两侧体区温度进行线性拟合, 并外推至界面位置, 得到界面两侧等效温度 T_w 和 T_{zb} ; 界面温差定义为 $|\Delta T| = |T_w - T_{zb}|$ 。热流密度 J 由热浴累计能量交换量 Q 、界面面积 A 和统计时间 Δt 计算, 即 $J = Q/(A \times \Delta t)$, 热边界电导表示为 $G = J/|\Delta T|$ 。同时改变体区拟合窗口, 并将轨迹划分为 50 ps 独立时间块, 以评估系统误差和统计涨落。

2.4. PDOS 与谱重叠因子计算

PDOS 计算基于平衡后的 NVE 轨迹[16]。速度数据采样时长约为 10 ps，采样时间间隔为 0.01 ps。按 z 坐标将原子分为 w-AlN 体区(15~32 Å)、zb-AlN 体区(48~70 Å)和界面区(界面中心 ± 4 Å)三组。对每组原子的速度自相关函数进行傅里叶变换，并经汉宁窗处理和零填充后得到归一化 PDOS $g(\omega)$ 。所得频率分辨率约为 0.5 THz，分析范围为 0~33 THz。

谱重叠因子定义为 $S = \int \min[g_w(\omega), g_{zb}(\omega)] d\omega$ ，用于表征两侧体相振动频谱的共享程度。本文同时计算界面加权谱重叠量，以辅助评估界面区振动与两侧体区的匹配情况。

2.5. 界面附近逐层原子统计分析

为分析界面附近热振动的空间分布，本文在 NEMD 稳态阶段对原子坐标、速度和逐原子动能进行时间平均统计。原子按 z 坐标以 1 Å 间隔分层，并在每一层内区分 Al 和 N 原子。各层平均动能用于换算等效温度，均方根偏差(RMSD)相对于采样初始构型计算，用于描述界面附近原子热振动幅度。

3. 结果与讨论

3.1. 界面温度剖面与热边界电导

如图 3 所示，w-AlN (0001)/zb-AlN (111)异相界面的稳态温度剖面在界面附近出现明显不连续。沿 z 方向施加热流后，远离界面的两侧体区均呈近似线性温度分布，说明体系已形成稳定的一维传热状态。界面处的温度跳变表明，该异相界面对稳态热流产生了附加热阻。

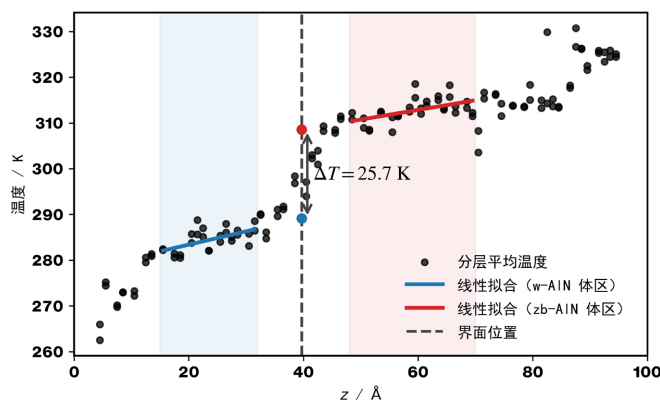


Figure 3. Steady-state temperature profile, linear fitting, and interfacial temperature jump of the w-AlN/zb-AlN interface

图 3. w-AlN/zb-AlN 相界面的稳态温度剖面、线性拟合及界面温度跳变

对 w-AlN 侧 15~32 Å 和 zb-AlN 侧 48~70 Å 体区温度进行线性拟合并外推至界面位置，得到 $T_w = 302.4$ K、 $T_{zb} = 276.7$ K，对应界面温度跳变 $\Delta T = 25.7$ K。稳态统计阶段内，热端输入能量与冷端移除能量基本平衡，说明传热过程已进入稳定状态。结合界面面积 $A = 797.48$ Å²，计算得到热流密度 $J = 6.574 \times 10^{10}$ W/m²，对应热边界电导 $G = 2.55$ GW/(m²·K)。

为评估体区拟合窗口对结果的影响，本文比较了多组 w-AlN 侧和 zb-AlN 侧拟合区间。所得 ΔT 变化范围为 24.29~26.81 K，对应 G 为 2.21~2.71 GW/(m²·K)，由拟合窗口引入的系统误差约为 ± 0.2 GW/(m²·K)。将稳态轨迹划分为 20 个 50 ps 时间块后， G 的标准误差约为 0.77 GW/(m²·K)。因此，中心窗口得到的 $G = 2.55$ GW/(m²·K) 对拟合区间变化不敏感。

