

利用第一性原理方法研究材料的机械、热力学和磁性等性质

第一性原理计算(the first-principles calculation), 又称为从头算(the ab-initio calculation), 是指从所研究材料的原子组分开始, 运用量子力学及其它基本物理规律通过自洽计算来确定材料的几何结构、电子结构、力学热学性质和光学性质等材料物性的方法。第一性原理计算采用“非经验”处理方法, 只用5个基本物理常量 m_0 、 e 、 h 、 c 、 k_B 以及元素周期表中各组分元素的电子结构, 就可以合理地预测材料的许多物理性质。因此, 第一性原理计算可以称得上真正意义的预测。虽然它无需经验参数却可以达到很高的精度:用第一性原理计算的晶胞大小和实验值只差几个百分点, 其它性质也和实验很好地吻合, 体现了该理论的正确性。第一性原理计算同分子动力学相结合, 已经越来越多地被应用到固体、表面、材料设计、合成、模拟计算、大分子和生物体系等诸多方面的研究中, 并获得许多突破性的进展。随着计算机计算能力日新月异地增强, 它已经成为计算材料科学的重要基础和核心技术。

本小组利用第一性原理方法研究了互连界面金属间化合物、MAX化合物及氧化物半导体材料的机械、热动力学和磁学特性, 并分析了产生相应特性的物理本质, 为上述材料的工程应用提供了理论指导。

1、在微电子互连领域, Pt金属层作为传统Au/Ni/Cu焊盘下金属化层的替代材料之一正引起该领域研究学者的广泛关注。为研究Sn基焊料与Pt金属层互连界面的连接可靠性问题, 本小组利用第一性原理计算方法分析了已在实验中观察到的五种Pt-Sn金属间化合物(图1)的热力学(图2)和弹性特性(图3, 4)。计算结果显示了五种Pt-Sn金属间化合物的稳定程度和弹性各向异性行为。此外, 我们通过电子结构分析了上述金属间化合物弹性行为的起源(图5)。(该研究成果已发表在Computational Materials Science上)

