

本文创新点如下:

1. ****

2. ****

批注 [sj1]: 自诉本文创新点, 方便领域专家审阅

Al_xGa_{1-x}N 氮化物结构和热力学性质的 第一性原理研究

(题目应简明、准确, 不宜用缩略词, 一般不超过 25 个字, 2 号小标宋)

李 涛^{1,2}, 宋 强^{3,4}, 苏纪豪^{1,2,4}, 许编辑³

(准确书写作者姓名, 按对论文贡献大小排序, 作者单位上标序号要按顺序出现, 4 号楷体)

(1.中国科学院上海硅酸盐研究所, 上海 200050; 2.中国科学院大学材料与光电研究中心, 北京 100049;

3.南京航空航天大学航天学院, 南京 211106)

(院校单位名称具体到二级学院, 后附城市名和单位邮编, 中英文一致, 多个单位按顺序 1, 2...标出, 6 号书宋)

摘 要 (小 5 黑): 为了掌握III族氮化物微观结构对热力学性能的影响规律, 进而为超高功率器件的设计提供数据支持, 本文借助第一性原理计算软件 CASTEP, 对半导体 Al_xGa_{1-x}N 不同合金结构及其热性能进行了系统研究。结构优化和数据分析后发现, Al_xGa_{1-x}N 的晶格常数、平均键长和晶格热容值随 Al 组分值 x (原子数分数) 增大而线性减小。热力学性质计算结果表明, 在 GaN 中引入 Al 组分会在频率带隙中引入杂质模, 随着 Al 组分浓度的增加杂质模变宽并进入低频段, 在低频段顶部频率随 Al 组分增大而线性升高, 在 12.5%以上低频段顶部频率均大于 (1/2)A₁(LO)。温度从 300 K 到 700 K 变化时, 合金热容随温度变化关系结果证明, 在确定温度时, Al_xGa_{1-x}N 合金热容随 Al 组分增大而线性减小。本文的研究为以 Al_xGa_{1-x}N 为代表的III族氮化物半导体高功率器件设计提供了一定的设计参考。

(小 5 号书宋, 单倍行距, 包括研究目的、方法、主要结果和结论等, 篇幅 300~500 字)

关键词: III族氮化物; 高功率器件; 色散关系; 热力学性质; 第一性原理; 密度泛函理论; Al_xGa_{1-x}N

(关键词 6~8 个, 应能准确反映文章主要内容, 按照重要性顺序排列)

中图分类号: TB34/O469 (可参考网站 <https://ztlh.xhma.com/>, 准确书写本文所属学科分类号)

First-Principle Study on Structure and Thermodynamics Properties of Al_xGa_{1-x}N Nitride

(英文题目实词首字母大写, 4 号 Times New Roman)

LI Tao^{1,2}, SONG Qiang^{3,4}, SU Jihao^{1,2,4}, XU Bianji³

(英文作者姓名, 5 号, Times New Roman)

(1. Shanghai Institute of Ceramics, Chinese Academy of Sciences, Shanghai 200050, China;
2. Center of Materials Science and Optoelectronics Engineering, University of Chinese Academy of Sciences,
Beijing 100049, China;
3. College of Astronautics, Nanjing University of Aeronautics and Astronautics, Nanjing 211106, China)

(英文单位名称一般从小到大大中文对照书写, 小 5 号 Times New Roman)

Abstract: (5 号, Times New Roman, 单倍行距) With the help of CASTEP first principles calculations,

收稿日期: 202x-xx-xx

基金项目 (6 号黑体): (6 号书宋) 国家自然科学基金(20183356); 上海市科技创新重点项目 (Y74ZC5152G) (写明相关基金项目全称及批准号)

作者简介: 李涛 (1993—), 男, 山东省人, 硕士研究生。E-mail: 121075@qq.com

(学历书写格式: 在读硕、博士写“**研究生”; 已毕业获得学位的直接写“硕士”或“博士”, 有职称的在学历后补充职称)