3.2. 投影态密度与谱重叠分析

如图 4 所示，两侧体区及界面区原子的归一化 PDOS 主峰均位于约 26 THz 附近。其中，w-AIN 体区主峰为 26.27 THz，zb-AIN 体区主峰为 26.03 THz，界面区主峰为 25.98 THz，具体特征参数见表 1。三者主导振动频率接近，说明两侧晶相在主要振动频段内未出现明显错位。

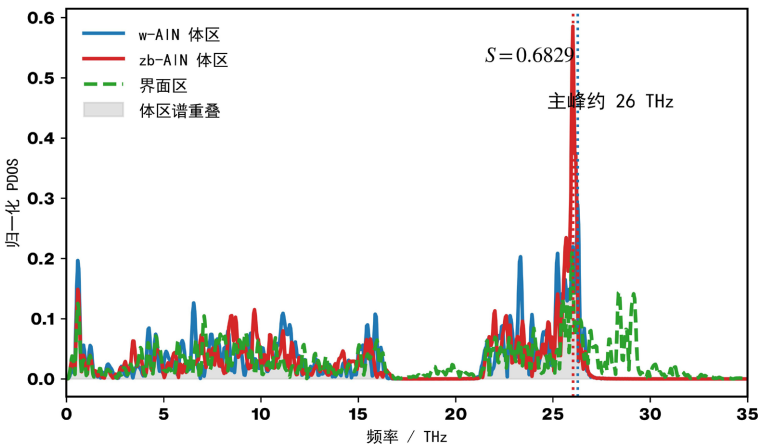


Figure 4. Projected density of states for atoms in the w-AIN bulk, zb-AIN bulk, and interface region
图 4. w-AIN 体区、zb-AIN 体区及界面区原子的投影态密度分布

从频段权重分布看，w-AIN 体区在 0~10、10~20 和 20 THz 以上频段的积分权重分别为 0.328、0.217 和 0.454；zb-AIN 体区对应值分别为 0.330、0.176 和 0.493。两相低频段权重几乎相同，中频段存在有限差异，高频段分布也较接近，表明 w-AIN 与 zb-AIN 两相的整体振动态分布具有相似性。

谱重叠因子 $S = 0.6829$ ，表明两侧体相约 68% 的振动频谱存在重叠。若界面热阻主要由模态失配控制，通常会对应较低的谱重叠水平；本文所得 S 值较高，提示“可用振动态不足”不是该界面热阻的主要限制因素。界面加权谱重叠量为 0.0370。该量受三条归一化频谱共同参与计算的影响，不宜与体区谱重叠因子直接比较，但可说明界面区振动频率整体仍位于两侧体区主频范围内。

将上述频谱结果与 NEMD 得到的 $G = 2.55 \text{ GW}/(\text{m}^2 \cdot \text{K})$ 结合分析可见，该界面呈现“较高谱重叠 - 中等热边界电导”的特征。由此推断，限制热流跨界面传输的因素更可能与界面透射系数下降、声子模态转换、局域成键环境变化及界面附近非简谐散射有关，而不是两侧体相声子态密度的严重失配。也就是说，该模型界面的热阻主要体现为界面传输效率受限，而非体相振动态供给不足。

Table 1. PDOS characteristic parameters and spectral overlap results
表 1. PDOS 特征参数与谱重叠结果

项目	数值
w-AIN 体区主峰频率	26.27 THz
zb-AIN 体区主峰频率	26.03 THz
界面区主峰频率	25.98 THz
w 体区 0~10 THz 权重	0.3277
zb 体区 0~10 THz 权重	0.3301
w 体区 10~20 THz 权重	0.2169

续表

zb 体区 10~20 THz 权重	0.1755
w 体区 20+ THz 权重	0.4538
zb 体区 20+ THz 权重	0.4930
谱重叠因子 S	0.6829
界面加权谱重叠量	0.0370

3.3. 界面附近原子层温度与振动特征

为进一步识别界面热阻的空间分布,本文对NEMD稳态阶段的近界面区域进行逐层统计。结果显示,界面附近不同原子层的平均温度和振动幅度均呈连续变化,未在单一原子层上出现突变。这表明 w-AIN/zb-AIN 相界面的热阻更可能分布在若干原子层厚度的过渡区内,而非集中于理想化的零厚度热阻面。