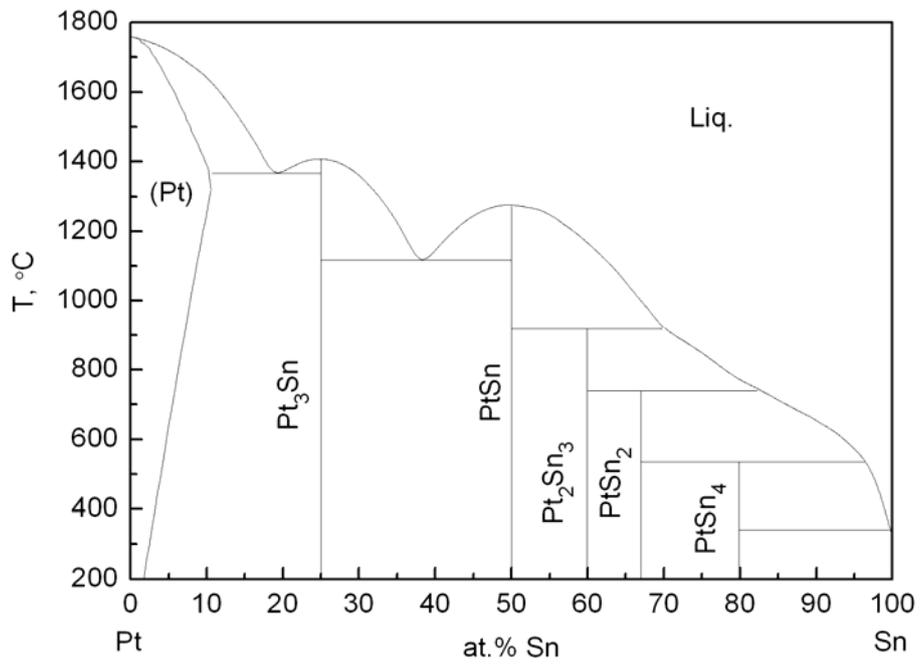


图1: Pt-Sn 相图

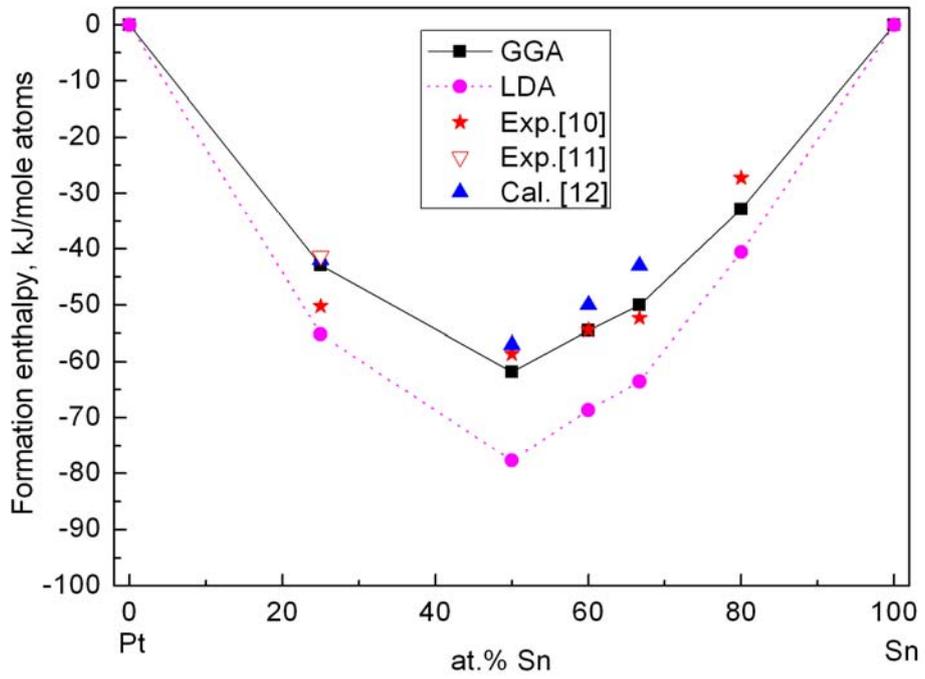


图2: Pt-Sn金属间化合物形成焓

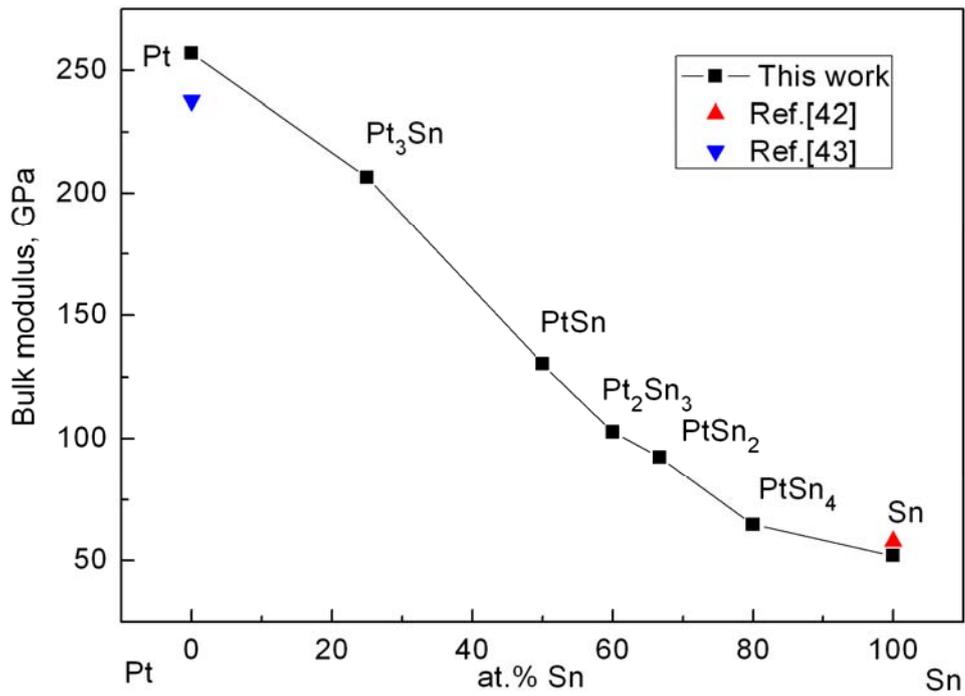


图3: 图 2 Pt-Sn金属间化合物体模量

