

DOI: 10.11949/0438-1157.

基于原子间机器学习势的硅热输运性质计算

曹清源^{1,2}, 侯超峰^{1,2}, 葛蔚^{1,2}

(¹ 中国科学院过程工程研究所介科学与过程工程全国重点实验室, 北京 100190; ² 中国科学院大学化学工程学院, 北京 100049)

摘要: 当前, 在硅热输运性质的计算中, 纯硅的原子间机器学习作用势函数已经有研究报道, 但N型半导体和P型半导体中As掺杂和B掺杂的原子间机器学习势函数还未见提出。机器学习势函数具有与量子力学模拟相当的精度, 同时又避免了高昂的计算成本, 可以克服硅热输运性质计算在大空间和长时间尺度上应用受限的问题。本文通过密度泛函理论分别构建了包含As掺杂和B掺杂硅结构数据集, 使用深度神经网络训练得到了两个势函数, 并对稳定性和准确性进行一系列测试。通过纯硅声子色散曲线和声子态密度的计算, 以及热导率的非平衡态分子动力学模拟, 结果表明相较传统原子间经验力场势函数, 机器学习势函数可以更好地描述晶硅的热声子特征, 并且有限移位法比密度泛函微扰理论具有更高的声子色散计算精度, 热导率的计算结果亦与已报道的工作接近。

关键词: 机器学习; 原子间作用势; 掺杂; 硅; 热输运

中图分类号: TQ127.2

文献标志码: A

文章编号: 0438-1157 (XXXX) XX-0001-10

Thermal transport properties of silicon based on interatomic machine learning potentials

CAO Qingyuan^{1,2}, HOU Chaofeng^{1,2}, GE Wei^{1,2}

(¹ State Key Laboratory of Mesoscience and Process Engineering, Institute of Process Engineering, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100190, China; ² School of Chemical Engineering, University of Chinese Academy of Sciences, Beijing 100049, China)

Abstract: There have been several studies reporting the interatomic machine learning potential functions for the calculation of thermal transport properties of pure silicon, but the machine learning potential functions for N-type As-doped and P-type B-doped silicon have not been reported yet. Machine learning potential has shown excellent computational accuracy consistent with quantum mechanics, and avoids the expensive computational cost, which breaks the applicability limit of thermal transport calculation in large space and time scales. In this paper, based on the density functional theory energies and forces from the developed As-doped and B-doped silicon dataset and a public pure-silicon database, we trained two deep neural network potentials, and conducted a series of tests on the stability and accuracy of the potential functions. Furthermore, we evaluated the phonon properties and performed the non-equilibrium molecular dynamics simulation to calculate the thermal conductivity of the pure silicon systems. The results show that, compared with traditional empirical potential functions, the machine learning

收稿日期: 2026-03-28 修回日期: 2026-05-07

通信作者: 侯超峰(1981—), 男, 博士, 研究员, cfhou@ipe.ac.cn

第一作者: 曹清源(1998—), 男, 博士研究生, caoqingyuan21@ipe.ac.cn

基金项目: 北京市自然科学基金(JQ21034); 中国科学院稳定支持基础研究领域青年团队计划(YSBR-043); 中国科学院网信专项(CAS-WX2025SF-0406); 国家自然科学基金(21776280, 22073103); 介科学与过程工程全国重点实验室自主部署课题(MESO-25-E02)

引用本文: 曹清源, 侯超峰, 葛蔚. 基于原子间机器学习势的硅热输运性质计算[J]. 化工学报, XXXX, XX(XX): 1–10

Citation: CAO Qingyuan, HOU Chaofeng, GE Wei. Thermal transport properties of silicon based on interatomic machine learning potentials[J]. CIESC Journal, XXXX, XX(XX): 1–10

potential functions perform better in calculation of the thermal phonon characteristics, and the finite displacement method has higher accuracy in calculating the phonon dispersion curves than the density functional perturbation theory. And, the calculated thermal conductivities are consistent with the reported work.

Keywords: machine learning; interatomic potential; doped; silicon; thermal transport

引 言

随着微电子芯片集成度的不断提高,芯片内部的热流密度也随之增加,热管理成为高性能芯片设计面临的重要问题。晶格热导率(lattice thermal conductivity, LTC)是硅基器件和电路设计的一个重要的参数^[1-6]。由于硅芯片电路制造中P型和N型区域的掺杂会降低物理电路的热导率,因此了解芯片系统内部各种掺杂对热量传输的影响很有必要。目前对固体材料热传输特性的理论研究主要有第一性原理和分子动力学等计算方法。第一性原理模拟不依赖经验参数,通过量子力学方法计算原子间的高阶力常数,获得声子的热传输特性。然而,第一性原理方法的计算复杂性和计算负载严重限制了其在数百甚至更多原子复杂系统中的应用^[7-9]。分子动力学(molecular dynamics, MD)或原子模拟是研究纳米结构材料LTC的有效手段,能详细描述材料的微观结构和掺杂与晶格热导率的关联,因而对掺杂区域内部热量分布和传递路径的精确模拟具有重要作用。

分子动力学或原子模拟通过给定的势能函数来计算原子间的相互作用力,然后基于牛顿力学原理模拟原子的运动^[10-12]。尽管计算负载相对第一性原理方法较低,但结果的准确性通常取决于所使用的原子间作用势函数。机器学习(machine learning, ML)技术的迅速发展为复杂原子系统的分子动力学模拟提供了新的势函数近似方法^[13-17]。其在原子间作用势能方面最早的应用之一是 Behler 和 Parrinello 通过神经网络对量子力学方法计算得到势能面进行拟合^[18]。随后的十几年中,许多机器学习势函数的程序包陆续发布,例如 AENET^[19-20]、DEEPM-D-KIT^[21]、KLIF^[22]和 GPUMD^[23]等。机器学习势函数在实现与量子力学模拟精度相当的同时,避免了量子力学方法高昂的计算成本,从而克服了该方法在大空间和长时间尺度上应用受限的问题^[24]。当前,纯硅的原子间机器学习作用势函数已经有研究报道^[25-26],但N型半导体和P型半导体中As掺杂和B掺杂的原子间机器学习势函数还未见

