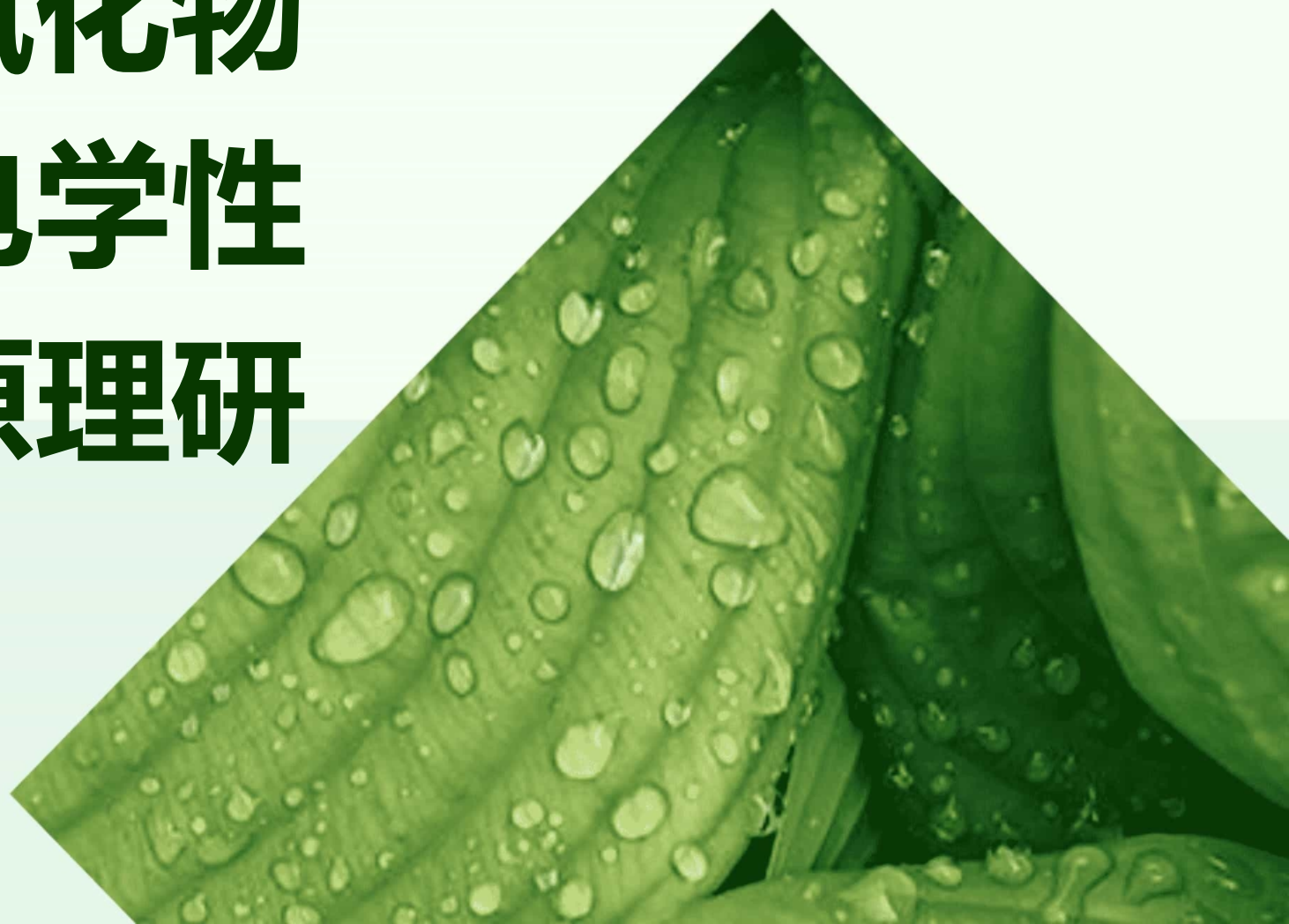


高介电常数氧化物 微观结构与电学性 质的第一性原理研

汇报人:

2024-01-14
究





contents

目录

- 引言
- 高介电常数氧化物微观结构
- 电学性质
- 第一性原理计算方法
- 结果与讨论
- 结论与展望



01

引言





研究背景与意义

高介电常数氧化物在电子器件中的应用

高介电常数氧化物作为一种重要的电子材料，在电容器、场效应晶体管等电子器件中具有广泛的应用前景。其优异的介电性能使得电子器件能够在高温、高频等恶劣环境下正常工作，提高器件的可靠性和稳定性。