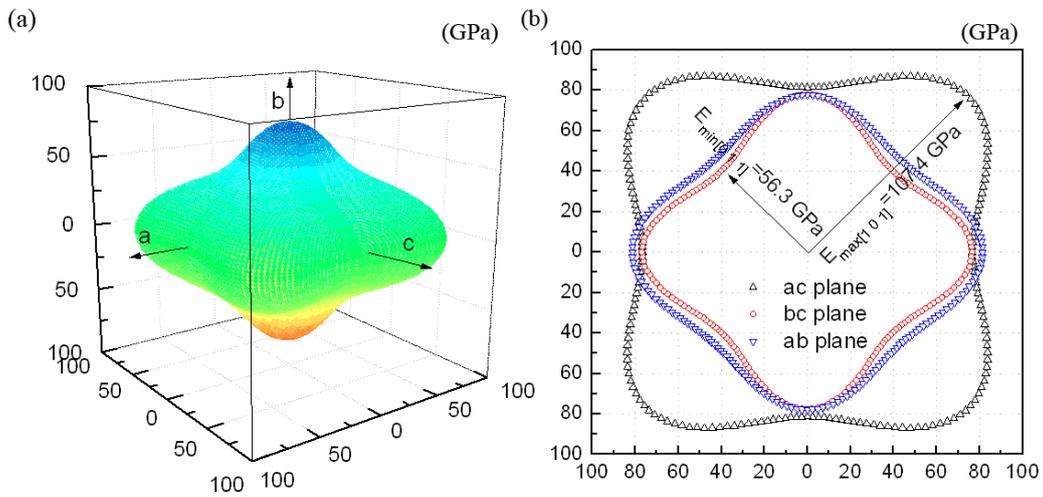


图4: PtSn₄金属间化合物杨氏模量三维空间分布

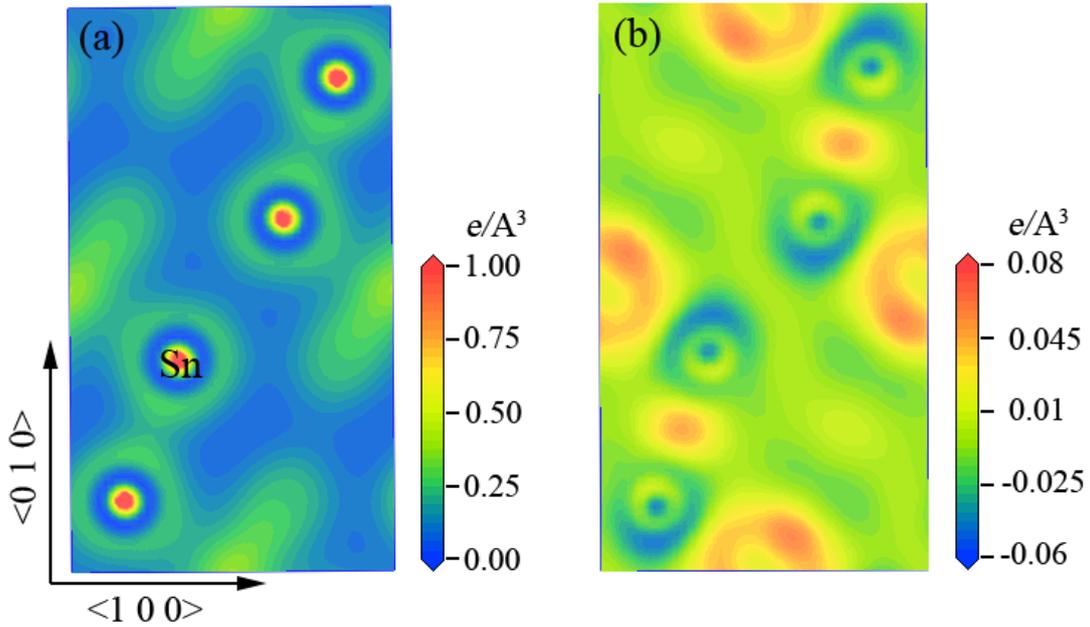


图5: PtSn₄金属间化合物电荷密度分布

2、Cu₆Sn₅和Cu₅Zn₈金属间化合物的热力学、弹性及电子特性

Cu₆Sn₅和Cu₅Zn₈是目前微电子封装领域Sn基互连焊点界面的主要金属间化合物成分，其热力学及弹性特性直接关系到微电子期间的使用可靠性。本小组利用第一性原理计算方法结合准简谐德拜模型分析了两种金属间化合物的弹性行为（图1）及其电子起源（图2），同时预测了上述金属间化合物的比热（图3）、德拜温度和热膨胀系数等随温度变化关系，为工程领域准确预测互连焊点时效机制提供了充足的理论依据。（该研究成果已发表在Intermetallics上）