提出。

本研究通过第一性原理方法分别构建了包含As掺杂和B掺杂硅结构数据集,并使用深度神经网络拟合得到相应的硅势函数,模拟计算了纯硅的声子结构特征和热输运性质,并与传统原子间经验力场势函数计算精度进行了比较。

1 计算方法

1.1 势函数构建

As掺杂硅和B掺杂硅的数据集分别由三部分构成,第一部分是纯硅的结构集,这部分结构来自于公开的硅数据集^[27],其中包含了不同原子数的金刚石型晶胞、六方晶系、体心立方堆积、面心立方堆积、六方最密堆积、液体硅、无定型硅等多种结构类型;第二部分是在纯硅数据集的基础上,选取金刚石型、六方晶系、液体、无定型硅四类结构,对其进行随机替位掺杂,从而获得一系列的As掺杂和B掺杂原子结构,掺杂率为0.46%、0.69%、0.78%、0.93%、1.56%;最后一部分是对金刚石型的掺杂结构进行密度泛函理论(density functional theory, DFT)结构优化和不同温度下的第一性原理分子动力学模拟,将模拟过程中的原子结构及其对应的力和能量加入数据集,扩充数据集所包含的结构空间。整个数据集兼顾了不同原子数、掺杂浓度和晶型,并且通过第一性原理分子动力学模拟构建了大量的无序非晶结构,满足硅热输运性质计算的结构需求。

对于上述的数据集,使用基于赝势平面波基组的第一性原理从头算计算程序 Vienna Ab initio Simulation Package (VASP) 5.5.4 计算其中样本结构的能量和力^[28-30],交换关联泛函采用GGA-PBE^[31],使用投影缀加波(projector-augmented plane-wave, PAW)赝势描述电子与核的相互作用关系^[28,32]。在结构优化过程中,体系中的所有原子都会进行完全的弛豫,直至每个原子上的受力小于10meV/Å,而电子步的能量收敛标准为 10^{-5} eV。考虑到数据集中计算的晶体结构大小并不统一,采用全自动生成的

方式对布里渊区K点网格进行取样,保证每 $0.04\text{\AA}^{-1}$ 的区域至少有一个K点。为了平衡计算精度与计算负载,参考PAW赝势的推荐动能截止值^[28],所有计算均采用520eV的动能截止值来表示波函数。数据集中随机替位掺杂的硅原子结构通过Python Materials Genomics tool (pymatgen)软件自动生成。最后通过dpdata 0.2.25程序包,将原子位置和VASP的计算结果转换为势函数训练所需要的numpy格式,作为势函数的训练集。

掺杂硅机器学习势函数的训练通过基于深度神经网络势能框架的Deepmd-kit软件实现^[21,32]。该势能模型包含两部分神经网络结构,嵌入网络和拟合网络部分。嵌入网络部分用于原子结构描述符的构建,构建方式采用the Deep Potential Smooth Edition (DeepPot-SE)。其包含三个隐藏层,每个隐藏层的节点个数分别为25、50、100,描述了 $6\text{\AA}$ 截断半径内的邻居构型。势函数可以描述体系中Si-As、Si-Si、Si-B等不同类型的原子间相互作用,但忽略了As-B、As-As、B-B等杂质原子间的作用,因为模拟体系中杂质原子浓度较低,杂质原子间相距较远。

拟合网络部分也包含三个隐藏层,每个隐藏层的节点个数分别为120、120、120,每层使用双曲正切函数作为激活函数。初始学习率为0.001,每100训练步以指数形式衰减。神经网络的预测值与真实值之间的差值随迭代次数变化的函数叫做损失函数,作为评估模型拟合程度的指标,在训练过程中,不断对神经网络参数进行优化满足最小化损失函数的要求。这里采用的损失函数是:

$$L(\alpha_E, \alpha_F, \alpha_\xi) = \alpha_E \sum_i \Delta E_i^2 + \frac{\alpha_F}{3N} \sum_i \Delta F_i^2 + \frac{\alpha_\xi}{9} \|\Delta \xi\|^2 \quad (1)$$

其中, $\alpha_E, \alpha_F, \alpha_\xi$ 分别是能量、力和维里张量损失的组合系数。 Δ 代表了能量、力、维里张量的预测值和训练数据之间的差距, N 代表了原子数, E_i 代表原子 i 的能量贡献, F_i 代表了原子 i 的受力, $\xi = -\frac{1}{2} \sum_i R_i \otimes F_i$ 是维里张量, R_i 是第 i 个原子的位置矢量。在损失函数中,能量的组合系数由0.02逐渐转变为2,力的组合系数由1000逐渐转变为1。在数据集迭代优化的过程中,使用了主动学习的方式加强采样,扩充了数据集的空间构型。

1.2 声子结构分析

声子结构可以反映体系的微观热学性质,借助声子计算的开源软件包Phonopy 2.44.0^[33-34],计算神

经网络势函数下金刚石型硅晶胞的色散曲线,并与密度泛函理论计算的结果进行比较。

将硅的2原子原胞进行 $3 \times 3 \times 3$ 扩胞生成新的超胞作为模拟体系。计算声子态密度函数时,Q点密度为 $30 \times 30 \times 30$ 。计算声子色散曲线时,选取 $\Gamma-K, X-\Gamma, \Gamma-L$ 三条高对称Q点路径,每条高对称Q点路径在分子动力学计算时取51个Q点,在DFT计算时取20个Q点。

1.3 热导率计算

利用构建好的神经网络势函数,进行非平衡态分子动力学(non-equilibrium molecular dynamics, NEMD)模拟,计算体硅的热导率。如图1所示,构建了一个由热源区和热沉区组成的导热空间,通过分子动力学模拟软件LAMMPS调用DeepMD原子间势函数计算模块,实现神经网络势函数计算热导率^[21,35]。