微观结构对电学性质的影响

高介电常数氧化物的电学性质与其微观结构密切相关。通过深入研究氧化物的晶体结构、缺陷、界面等微观特征，可以揭示其介电性能的内在机制，为优化材料性能提供理论指导。





国内外研究现状及发展趋势

国内外研究现状

目前，国内外学者已经对多种高介电常数氧化物进行了广泛的研究，包括钛酸钡、钛酸铅等体系。通过不同的制备方法和工艺条件，可以获得具有优异介电性能的材料。同时，研究者们还从理论和实验两个方面探讨了氧化物的微观结构与电学性质之间的关系。

VS

发展趋势

随着科技的不断发展，高介电常数氧化物的研究将更加注重材料的可控制备和性能优化。未来，研究者们将继续探索新的制备方法和工艺条件，以实现材料性能的进一步提升。同时，随着计算机模拟技术的不断发展，第一性原理计算将在高介电常数氧化物的研究中发挥越来越重要的作用。



研究内容、目的和方法

研究目的

通过本研究，旨在揭示高介电常数氧化物微观结构与电学性质之间的内在联系，为优化材料性能提供理论指导。同时，本研究还将为相关领域的研究者提供有价值的参考信息，推动高介电常数氧化物领域的发展。

研究方法

本研究将采用基于密度泛函理论的第一性原理计算方法，利用相关软件对高介电常数氧化物的晶体结构、电子结构、态密度、电荷分布等物理量进行计算和分析。同时，结合实验数据和相关文献报道，对计算结果进行验证和讨论。



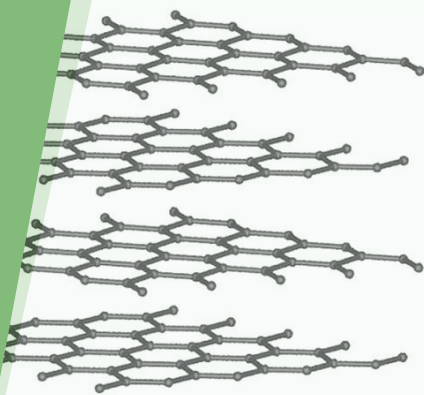
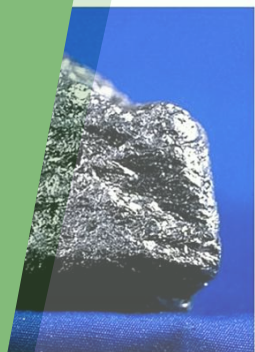
02