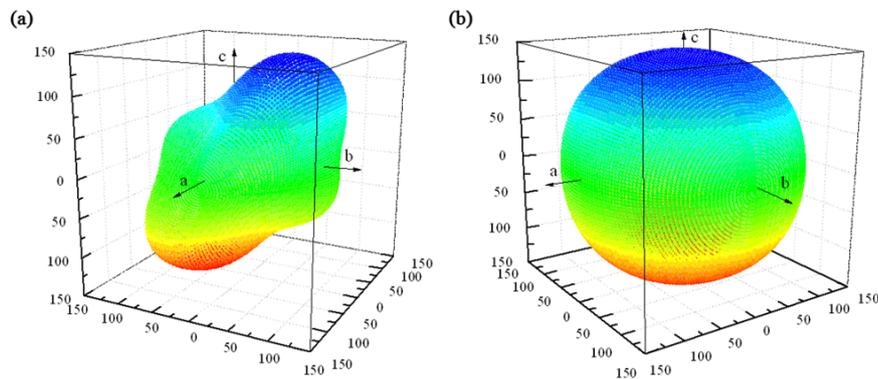


图1: Cu₆Sn₅和Cu₅Zn₈ 杨氏模量空间分布

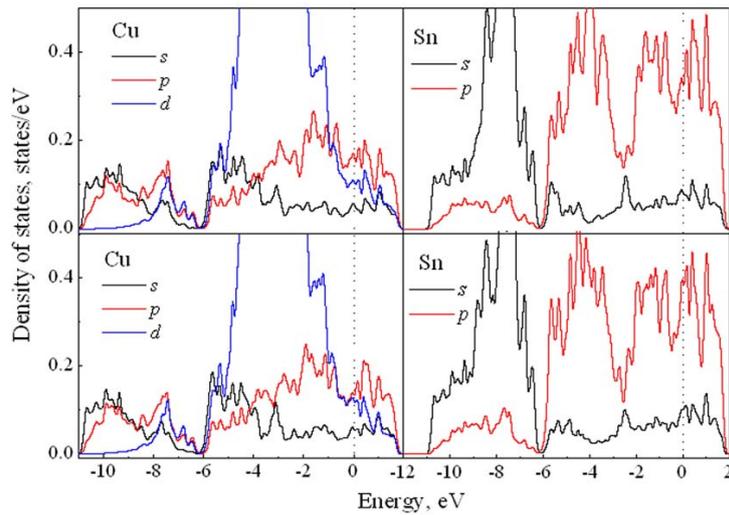


图2: Cu_6Sn_5 金属间化合物的能态密度

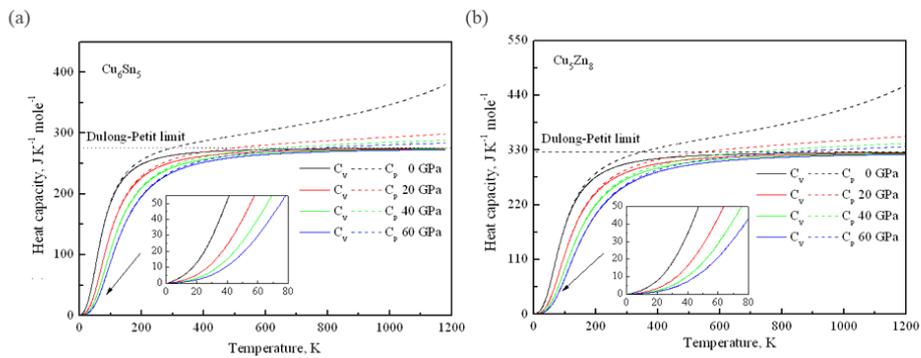


图3: Cu_6Sn_5 和 Cu_5Zn_8 的比热随温度变化关系

3、 Cr_2GeC 化合物的结构、热动力学、弹性和磁性能研究

有于优良的机械性能和热稳定性等特点，MAX相化合物受到人们的普遍关注。本小组利用第一性原理计算方法结合准简谐德拜模型研究了 Cr_2GeC 化合物的结构（图1）、热动力学（图2）、弹性和磁学特性（图3），并深入探讨了上述特性的电子本构起源（图4），为后续对MAX相化合物的实验和理论研究提供了依据。（该研究成果已发表在Journal of Applied Physics上）