模拟体系三个空间方向采用周期性边界,时间步长为2fs。首先在300K下,采用Nose-Hoover控温控压方法使用NPT系综对系统弛豫20ps,再使用NVE系综弛豫20ps。然后将体系z方向的底端部分设置为热源区,体系的中间部分设置为热沉区,使用Langevin恒温方法将热源区和热沉区的温度分别控制在325K和275K,在NVE系综下充分弛豫2ns以达到稳态。在系统达到稳态后继续计算2ns,分别统计系统内热源区的累积热量与热沉区的移除热量随时间的变化,得到体系沿热流方向的热通量。最后根据傅里叶定律中热通量与温度梯度的关系,计算得到模拟体系的热导率。

2 结果与讨论

2.1 训练、测试误差

As掺杂硅势函数和B掺杂硅势函数在训练过程中,神经网络计算的训练集结构的能量和力与DFT值的均方根误差(root mean square error, RMSE)随训练步数的变化趋势如图2所示。可以看到,能量和力的均方根误差随着训练的进行很快趋于收敛。在迭代次数达到400000步后,能量的RMSE收敛于10meV以下,力的RMSE收敛于0.1eV/Å以下。同时经过测试发现,更长时间的迭代训练并不会明显降低能量和力的均方根误差,因此400000步的迭代训练次数已经满足神经网络势函数的收敛要求。

为了验证神经网络结构参数的无关性,使用不

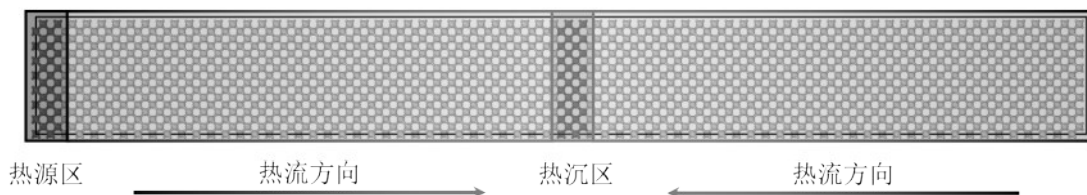


图1 非平衡分子动力学计算热导率的模拟示意图

Fig 1 Schematic of the NEMD simulation models for heat conduction

同的嵌入网络节点数、拟合网络节点数和截断半径训练势函数。分别使用As掺杂和B掺杂数据集对表1参数的神经网络势函数进行训练。如图2所示,在100000步时,算例2的能量RMSE收敛到10meV左右。当训练次数达到300000步,各组势函数能量和力的RMSE均收敛至同一水平,说明算例0所使用的神经网络结构参数可靠。考虑到其它算例增加网络节点数和截断半径后,会增加计算成本,因此使用算例0的参数训练神经网络势函数。

表1 神经网络结构参数敏感性验证

Table 1 Sensitivity test of neural network parameters

编号	嵌入网络节点数			拟合网络节点数			截断半径
	第1层	第2层	第3层	第1层	第2层	第3层	
0	20	50	100	120	120	120	6.0
1	25	60	110	120	120	120	6.0
2	20	50	100	135	135	135	6.0
3	20	50	100	120	120	120	6.5

使用训练得到的As掺杂和B掺杂硅势函数计

算全部数据集内所有纯硅结构的力和能量,并将预测值与数据集中原本的DFT计算得到的能量和力进行对比。图3(a)和(b)展示了能量的对比结果,可以看到与DFT计算得到的结果相比,As掺杂和B掺杂硅势函数预测纯硅结构的能量沿对角线分布,证明在训练集中加入掺杂硅结构后,训练得到的势函数仍能很好地预测纯硅体系的DFT计算能量。大部分结构的能量分布在 $-5.5\sim-4.5\text{eV/atom}$ 的范围内,并且势函数对于低能量结构表现出更好的预测效果。

图3(c)和(d)展示了As掺杂和B掺杂硅势函数对数据集中纯硅结构的受力预测结果与DFT计算结果比较。类似地,神经网络势函数预测结果同样沿对角线分布,说明在测试集结构受力方面,掺杂硅神经网络势函数也表现出很好的预测能力。也说明了在训练集加入掺杂硅的结构后,仍能保持对纯硅结构的预测精度,显示了训练集以及神经网络势函数的泛用性。

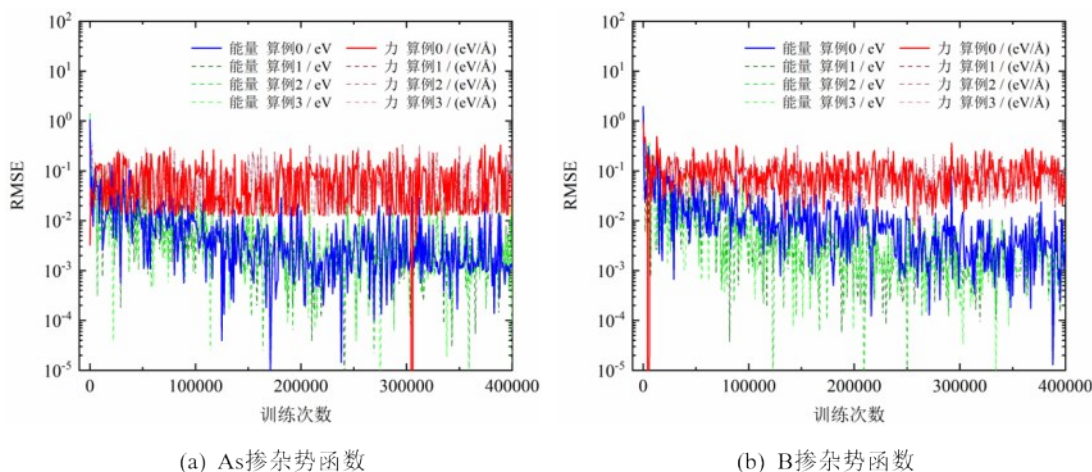


图2 能量与力的RMSE随训练次数的变化

Fig 2 Variation of RMSE of energy and force with the number of training steps

2.2 声子结构

声子态密度和声子色散曲线反映了机器学习势函数对硅热性质的计算精度。在验证神经网络

势函数之前,首先使用经验力场Stillinger-Weber势^[36]和Tersoff势^[37]计算硅的声子结构,并与Cruz等人^[38]的工作进行比较。如图4(a)、(b)所示,即使超