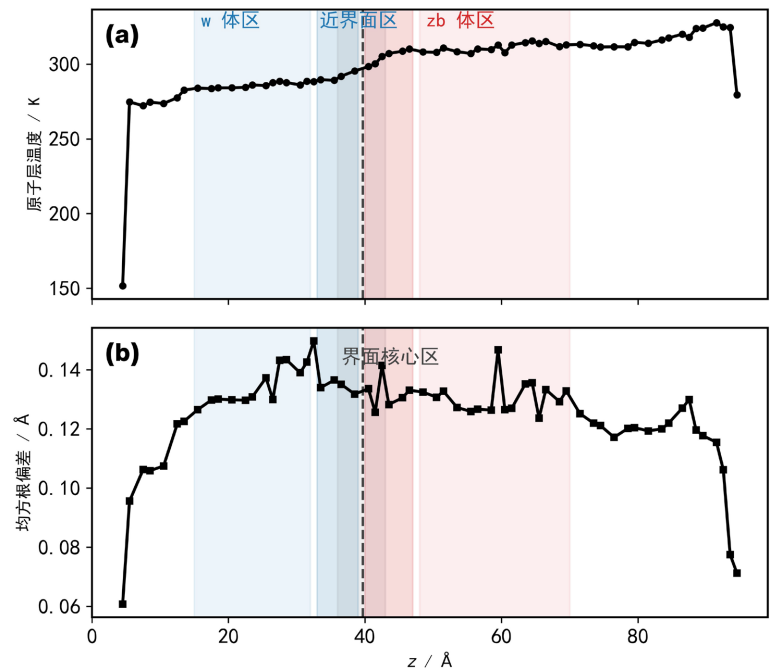


Figure 5. Layer-resolved atomic temperature and vibrational amplitude near the interface
图 5. 界面附近逐层原子温度与振动幅度分布

如图 5(a)所示,对两侧体区与近界面区的平均温度进行比较可见:w-AIN 一侧体区(15~32 Å)层平均温度为 285.17K,近界面区(33~39 Å)为 291.27 K,增幅约为 6.10 K;zb-AIN 一侧体区(48~70 Å)为 311.13 K,近界面区(40~47 Å)为 305.08 K,降幅约为 6.05 K,具体统计结果见表 2。两侧温度均向界面区域收敛,说明温度跳变并非集中于几何界面处的单点不连续,而是在界面两侧若干原子层内逐步完成重分配。从变化幅度看,w-AIN 一侧的温度扰动略强于 zb-AIN 一侧。

代表性原子层的统计结果与上述趋势一致。w-AIN 体区 15.5 Å 处 Al 层和 N 层温度分别为 285.3 K 和 282.7 K,近界面 38.5 Å 处分别升高至 296.7 K 和 294.3K。zb-AIN 一侧,40.5 Å 附近 N 层和 Al 层温度分别为 298.4 K 和 304.1 K;远离界面至 48.5 Å 后分别升高至 305.2 K 和 311.2 K。上述结果说明,界面温降由两侧若干原子层共同承担,而不是集中在单一原子层内。

如图 5(b)所示,层分辨均方根偏差(RMSD)同样显示界面热阻具有有限厚度特征。w-AlN 一侧 RMSD 由体区的 0.1386 Å 增大至近界面区的 0.1428 Å; zb-AlN 一侧则由 0.1313 Å 增大至 0.1379 Å。若将 36~43 Å 定义为界面核心区,其平均 RMSD 为 0.1477 Å,高于远离界面的参考区平均值 0.1317 Å,增幅约 12%。这提示界面局域结构改变会增强原子热振动,并可能提高声子散射概率。

从元素分辨结果看,Al 层和 N 层在同一侧内部的温度与振动幅度变化趋势总体一致,未表现出明显不同的界面响应。例如, w-AlN 侧 33.5 Å 附近 Al 层与 N 层温度分别为 289.2 K 和 290.3 K; zb-AlN 侧 43.5 Å 附近分别为 309.0 K 和 304.6 K。这说明界面热阻的形成主要与层间整体振动环境和界面局域结构扰动有关,而不是由某一元素亚晶格单独主导。