高介电常数氧化物微观结构





晶体结构



01

钙钛矿结构

高介电常数氧化物通常具有钙钛矿结构，其化学式为 ABX_3 ，其中A和B是阳离子，X是阴离子。这种结构具有高对称性，有助于形成强偶极矩和极化效应。



02

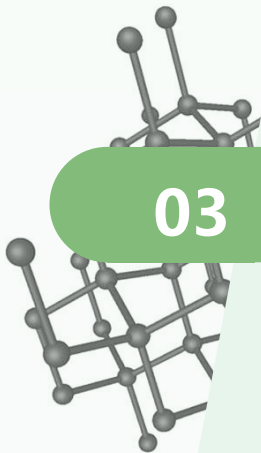
晶格常数

晶格常数决定了晶体中原子间的距离，对介电性能有重要影响。高介电常数氧化物的晶格常数通常较大，使得原子间距离增加，有利于极化效应的形成。

03

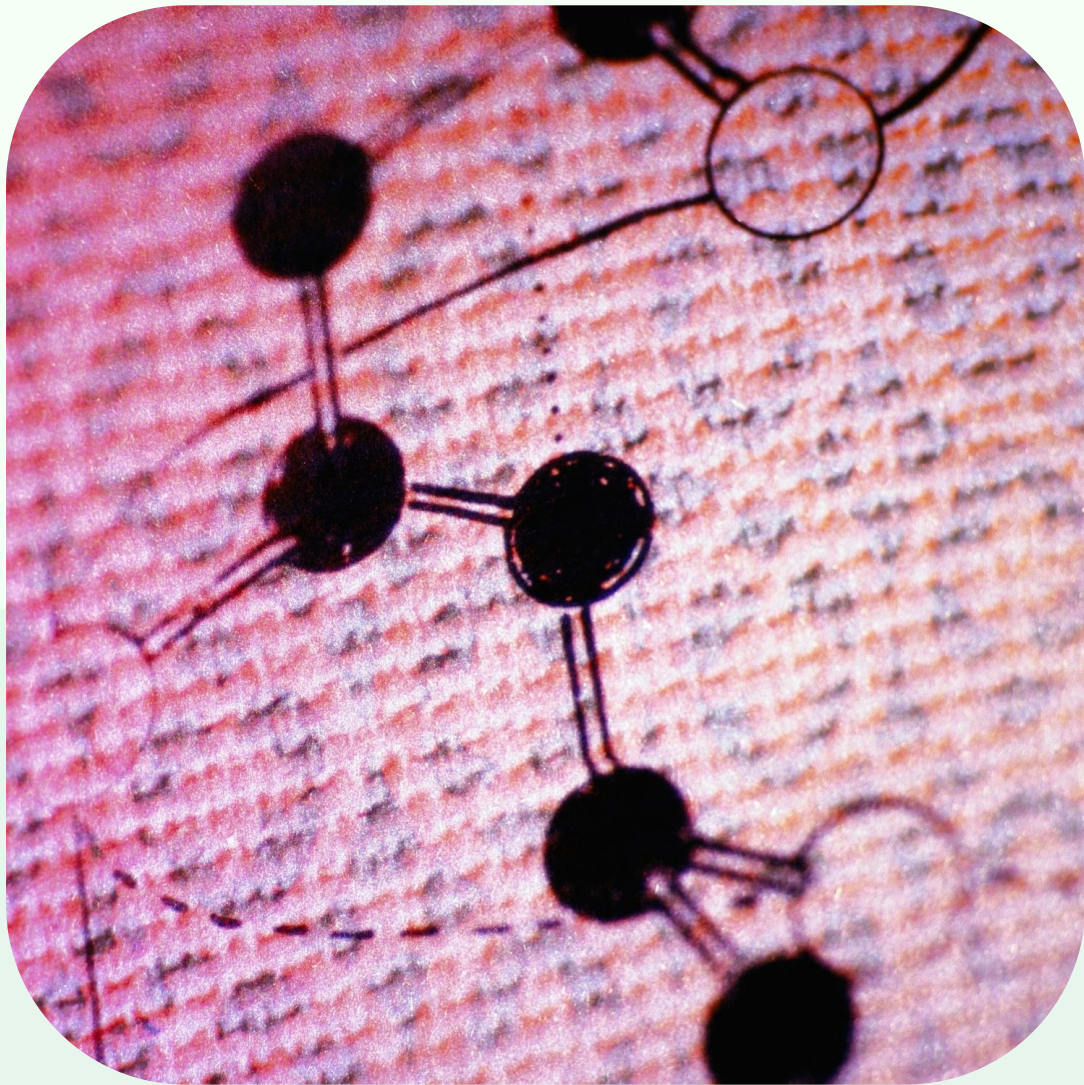
晶体缺陷

晶体中可能存在各种缺陷，如空位、间隙原子和位错等。这些缺陷会影响晶体的介电性能，因为它们可以破坏晶体的长程有序性并引入额外的偶极矩。





电子结构



能带结构