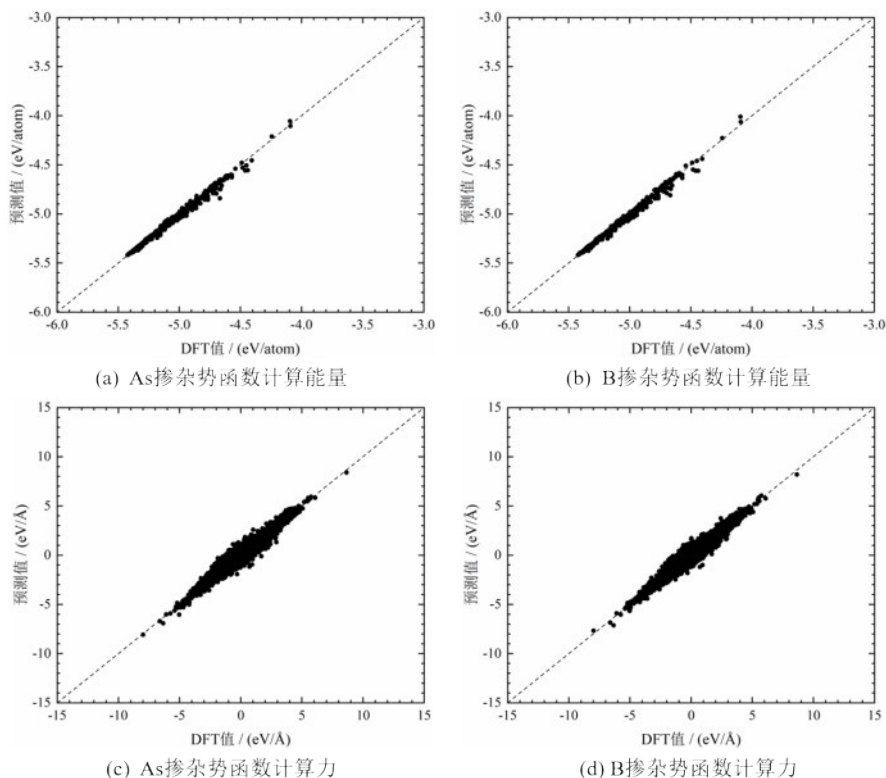


图3 机器学习势函数计算数据集中纯硅结构的能量和力结果与DFT计算结果的对比

Fig 3 Comparison of the energy and force results of silicon structures predicted by the machine learning potentials with the training data from DFT

胞规模不同,在使用相同原子作用势函数的情况下,计算得到的声子色散曲线的声学支与Cruz的声

学支一致,证明模拟体系的原子规模合适,并且计算流程正确。

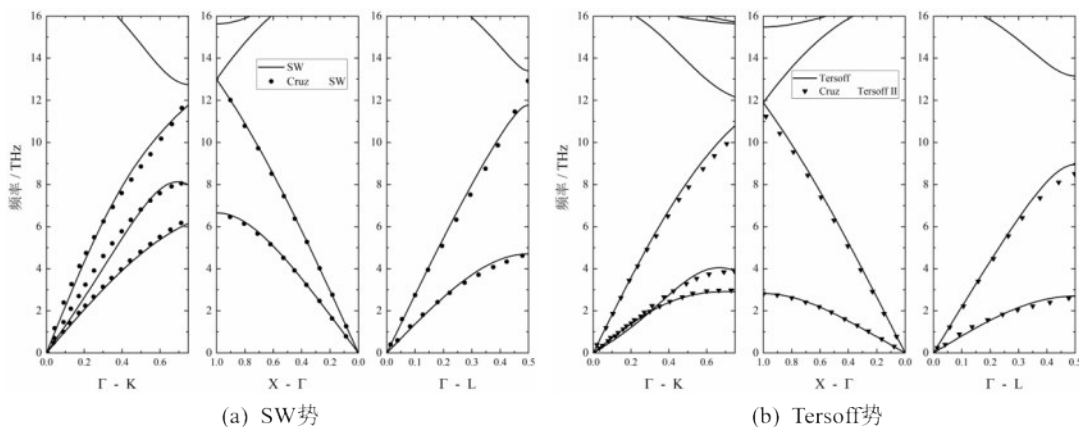


图4 传统原子间经验势函数计算Si声子色散曲线

Fig 4 Phonon dispersion curve of Si calculated by the traditional empirical interatomic potentials

对于DFT计算声子结构,分别使用有限移位法和密度泛函微扰理论(density-functional-perturbation theory, DFPT)对硅进行模拟,并与Cruz等人引用的实验结果^[39]进行比较。如图5所示,相较于DFPT方法,有限移位法与实验值的结果更一致,因此文中选用有限移位法的计算作为后续声子

态密度的参考结果。

基于上述的声子结构计算,使用As掺杂和B掺杂硅势函数计算了纯硅的声子色散曲线,结果如图6所示。可以发现,相较于传统的Tersoff势和SW势,神经网络势函数更接近实验结果,说明神经网络势函数能很好地反映硅晶胞的声子色散关系和