通信作者: 许编辑, 博士, 教授。E-mail: xu-bianji@163.com

批注 [sj2]: 作者、单位、邮编等信息请中英文保持一致

the different doping structures and thermal properties of the semiconductor $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ were carefully studied for better understanding the influence of the microstructure on the thermodynamic properties in group III nitrides, and then provide data support during the design processes of ultra high power devices. After the optimization of $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ structures, with the increase of Al composition (atomic fraction), the lattice constant, average bond length and lattice heat capacity linearly decreases. The calculation of properties results indicate that the introduction of Al component in GaN will introduce an impurity mode in the frequency band gap. As the concentration of Al component increases, the impurity mode widens and enters the low frequency range. The top frequency of the low frequency band increases with the increase of Al composition, and the top frequency of the low frequency band above 12.5% is larger than $(1/2)\text{A}_1(\text{LO})$. From 300 K to 700 K, at the fixed temperature, with the increase of Al composition, the heat capacity of $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ alloy linearly decreases. The result in this paper provides a useful reference for the design of III nitride semiconductor high power devices, such as $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$.

(英文摘要 180 个词汇以上, 尽量使用被动语态, 对实验过程描述采用过去时, 对结论描述采用一般现在时, 可在中文摘要基础上扩充, 但一定要涵盖中文摘要内容, 注意数据等信息与中文摘要及正文保持一致)

Key words: III nitride; high power device; phonon dispersion; thermodynamic property; first principle; density functional theory; $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ (关键词用单数形式)

0 引言 (一级标题, 4号, 中文仿宋、英文 Times New Roman 字体)

(正文, 5号, 中文宋体、英文 Times New Roman 字体, 单倍行距)

二十世纪五六十年代, 硅作为第一代半导体材料开始被广泛应用于各种电子器件, 掀开了信息工业革命的篇章, 且作为主要半导体材料一直应用至今; 到二十世纪九十年代, 出现了以砷化镓(GaAs)、磷化镓(GaP)、砷化铝(AlAs)及其合金为代表的第二代半导体材料, 具有良好的高频特性, 被广泛应用于移动通信、卫星等重要领域^[1-2] (参考文献标注: 序号用数字加方括号表示 (如: [1]、[2]、.....), 标于右上角, 按在正文中出现的先后排序)。近些年, 又涌现出以氮化镓(GaN), 碳化硅(SiC), 金刚石为代表的第三代半导体材料^[3], 特别是氮化镓, 因其禁带宽度大、电子迁移率高等特点, 成为制备高频、大功率的集成电子器件的理想材料, 在 5G 通信、电动汽车等领域有着广泛的应用前景^[4-7]。

(通过简洁的研究背景介绍引出论文的研究主题)

在实际应用中, GaN 器件诸多优异性能, 常依赖于其余 III 族半导体材料的辅助, 这些材料常相互配合被应用于射频、功率、光电等器件的制备^[8-9]。随着器件集成度的提高, GaN 器件自热效应造成的性能退化愈加明显, 其热管理和可靠性研究, 需要充分了解和利用材料热学性质^[10]。开展 III 族氮化物的晶格动力学性质的研究, 对器件的设计和改进行具有重要的指导意义^[11]。尤其是以高迁移率晶体管^[12] (high electron mobility transistors, HEMT) (通用词英文简称: 在正文中首次出现时需有中英文全称, 格式: 中文全称 (英文全称, 英文简称)) 为代表, AlGaIn/GaN 异质结的引入使其具有优异性能。但关于 Al 元素组分变化对合金热力学性能和器件寿命的影响, 在当前实验条件下其制备和验证尚有困难。采用第一性原理计算为其热学性质的研究提供了理论方法, 为这些材料应用提供理论参考。

(阐述研究主题领域的国内外研究现状并指出目前存在的问题, 引出本文的研究思路 and 目的。忌空泛, 突出新颖性和创新性。)

1 模型与计算方法 (该部分应介绍本文所建立的计算模型、所采用的计算方法以及重要的参数设置等)