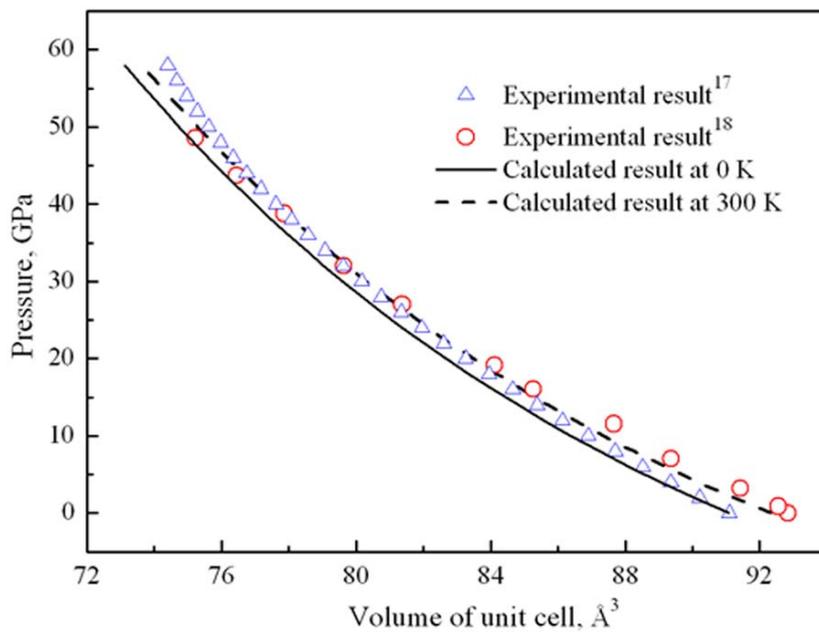


图1: 晶胞体积随压强变化关系

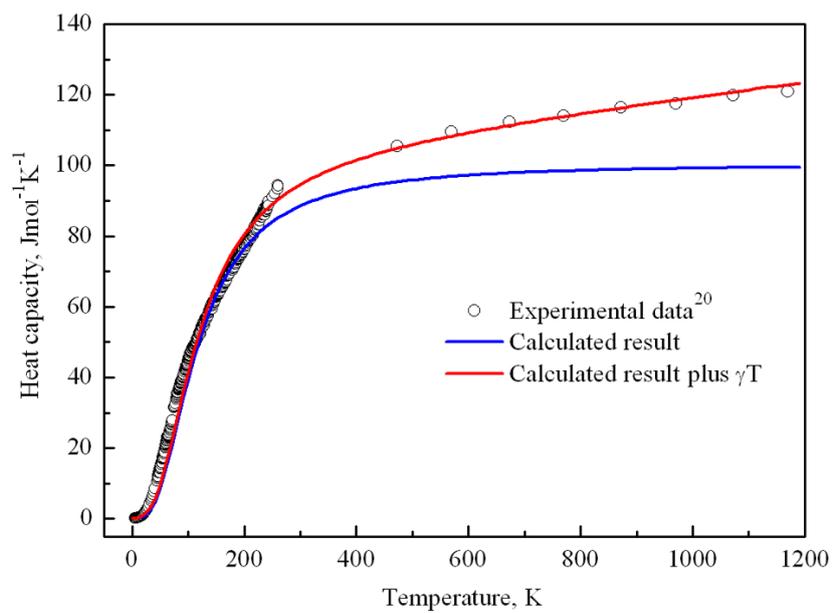


图2: 比热随温度变化关系

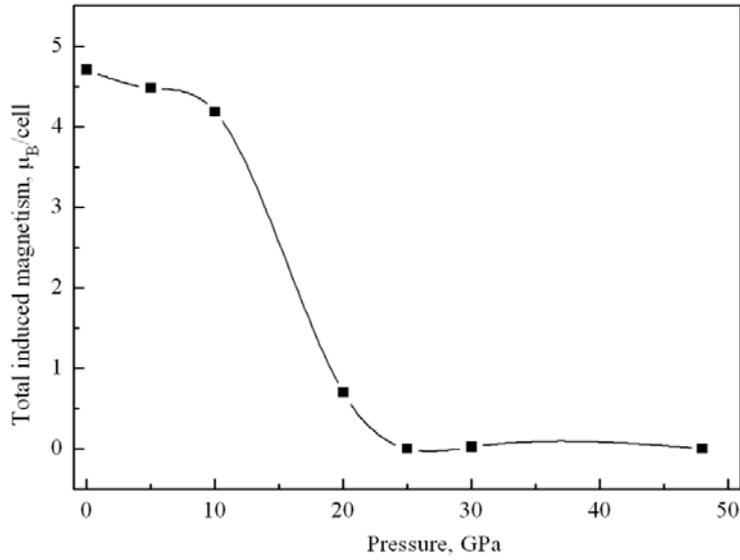


图3: Cr₂GeC净磁矩随压强变化关系

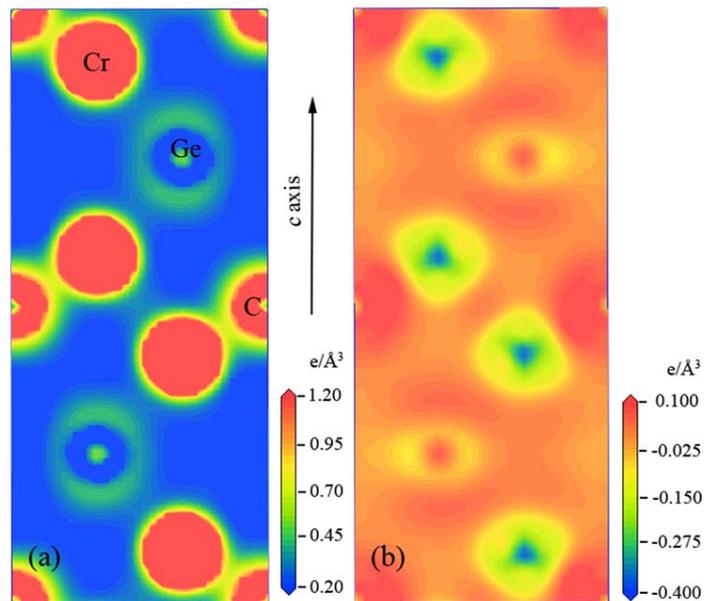


图4: Cr₂GeC电荷密度分布情况

4、SnO₂体系掺杂非磁性离子引起的磁性研究

SnO₂作为一种宽禁带氧化物半导体而被广泛应用于电子工业领域。近来，人们在探求通过掺杂能否在这种优良的半导体材料中实现室温铁磁性，从而使其能够应用在未来的自旋电子期间中。本小组利用第一性原理的方法研究了非磁性元素K掺杂的SnO₂体系，计算结果发现通过掺杂可以在SnO₂体系中实现室温铁磁

性（图1， 2）。同时，我们分析了K掺杂的SnO₂体系的磁耦合机制，发现以空穴为媒介的RKKY相互作用行为是该研究体系铁磁有序的主要机制（图3）。该研究结果为SnO₂体系的自旋电子学应用提供了新的方向。（该研究成果已发表在Journal of Magnetism and Magnetic Materials上）