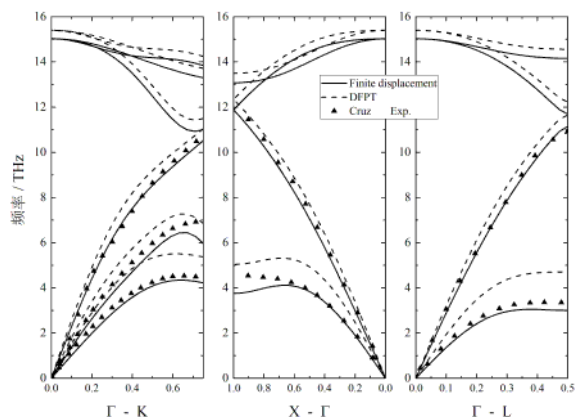
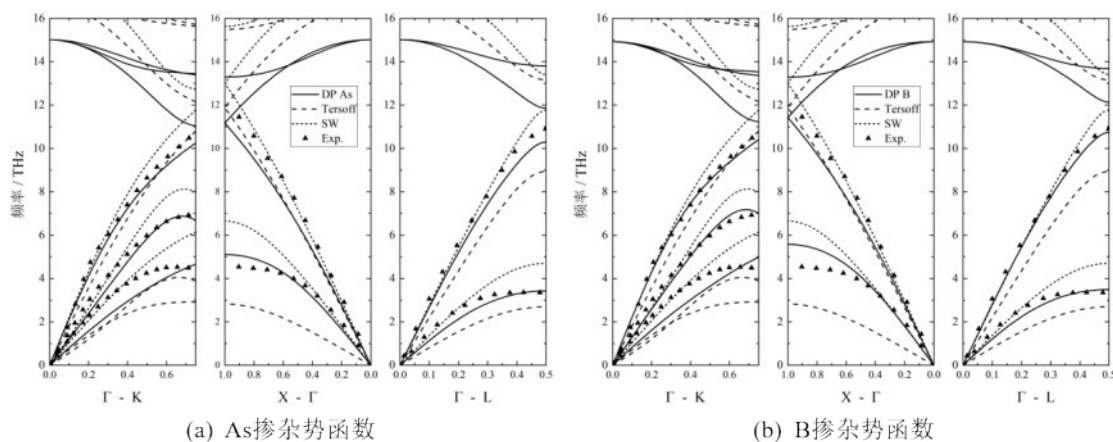


图5 DFT有限位移法与DFPT方法计算Si的声子色散曲线的比较

Fig 5 Comparison of the phonon dispersion curves of Si calculated by the DFT finite displacement method and the DFPT method

导热性质。通过色散曲线看出,神经网络势函数在高频区的声学支与实验值一致,但是在 $\Gamma-K$ 和 $X-\Gamma$ 的低频区的结果与势函数存在误差。如图7所示,通过测试不同高对称Q点采样数,发现不同的Q点采样密度计算得到的 $X-\Gamma$ 能带结构相同。由此可以认为低频区的误差不是由于声子计算的采样数不足,可能的原因是训练集沿该高对称Q点路径的样本结构不足,仍待进一步完善。

最后我们计算了体系的声子态密度函数,如图8所示,发现相较于SW势和Tersoff势,训练得到的DP势计算得到的声子态密度在峰位置和截止频率都更接近DFT的结果。结合声子色散曲线,说明掺杂硅机器学习势函数可以很好地反映硅的热性质。

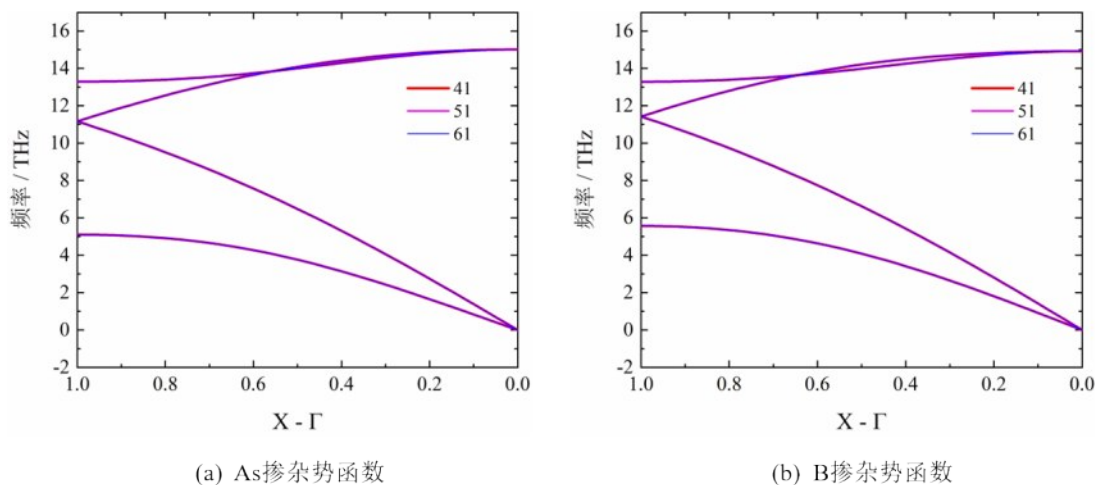


(a) As掺杂势函数

(b) B掺杂势函数

图6 掺杂硅神经网络势函数计算Si声子色散曲线

Fig 6 Si phonon dispersion curves calculated by doped silicon NNPs



(a) As掺杂势函数

(b) B掺杂势函数

图7 高对称Q点路径不同采样数对能带结构的影响

Fig 7 Influence of different sampling numbers along high-symmetry Q-point paths on the band structure