本论文的研究是基于 CASTEP 平台展开。CASTEP 是 Material Studio 软件包中的第一性原理计算模块, 采用密度泛函理论平面波赝势方法, 可以应用于材料性能的计算, 不但能计算声子色散关系和热力学性质,

纤锌矿型AlN、GaN、InN晶体对应 186 号空间群^[13-15]，用国际符号表示为 $P6_3mc$ ，晶胞中有四组原子位置信息，其中两个Ⅲ族原子占据位置分别为 $(1/3, 2/3, 0)$ 和 $(2/3, 1/3, 1/2)$ ，根据文献报道设置两个N原子位置，InN中设置参数为 $(1/3, 2/3, 0.386 \text{ \AA})$ 和 $(2/3, 1/3, 0.886 \text{ \AA})$ ^[13]，AlN中参数设置为 $(1/3, 2/3, 0.378 \text{ \AA})$ 和 $(2/3, 1/3, 0.878 \text{ \AA})$ ^[14]，GaN中参数设置为 $(1/3, 2/3, 0.375 \text{ \AA})$ 和 $(2/3, 1/3, 0.875 \text{ \AA})$ ^[15]，如图 1 所示。

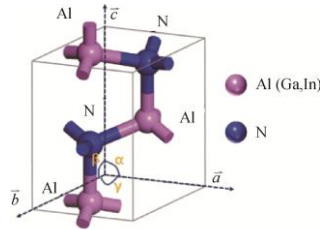


图 1 III族纤锌矿氮化物原胞结构
Fig.1 Structure of primitive cell in Wurtzite III-Nitrides

本文中采用超胞近似的方法对 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 合金进行计算,在GaN和AlN原胞基础上构建 $2\times 2\times 1$ 超胞,即超胞在a轴和b轴方向扩充为原胞的两倍,超胞中共有8个N原子和8个III族氮化物原子坐标位置。合金化过程,采用逐步替换原子个数即可实现,该操作过程均在Material Studio可视化软件中实现。得到 $x=12.5\%$ 、 25% 、 37.5% 、 50% 、 67.5% 、 75% 、 87.5% 七个浓度(原子数分数)下的 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 合金超胞。局域密度泛函近似(local density approximate, LDA)下,选取Norm conserving,将计算精度设置为高级,截断能量值设置为450 eV, K点网格密度设置为 $5\times 5\times 4$,收敛精度设置为 5.0×10^{-7} eV/atom。

(如有实验对照, 应另分小节介绍实验内容, 包括原材料、样品制备或实验过程、测试与表征等, 必要的实验或测试参数必须列出, 确保他人可以重复。)

2 结果与讨论

2.1 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 三元合金结构优化

以图 2 中的超胞模型为计算基础, 进行结构优化计算, 统计晶格参数, 得到对应原胞的晶格参数如表 1 所示。从图中可以看出, 取消超胞内部对称性约束后, Al 原子的引入会导致 X、Y 两个轴晶格常数出现差异。……在 Vegard 定律中引入弯曲因子 δ , 如式(1)所示, 的弯曲因子为负值。参考宋娟^[16]的研究结果, 本文进一步统计了所有浓度下延 Z 轴方向所有 Al—N 和 Ga—N 键(化学键用长横线书写)的长度并对其求平均, 数据点在线性拟合曲线两侧分布, 未表现出明显的弯曲效应, 随 x 增大而线性减小。

$$c(x)=xc_X+(1-x)c_Y-\delta_{ZX}(1-x) \quad (1)$$

式中: x 为 Al 含量; δ_z 表示 Z 轴向弯曲因子; c_x 表示优化后 X 方向键长; c_y 表示优化后 Y 方向键长。(公式中出现的每个物理量要在下方注明含义, 变量和非固定数值的常量字母用斜体, 常数和表示特定含义的字母用正体。)

• • • • •

表 1 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 合金结构参数与 Al 组分之间的关系Table 1 Relationship between structural parameters and Al composition of $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ alloys

Al composition/%	Structural parameter/%			
	<i>a</i> /nm	<i>b</i> /nm	<i>c</i> /nm	Average bond length in Z/nm
0	0.318	0.317	0.520	0.195
20	0.316	0.315	0.515	0.194
40	0.311	0.312	0.510	0.191
60	0.310	0.311	0.503	0.190