高介电常数氧化物的能带结构通常具有较宽的带隙，使得电子在价带和导带之间的跃迁需要较高的能量。这种能带结构有助于降低漏电流和介电损耗。

电子态密度

电子态密度描述了电子在晶体中的分布情况。高介电常数氧化物的电子态密度通常具有特定的形状和分布，这与其介电性能密切相关。

离子键合

高介电常数氧化物中的原子主要通过离子键合相互连接。离子键合具有强的方向性和饱和性，有助于形成稳定的晶体结构和优异的介电性能。

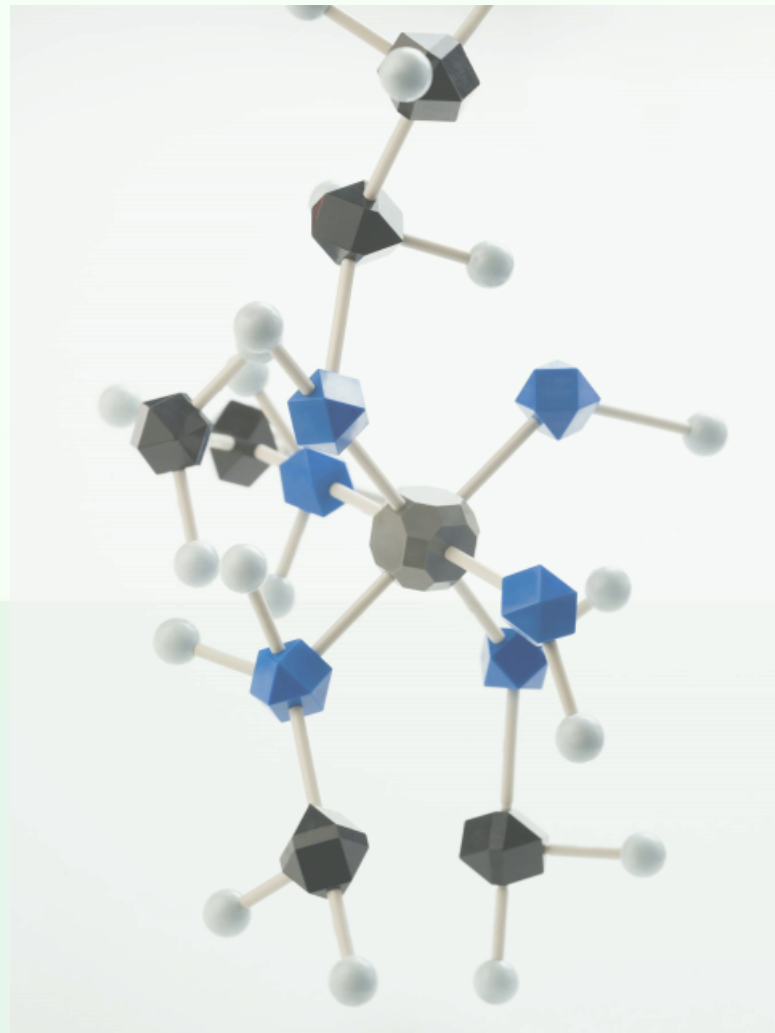
缺陷与掺杂


缺陷类型

高介电常数氧化物中可能存在的缺陷类型包括点缺陷（如空位、间隙原子）、线缺陷（如位错）和面缺陷（如晶界）。这些缺陷会对介电性能产生不同程度的影响。

掺杂效应

通过向高介电常数氧化物中引入适量的杂质原子或离子，可以显著改变其介电性能。掺杂可以改变晶体的电子结构、能带结构和离子键合等，从而影响介电常数、介电损耗和漏电流等关键参数。