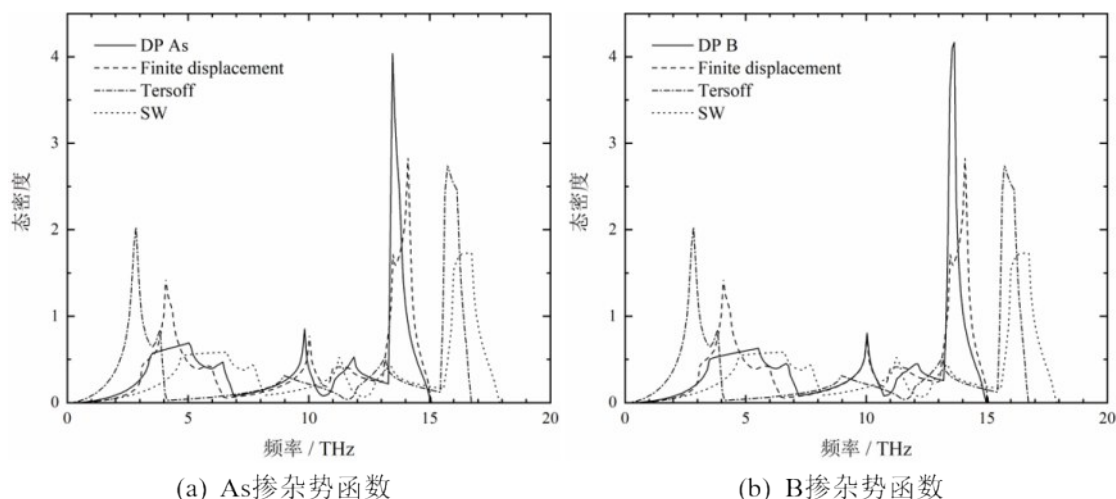


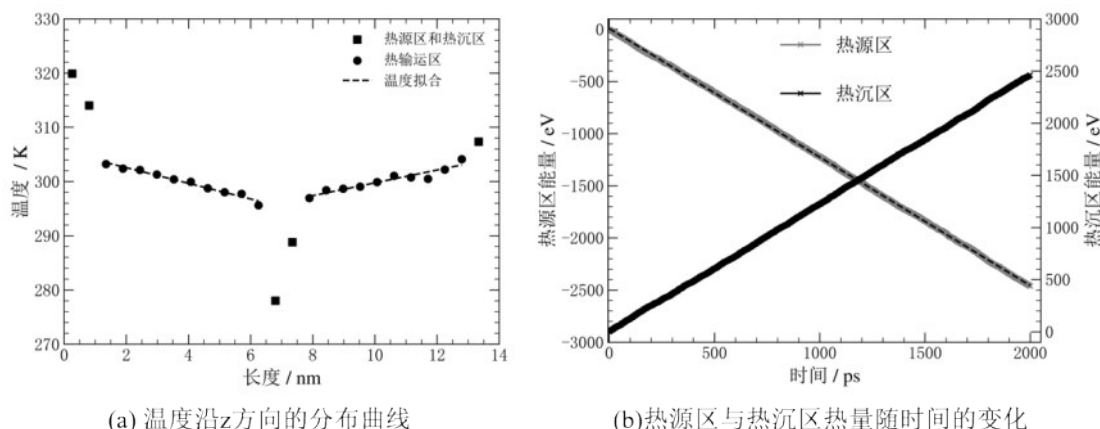
图8 掺杂硅机器学习势函数计算硅的声子态密度

Fig 8 Si phonon density of states calculated by doped NNPs

2.3 热导率

进一步通过NEMD方法,使用训练得到的掺杂硅势函数模拟了纯硅的热传输性质。在NEMD的模拟过程中,如果研究材料的声子平均自由程超过模拟尺寸时,模拟得到的热导率结果会存在明显的尺寸效应。因此,需要模拟不同长度尺寸系统的热导率,再通过外推法获得无限长体系的热导率^[40]。这里使用 $20 \times 20 \times 110 \text{ \AA}^3$, $20 \times 20 \times 130 \text{ \AA}^3$, $20 \times 20 \times 160 \text{ \AA}^3$, $20 \times 20 \times 200 \text{ \AA}^3$ 四种不同尺寸的纯硅系统进行分子动力学模拟。

以As掺杂硅势函数计算 $20 \times 20 \times 130 \text{ \AA}^3$ 模拟系统尺寸的李MD结果为例,模拟完成后的温度分布曲线与累积热量随时间的变化如图9所示。从图9(a)可以看出,由于热源区设置在z方向的底端,热沉区设置在体系中间,因此体系温度沿z方向形成了两个方向对称的线性分布曲线。从图9(b)可以看出,系统的累积热量随时间线性变化,说明传热过程的热通量稳定,可以使用傅里叶定律计算体系的热导率。

图9 神经网络势函数计算 $20 \times 20 \times 130 \text{ \AA}^3$ 纯Si模拟系统热导率Fig 9 Thermal conductivity of a $20 \times 20 \times 130 \text{ \AA}^3$ pure Si simulation system calculated by NNPs

As掺杂硅势函数与B掺杂硅势函数不同尺寸模拟体系的热导率的倒数与模型尺寸大小的关系如图10所示,其中, L 为热导率计算模拟时模型热源与冷源之间的距离。对于每种尺寸的模拟体系,使用不同的随机种子赋予原子初速度,分别进行4组

独立模拟计算热导率倒数的平均值。使用线性外推法,得到对应掺杂硅势函数下无限长硅晶胞的热导率。

热导率计算结果与已报道的实验和模拟值列于表2中^[25-26,41-43]。从表格中可以看出,与模拟温度

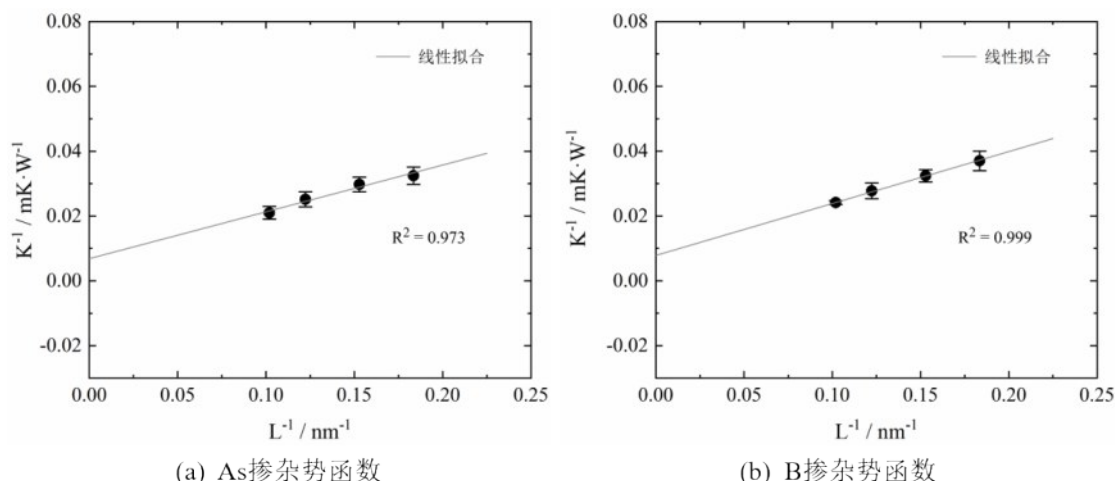


图 10 不同尺寸模拟体系的热导率倒数与模拟尺寸倒数的关系

Fig 10 Relationship between the reciprocal of thermal conductivity and the reciprocal of simulation size in different-sized simulation systems