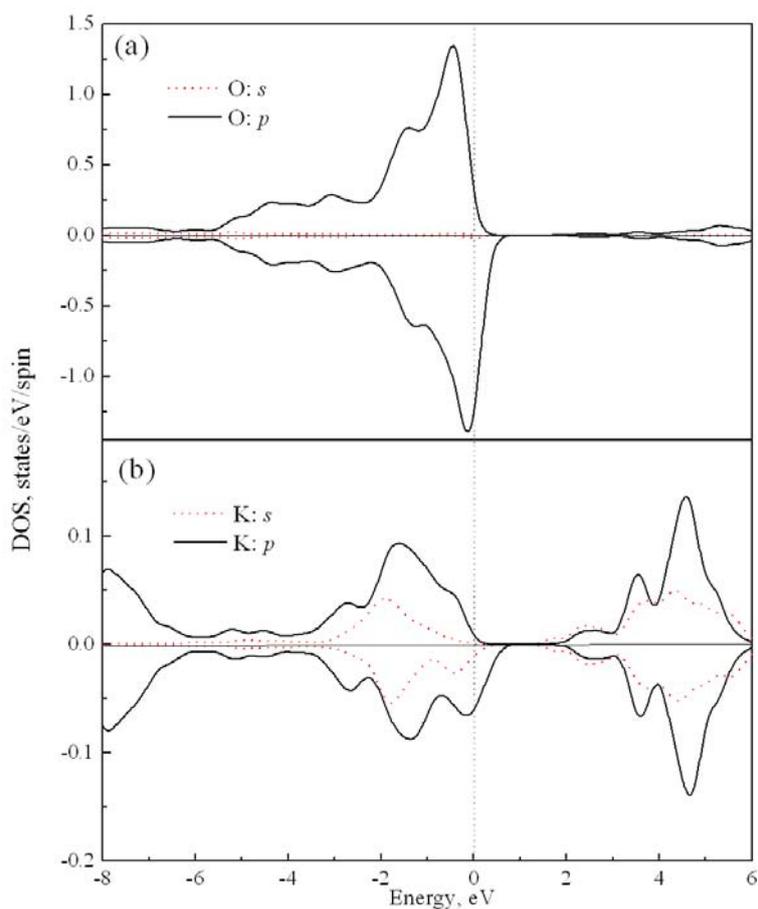


图1: K掺杂的SnO₂体系的能态密度

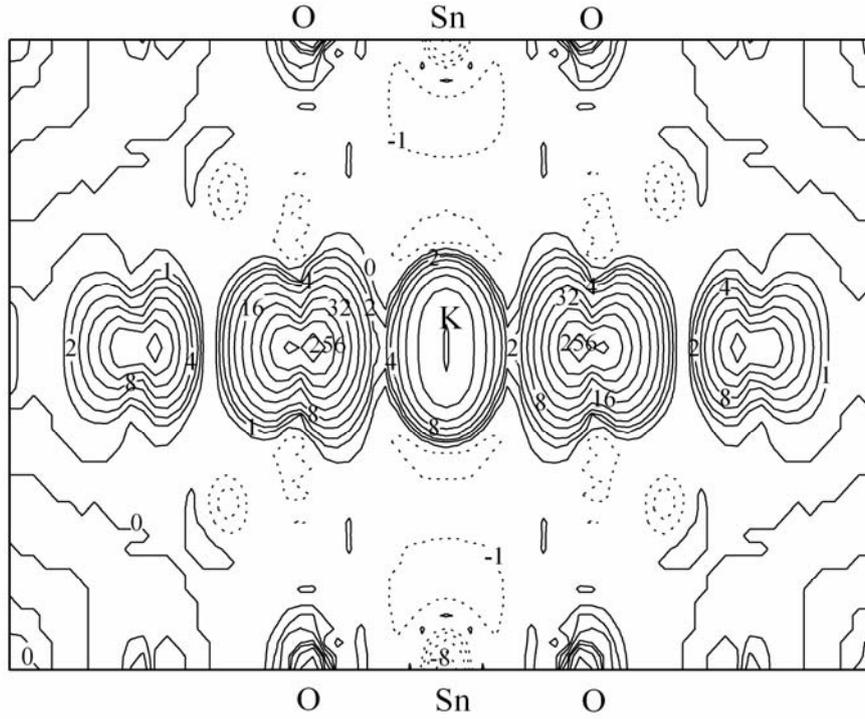


图2: K掺杂的SnO₂体系的自旋密度分布情况

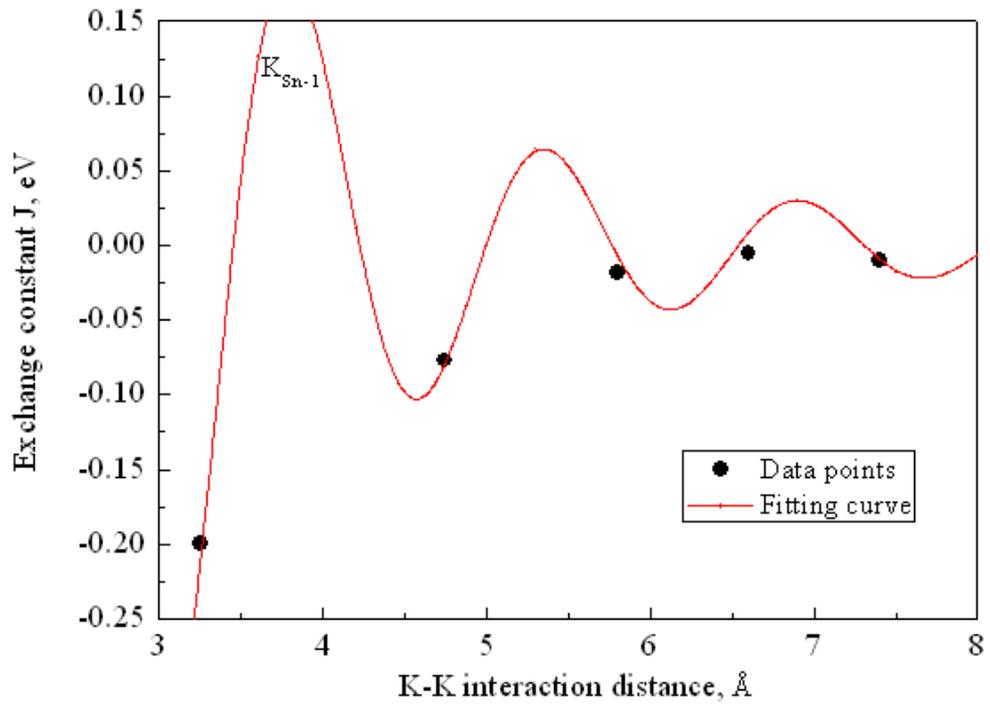


图3: K掺杂的SnO₂体系的磁交换作用强度随相互作用距离变化的关系