(表格: 三线表, 表格内容尽量以英文表示, 表格中数据要与正文中出现的相关数据一致。)

2.2 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 合金色散关系与热力学性质分析

在图2所示的不同Al含量下7种超胞结构的基础上进行了晶格动力学计算。色散关系和声子状态密度计算结果如图3所示。

图3中各色散关系图中数据量较单胞明显增大, 这是因为将单胞扩充成超胞的同时, 晶胞只保留平移对称性, 体系的自由度增加到48, 色散关系中曲线数也随之增多。在实际计算中, 超胞原子数量越大, 色散关系图越复杂, 使得计算得到的色散关系图和实验难以对比……

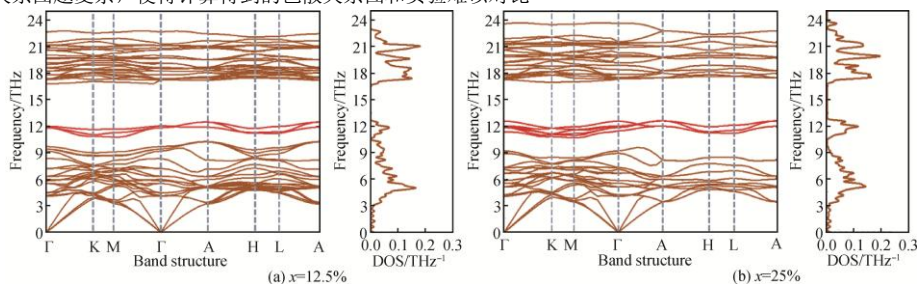


图3 不同Al含量下 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 合金色散关系与声子状态密度

Fig.3 Phonon dispersion and density of phonon states of $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ alloys with different Al concentrations

(曲线图: 建议用 Origin、Photoshop 制图。图内纵、横坐标由物理量名称(或符号(斜体))、单位(均用英文标注)组成。纸质期刊为黑白印刷, 不同曲线请尽量以不同类型线条区分, 不要用颜色区分。如有多幅图, 用(a), (b)……排序, 通栏最多放两个图, 图框高4 cm为宜, 坐标轴标尺向内)

2.3

.....

3 结 论

(不可与摘要部分简单重复) 采用第一性原理模拟对 $x=12.5\%$ 、 25% 、 37.5% 、 50% 、 62.5% 、 75% 、 87.5% 七个组分下的 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 合金结构和晶格动力学性质进行了研究, 通过对不同成分的晶体结构与色散关系进行分析, 得到以下结论:

- 1) 结构优化结果显示, 通过晶格常数和Z轴方向平均键长随组分增大而线性减小。
- 2) 在GaN中引入Al组分会在频率带隙中引入杂质模, 随着Al组分浓度的增加杂质模变宽并进入低频段。对 $A_1(\text{LO})$ 和低频段顶部频率随Al组分增大而线性升高, 在12.5%以上低频段顶部频率均在 $A_1(\text{LO})$ 频率的一半以上。
- 3) 对不同温度下 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 合金热容研究结果表明, 在确定温度下, $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 合金热容随Al组分增大而线性减小。

参 考 文 献 (5号, 黑体)

(参考文献序号用数字加方括号表示(如: [1]、[2]、……), 正文中以右上角标标示, 按出现的先后排序)

(小5号, 中文书宋, 英文 Times New Roman, 所有标点符号均为半角, 逗号、点号与冒号后有一个空格)

[1] 冯 晨, 曾开文, 孙 浩, 等. 氮化镓半导体材料通信电源应用[J]. 电信工程技术与标准化, 2021, 34(7): 20-23.

Feng Chen, Zeng Kaiwen, Sun Hao, et al. Application of GaN semiconductor material in communication power supply[J]. Telecom Engineering Technics and Standardization, 2021, 34(7): 20-23 (in Chinese).