同为 300K 的文献^[43]结果相比,As 掺杂硅势函数计算得到的硅热导率结果更接近实验测量,具有更高的精度,但是 B 掺杂硅势函数计算得到的硅热导率模拟结果与实验存在一定偏差。可能的原因是,在训练神经网络模型时,数据集仍需进一步优化。此外,目前文献报道的结果中,许多实验制备的样品中可能包含空穴、晶界、杂质等缺陷,导致计算结果与实验结果存在差异。

表 2 神经网络势函数计算硅热导率与已报道的结果比较

Table 2 Comparison of silicon thermal conductivity calculated by the neural network potential functions with the reported results

势函数类型	热导率计算结果 W/mK	实验值 W/mK	模拟值 W/mK
As 掺杂硅势函数	146.20	$\approx 150^{[41-42]}$	$136.65^{[43]}$, $\approx 125^{[25]}$
B 掺杂硅势函数	127.88		$\approx 150^{[26]}$

3 结 论

本文构建了基于深度神经网络的 As 掺杂和 B 掺杂硅势函数,并对硅的声子结构特征与热导率进行了计算模拟。首先,在已有开源硅数据集的基础上,选取了部分结构进行随机掺杂,并对所有结构进行了第一性原理计算以获得包含掺杂结构的硅训练集。基于该训练集采用主动学习的方式训练得到硅势函数,并对稳定性和准确性进行了一系列测试。然后对机器学习势函数进行硅声子结构计算,证明其相较传统经验势函数能更好地描述硅的

热性质。最后结合 NEMD 方法计算了硅的热导率,结果与已报道的工作接近。

神经网络势函数在热物性计算的过程中,既保证了计算精度与 DFT 相当,也为半导体器件中大规模低掺杂体系的模拟提供了可能。同时,对于高温、多缺陷、多掺杂共存的模拟场景,训练集涵盖的数据结构需要扩充和完善以提升模拟的精度,否则可能会影响计算的准确性。但增强训练集的采样结构数量也会增加训练的时间和成本。在未来的工作中,会考虑将 As 掺杂和 B 掺杂的训练集进行整合,以得到同时适用于 N 型半导体和 P 型半导体的机器学习势函数。

符 号 说 明

E_i ——原子 i 的能量

F_i ——原子 i 的受力

N ——体系原子数

R_i ——原子 i 的位置矢量

α_E ——能量损失的组合系数

α_F ——力损失的组合系数

α_ξ ——维里张量损失的组合系数

ξ ——维里张量,表达式为 $-\frac{1}{2} \sum_i R_i \otimes F_i$

下角标

i——原子序号

参考文献

- [1] Oyake T, Feng L, Shiga T, et al. Ultimate confinement of phonon propagation in silicon nanocrystalline structure[J]. Physical

