

qzj 还没想好题目

邱子杰 黄佳炜

(福州大学 物理与信息工程学院、微电子学院)

摘 要

子杰是吊毛

关键词: Ca_2Ge 、电子结构、第一性原理、p 型掺杂

1 引言

地球上 Si 的储量较大, 半导体 Si 的制备工艺成熟, 使得 Si 被广泛运用于光电和热电、电子器件以及生物成像等领域。但随着科技技术的发展, 对电子功能材料和电子设备性能要求不断提高, Si 的空穴和电子迁移速度相对较小, 不能满足高性能半导体器件要求。同族元素 Ge 与 Si 相比, 其空穴迁移速度是 Si 的 4 倍, 电子迁移速度是 Si 的 2 倍, 且具有较大的激子波尔半径和明显的量子限域效应 (例如尺寸依赖的荧光特性), 是实现下一代高性能半导体器件的关键材料。 Ca_2Ge 作为一种新型的半导体材料可满足 Ge 的半导体特性, 能够稳定的存在, 并能在 Ge 基上外延生长, 且晶格失配率小, 同时具有高的载流子迁移率、低的介电常数、优异的光学、电学性质等物性^[1-3]。基于 Ca_2Ge 化合物材料的优异特性, 理论上能够满足人类对电子器件存储信息的密度、电路芯片集成度、信息运算和储存速度的高要求, 即电子器件满足高集成、多功能和小尺寸的应用要求, 在高速、低功耗、信息记录和信息处理器件方面具有潜在的应用价值, 在未来的信息时代会得到更广泛的研究和应用。

根据现有文献, Ca_2Ge 研究内容主要集中在电子结构、光电特性和结构稳定性, Migas 等^[3]在 2003 年采用了第一性原理研究了立方相和正交相 Ca_2Ge 的能带结构和光电特性, 结果得到立方相 Ca_2Ge 为直接型带隙半导体材料, 并在高对称点 X 处取得

0.60 eV 的带隙值, 晶格常数为 0.7197 nm, 原胞体积为 0.0932 nm³, 正交相 Ca₂Ge 的研究结果同样表明其为直接型带隙半导体, 并在 Γ 点取得 0.37 eV 的最小带隙值, 与正交相相比, 立方相具有更好的抗辐射能力, 正交相和立方相的光学特性主要都是由 Ge 原子的 p 态电子向 Ca 原子 3d 态电子转移而产生的。在 2010 年, Yang 等^[4] 也采用了第一性原理方法对 Ca-X(X=Si,Ge,Sn,Pb) 的电子结构和生成特性进行了研究, 研究结果得到正交相 Ca₂Ge 是带隙值为 0.265 eV 的直接带隙半导体。Tani 等^[5] 在 2015 年研究了 Ca₂Ge 的晶格振动的色散关系, 研究表明了 Ca₂Ge 结构体系中, 其声子振动在低能区频率大于 Ca₂Si, 说明了 Ca₂Ge 在低能耗半导体器件具有更好的应用前景. 本文主要

2 计算模型和计算方法

3 结果与讨论

4 结论