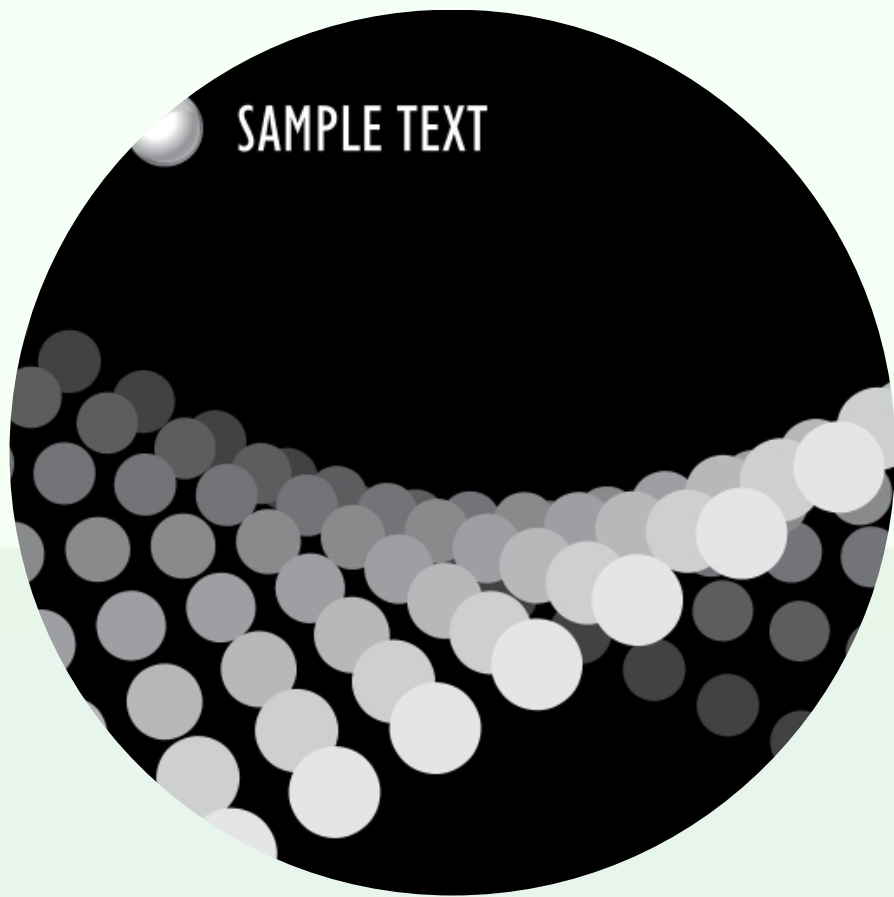
03

电学性质





极化性质



自发极化

高介电常数氧化物中，由于晶体结构的特殊性，正负电荷中心不重合，导致自发极化的产生。

诱导极化

在外电场作用下，氧化物内部电荷分布发生变化，产生诱导极化。

极化强度与温度关系

随着温度升高，氧化物内部热运动加剧，极化强度减弱。



介电常数

● 高介电常数的来源

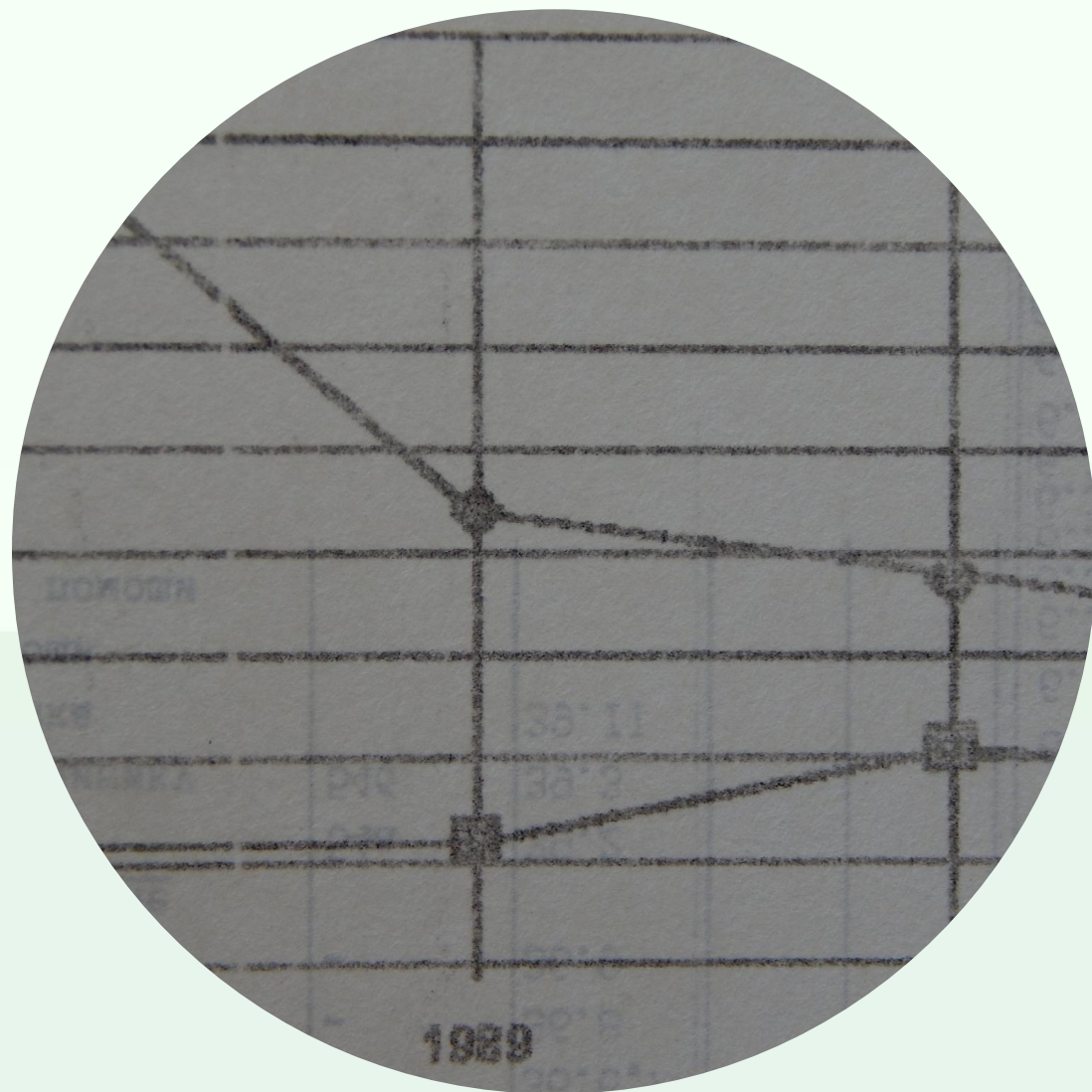
高介电常数氧化物具有特殊的晶体结构和电子结构，导致其具有较高的介电常数。

● 频率依赖性

介电常数随频率的变化而变化，通常在低频下具有较高的介电常数。

● 温度依赖性

介电常数随温度的变化而变化，通常在低温下具有较高的介电常数。



以上内容仅为本文档的试下载部分，为可阅读页数的一半内容。如要下载或阅读全文，请访问：
<https://d.book118.com/368002134053006106>