- Review Letters, 2018, **120**(4): 045901.
- [2] Uma S, McConnell A D, Asheghi M, et al. Temperature-dependent thermal conductivity of undoped polycrystalline silicon layers[J]. International Journal of Thermophysics, 2001, **22**(2): 605–616.
- [3] Schelling P K, Shi L, Goodson K E. Managing heat for electronics[J]. Materials Today, 2005, **8**(6): 30–35.
- [4] Pop E. Energy dissipation and transport in nanoscale devices[J]. Nano Research, 2010, **3**(3): 147–169.
- [5] Moore A L, Shi L. Emerging challenges and materials for thermal management of electronics[J]. Materials Today, 2014, **17**(4): 163–174.
- [6] Liebchen R, Breitschädel O, Durmaz A R, et al. Thermal characterization of epitaxial grown polycrystalline silicon[J]. Thin Solid Films, 2016, **606**: 99–105.
- [7] Lindsay L, Broido D A, Reinecke T L. Thermal conductivity and large isotope effect in GaN from first principles[J]. Physical Review Letters, 2012, **109**(9): 095901.
- [8] Xu J, Liu J B, Li S N, et al. Self-healing properties of nanocrystalline materials: a first-principles analysis of the role of grain boundaries[J]. Physical Chemistry Chemical Physics, 2016, **18**(27): 17930–17940.
- [9] Wang J, Cheng J T, Ma S Y, et al. Adsorption of self-assembled monolayer on Cu(111): First-principles study[J]. Modern Physics Letters B, 2017, **31**(24): 1750198.
- [10] Qiu B, Wang Y, Zhao Q, et al. The effects of diameter and chirality in the thermal transport in free-standing and supported carbon-nanotubes[C]//ASME 2012 Third International Conference on Micro/Nanoscale Heat and Mass Transfer, March 3–6, 2012, Atlanta, Georgia, USA. 2013: 633–638.
- [11] Zhu L L, Luo H N. Phonon properties and thermal conductivity of GaN nanofilm under prestress and surface/interface stress[J]. Journal of Alloys and Compounds, 2016, **685**: 619–625.
- [12] Su R X, Zhang X. Size effect of thermal conductivity in monolayer graphene[J]. Applied Thermal Engineering, 2018, **144**: 488–494.
- [13] Mortazavi B, Zhuang X Y, Rabczuk T, et al. Atomistic modeling of the mechanical properties: the rise of machine learning interatomic potentials[J]. Materials Horizons, 2023, **10**(6): 1956–1968.
- [14] Unke O T, Stöhr M, Ganscha S, et al. Biomolecular dynamics with machine-learned quantum-mechanical force fields trained on diverse chemical fragments[J]. Science Advances, 2024, **10**(14): eadn4397.
- [15] Zhang S H, Makoś M Z, Jadrich R B, et al. Exploring the frontiers of condensed-phase chemistry with a general reactive machine learning potential[J]. Nature Chemistry, 2024, **16**(5): 727–734.
- [16] Pfau D, Axelrod S, Sutterud H, et al. Accurate computation of quantum excited states with neural networks[J]. Science, 2024, **385**(6711): eadn0137.
- [17] Wei M Q, Zhang G Q, Zhou T T, et al. Atomic-scale insights into hydrogen transport at tungsten grain boundaries with machine learning potentials[J]. International Journal of Hydrogen Energy, 2026, **200**: 152835.
- [18] Behler J, Parrinello M. Generalized neural-network representation of high-dimensional potential-energy surfaces[J]. Physical Review Letters, 2007, **98**(14): 146401.
- [19] Artrith N, Urban A. An implementation of artificial neural-network potentials for atomistic materials simulations: Performance for TiO₂[J]. Computational Materials Science, 2016, **114**: 135–150.
- [20] Artrith N, Urban A, Ceder G. Efficient and accurate machine-learning interpolation of atomic energies in compositions with many species[J]. Physical Review B, 2017, **96**: 014112.
- [21] Wang H, Zhang L F, Han J Q, et al. DeePMD-kit: a deep learning package for many-body potential energy representation and molecular dynamics[J]. Computer Physics Communications, 2018, **228**: 178–184.
- [22] Wen M J, Afshar Y, Elliott R S, et al. KLIFF: a framework to develop physics-based and machine learning interatomic potentials[J]. Computer Physics Communications, 2022, **272**: 108218.
- [23] Fan Z Y, Wang Y Z, Ying P H, et al. GPUMD: a package for constructing accurate machine-learned potentials and performing highly efficient atomistic simulations[J]. The Journal of Chemical Physics, 2022, **157**(11): 114801.
- [24] Behler J. Four generations of high-dimensional neural network potentials[J]. Chemical Reviews, 2021, **121**(16): 10037–10072.
- [25] Babaei H, Guo R Q, Hashemi A, et al. Machine-learning-based interatomic potential for phonon transport in perfect crystalline Si and crystalline Si with vacancies[J]. Physical Review Materials, 2019, **3**(7): 074603.
- [26] Li R, Lee E, Luo T. A unified deep neural network potential capable of predicting thermal conductivity of silicon in different phases[J]. Materials Today Physics, 2020, **12**: 100181.
- [27] Bartók A P, Kermode J, Bernstein N, et al. Machine learning a general-purpose interatomic potential for silicon[J]. Physical Review X, 2018, **8**(4): 041048.
- [28] Blöchl P E. Projector augmented-wave method[J]. Physical Review B, 1994, **50**(24): 17953–17979.
- [29] Kresse G, Furthmüller J. Efficient iterative schemes for ab initio total-energy calculations using a plane-wave basis set[J]. Physical Review B, 1996, **54**(16): 11169–11186.
- [30] Kresse G, Furthmüller J. Efficiency of ab-initio total energy calculations for metals and semiconductors using a plane-wave basis set[J]. Computational Materials Science, 1996, **6**(1): 15–50.
- [31] Perdew J P, Ernzerhof M, Burke K. Rationale for mixing exact exchange with density functional approximations[J]. The Journal of Chemical Physics, 1996, **105**(22): 9982–9985.
- [32] Kresse G, Joubert D. From ultrasoft pseudopotentials to the projector augmented-wave method[J]. Physical Review B, 1999, **59**(3): 1758–1775.
- [33] Togo A, Chaput L, Tadano T, et al. Implementation strategies in phonopy and phono3py[J]. Journal of Physics: Condensed Matter, 2023, **35**(35): 353001.
- [34] Togo A. First-principles phonon calculations with phonopy and phono3py[J]. Journal of the Physical Society of Japan, 2023, **92**: 012001.
- [35] Thompson A P, Aktulga H M, Berger R, et al. LAMMPS – a flexible simulation tool for particle-based materials modeling at the atomic, meso, and continuum scales[J]. Computer Physics Communications, 2022, **271**: 108171.
- [36] Stillinger F H, Weber T A. Computer simulation of local order in condensed phases of silicon[J]. Physical Review B, 1985, **31**(8): 5262–5271.

- [37] Tersoff J. New empirical approach for the structure and energy of covalent systems[J]. Physical Review B, 1988, **37**(12): 6991–7000.
- [38] Abs da Cruz C, Termentzidis K, Chantrenne P, et al. Molecular dynamics simulations for the prediction of thermal conductivity of bulk silicon and silicon nanowires: Influence of interatomic potentials and boundary conditions[J]. Journal of Applied Physics, 2011, **110**(3): 034309.
- [39] Flensburg C, Stewart R F. Lattice dynamical Debye–Waller factor for silicon[J]. Physical Review B, 1999, **60**(1): 284–291.
- [40] Lee Y, Hwang G S. Force–matching–based parameterization of the Stillinger–Weber potential for thermal conduction in silicon [J]. Physical Review B, 2012, **85**(12): 125204.
- [41] Glassbrenner C J, Slack G A. Thermal conductivity of silicon and germanium from 3° K to the melting point[J]. Physical Review, 1964, **134**(4A): A1058–A1069.
- [42] Fulkerson W, Moore J P, Williams R K, et al. Thermal conductivity, electrical resistivity, and seebeck coefficient of silicon from 100 to 1300° K[J]. Physical Review, 1968, **167**(3): 765–782.
- [43] Lee Y, Hwang G S. Mechanism of thermal conductivity suppression in doped silicon studied with nonequilibrium molecular dynamics[J]. Physical Review B, 2012, **86**(7): 075202.