综合逐层温度和 RMSD 结果, w-AlN/zb-AlN 相界面附近并不存在尖锐的单层“局域热阻层”,而是形成了跨越若干原子层的分布式热阻区。该区域内温度由两侧体区值逐步向界面过渡,原子振动幅度同步增强,说明界面热输运过程中伴随局域散射和能量再分配。该结果与温度剖面和 PDOS 分析相一致,表明近界面有限厚度区域内的传输效率下降是该模型界面热阻的重要来源。

Table 2. Representative layer-resolved statistics near the interface
表 2. 界面附近逐层统计的代表性结果

区域/原子层	平均温度/K	平均 RMSD/Å
w 侧体区平均(15~32 Å)	285.17	0.1386
w 侧近界面区平均(33~39 Å)	291.27	0.1428
zb 侧近界面区平均(40~47 Å)	305.08	0.1379
zb 侧体区平均(48~70 Å)	311.13	0.1313
界面核心区平均(36~43 Å)	297.28	0.1477
远离界面参考区平均	296.59	0.1317
w-AlN 38.5 Å Al 层	296.67	0.1305
w-AlN 38.5 Å N 层	294.26	0.1330
zb-AlN 40.5 Å N 层	298.44	0.1336
zb-AlN 48.5 Å Al 层	311.24	0.1340

4. 结论

本文采用分子动力学方法研究了 w-AlN (0001)/zb-AlN (111)异相界面的热输运行为,并结合温度剖面、投影态密度和逐层原子统计分析界面热阻来源。主要结论如下。

- (1) 通过面内平移与界面间距优化,确定 Al 端面 w-AlN (0001)/N 端面 zb-AlN (111)为代表性界面构型;其面内平移量为 $s_x = 0.25$ 、 $s_y = 0.00$,初始界面间距为 2.20 Å。弛豫后该构型保持合理的界面配位关系,可用于后续热输运分析。
- (2) NEMD 结果表明,该异相界面在 300 K 附近出现清晰的界面温度跳变。基于 1 ns 稳态温度剖面的线性外推,得到界面温差 $|\Delta T| = 25.7$ K,热流密度 $J = 6.574 \times 10^{10}$ W/m²,对应热边界电导 $G = 2.55$ GW/(m²·K)。不同拟合窗口下 G 的变化范围约为 ± 0.2 GW/(m²·K),说明该结果对拟合区间选择不敏感。
- (3) PDOS 分析显示, w-AlN 体区、zb-AlN 体区及界面区的主峰均位于约 26 THz 附近,两侧体区的谱重叠因子 $S = 0.6829$,说明两相在主要振动频率范围内具有较高的声子态重叠。因此,该界面的热阻不宜简单

归因于严重的声子模态失配,而更可能与界面局域成键环境变化、声子透射几率降低以及模态转换散射有关。

(4) 界面附近逐层统计表明,热阻并非集中于理想化的单层界面,而是分布在两侧若干原子层范围内。w-AlN 一侧近界面区温度较体区升高约 6.10 K, zb-AlN 一侧近界面区温度较体区降低约 6.05 K; 界面核心区平均 RMSD (0.1477 Å) 高于远离界面的参考区(0.1317 Å, 增幅约 12%)。这说明界面附近存在热振动增强与局域散射强化的分布式过渡区, 是该模型界面热阻形成的重要空间区域。

综上, 在 Tersoff 型 AlN 势函数和本文模型条件下, w-AlN/zb-AlN 异相界面表现出中等量级的热边界电导[14]。其热阻主要与近界面有限厚度区域内的传输效率下降有关,而不能仅由体相振动态失配解释。上述结果可为核用 AlN 陶瓷中辐照诱导相界面的跨界面热传输分析提供原子尺度参考, 也可对相关热管理材料的界面调控提供依据。