[2] Paszkowicz W, Podsiad O S, Minikayev R. Rietveld refinement study of aluminium and gallium nitrides[J]. Journal of Alloys and Compounds, 2004, 382(1/2): 100-106.

[3] Kanhe N S, Nawale A B, Gawade R L, et al. Understanding the growth of micro and nano crystalline AlN by thermal plasma process[J]. Journal of Crystal Growth, 2012, 339(1): 36-45.

1.文献作者多于三人时只出现前三位作者，后用“等，et al”。

2.中文参考文献，需要中英文对照书写，汉语拼音姓首字母大写、名首字母大写且宜用全称（例：Li Jiangning）。

3.英文参考文献，姓在前且首字母大写；名在后缩写首字母，例如：Smith J C；文献题目只有首个单词的首字母大写；刊名除介词、冠词、连词外每个单词首字母都大写。

4 具体格式：参考文献按在正文中出现的先后排序，序号用数字加方括号表示（如：[1]、[2]、……），标在参考文献引文的右上角。参考文献列于文后，每一参考文献条目的最后均以“.”结束。常见参考文献著录格式如表 2 所示。

表 2 常见参考文献著录格式

文献类型标志	主要文献类别	著录格式与示例
M	普通图书	[序号] 作者. 书名: 其他书名信息[M]. 版本项. 出版地: 出版者, 出版年: 引文起止页码. 示例: [1] 孙慧修, 郝以琼, 龙腾锐. 排水工程: 上册[M]. 4 版. 北京: 中国建筑工业出版社, 1999: 39.
D	学位论文	[序号] 作者. 论文题名[D]. 单位所在城市: 学校或科研单位名称, 写作年份: 引文起止页码. 示例: [6] 杨奇竹. 乳化 SBS 改性沥青及其微表处技术研究[D]. 广州: 广州大学, 2004: 5-7.
J	期刊析出文章	[序号] 作者. 文献题名[J]. 刊名, 年, 卷(期): 引文起止页码. 示例: [8] 王明杰, 于溪, 张吴, 等. 污水排放与水源污染的探讨[J]. 市政技术, 2003, 21(6): 361-363.
S	技术标准	[序号] 标准编号 标准名称[S]. 示例: [12] GB/T 3792—2021 信息与文献 资源描述[S].
P	专利文献	[序号] 专利所有者. 专利题名: 专利国别, 专利号[P]. 公告或公开年-月-日. 示例: [12] 山东华瑞道路材料技术有限公司. MAC 沥青改性剂(干粉): 中国, ZL02148759.6[P]. 2008-09-24.
DB/OL	联机网上数据库	[序号] 作者. 题名: 其他题名信息[DB/OL]. (发表或更新日期) [引用日期]. 获取和访问途径. 示例: [16] 魏成勇. 浅议施工索赔事件中索赔报告的撰写[DB/OL]. (2011-05-08) [2011-08-30]. http://wenku.baidu.com/view/7bffb81555270722192ef7f8.html?from=related
EB/OL	网上电子公告	[序号] 作者. 题名: 其他题名信息[EB/OL]. (发表或更新日期) [引用日期]. 获取和访问途径. 示例: [17] 衡水中通路桥工程有限公司. 桥面防水层施工应用实践[EB/OL]. [2011-08-06]. http://www.luqiaogc.com/about.html .
J/OL	网上期刊	[序号]作者. 题名: 其他题名信息[J/OL]. 刊名, 年, 卷(期): 引文起止页码 (发表日期) [引用日期]. 获取和访问途径. 示例: [18]叶静怡. 工程索赔管理工作主要问题的探讨[J/OL]. 浙江造价信息, 2011(8): 26(2011-08-30)[2011-08-18]. http://www.zjjz.net/qikan/index.php?func=listAll .
M/CD	光盘图书	[序号]作者. 题名: 其他题名信息[M/CD]. 出版地: 出版者, 出版年: 引文起止页码. 示例: [19]万锦坤. 中国大学学报论文文摘(1983-1993): 英文版[M/CD]. 北京: 中国大百科全书出版社, 1996: 8.