参考文献

- [1] Yano, T., Inokuchi, K., Shikama, M., *et al.* (2004) Neutron Irradiation Effects on Isotope Tailored Aluminum Nitride Ceramics by a Fast Reactor up to 2×10^{26} n/m². *Journal of Nuclear Materials*, **329**, 1471-1475. <https://doi.org/10.1016/j.jnucmat.2004.04.250>
- [2] Akiyoshi, M., Akasaka, N., Tachi, Y. and Yano, T. (2004) Relation between Macroscopic Length Change and the Crystal Structure in Heavily Neutron-Irradiated Ceramics. *Journal of Nuclear Materials*, **329**, 1466-1470. <https://doi.org/10.1016/j.jnucmat.2004.04.251>
- [3] Akiyoshi, M., Takagi, I., Yano, T., Akasaka, N. and Tachi, Y. (2006) Thermal Conductivity of Ceramics during Irradiation. *Fusion Engineering and Design*, **81**, 321-325. <https://doi.org/10.1016/j.fusengdes.2005.08.084>
- [4] Akiyoshi, M. and Yano, T. (2008) Neutron-Irradiation Effect in Ceramics Evaluated from Macroscopic Property Changes in As-Irradiated and Annealed Specimens. *Progress in Nuclear Energy*, **50**, 567-574. <https://doi.org/10.1016/j.pnucene.2007.11.042>
- [5] Qi, Z., Shen, W., Li, R., Sun, X., Li, L., Wang, Q., *et al.* (2023) AlN/Diamond Interface Nanoengineering for Reducing Thermal Boundary Resistance by Molecular Dynamics Simulations. *Applied Surface Science*, **615**, Article 156419. <https://doi.org/10.1016/j.apsusc.2023.156419>
- [6] Swartz, E.T. and Pohl, R.O. (1989) Thermal Boundary Resistance. *Reviews of Modern Physics*, **61**, 605-668. <https://doi.org/10.1103/revmodphys.61.605>
- [7] Kozlovskiy, A.L., Shlimas, D.I., Kenzhina, I.E., Borgekov, D.B. and Zdorovets, M.V. (2020) Dynamics of Radiation Damage in AlN Ceramics under High-Dose Irradiation, Typical for the Processes of Swelling and Hydrogenation. *Crystals*, **10**, Article 546. <https://doi.org/10.3390/cryst10060546>
- [8] Sun, X., Sui, J., Ben, J., Zang, H., Jiang, K., Zhang, S., *et al.* (2023) The Stacking Fault Annihilation in a-Plane AlN during High-Temperature Annealing. *CrystEngComm*, **25**, 1903-1909. <https://doi.org/10.1039/d2ce01654k>
- [9] Wright, A.F. (1997) Basal-Plane Stacking Faults and Polymorphism in AlN, GaN, and InN. *Journal of Applied Physics*, **82**, 5259-5261. <https://doi.org/10.1063/1.366393>
- [10] Cahill, D.G., Ford, W.K., Goodson, K.E., Mahan, G.D., Majumdar, A., Maris, H.J., *et al.* (2003) Nanoscale Thermal Transport. *Journal of Applied Physics*, **93**, 793-818. <https://doi.org/10.1063/1.1524305>
- [11] Merabian, S. and Termentzidis, K. (2014) Thermal Boundary Conductance across Rough Interfaces Probed by Molecular Dynamics. *Physical Review B*, **89**, Article 054309. <https://doi.org/10.1103/physrevb.89.054309>
- [12] Giri, A., Braun, J.L. and Hopkins, P.E. (2016) Implications of Interfacial Bond Strength on the Spectral Contributions to Thermal Boundary Conductance across Solid, Liquid, and Gas Interfaces: A Molecular Dynamics Study. *The Journal of Physical Chemistry C*, **120**, 24847-24856. <https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.6b08124>
- [13] Shan, S., Zhang, Z., Volz, S. and Chen, J. (2024) Phonon Mode at Interface and Its Impact on Interfacial Thermal Transport. *Journal of Physics: Condensed Matter*, **36**, Article 423001. <https://doi.org/10.1088/1361-648x/ad5fd7>
- [14] Landry, E.S. and McGaughey, A.J.H. (2009) Thermal Boundary Resistance Predictions from Molecular Dynamics Simulations and Theoretical Calculations. *Physical Review B*, **80**, Article 165304. <https://doi.org/10.1103/physrevb.80.165304>
- [15] Tungare, M., Shi, Y., Tripathi, N., Suvarna, P. and Shahedipour-Sandvik, F. (2011) A Tersoff-Based Interatomic Potential for Wurtzite AlN. *Physica Status Solidi A*, **208**, 1569-1572. <https://doi.org/10.1002/pssa.201001086>
- [16] Dickey, J.M. and Paskin, A. (1969) Computer Simulation of the Lattice Dynamics of Solids. *Physical Review*, **188**, 1407-1418. <https://doi.org/10.1103/physrev.188.1407>