

# Cu掺杂类金刚石 石薄膜应力降低 机制的第一性原 理研究

汇报人：

2024-01-17



# 目 录

- 引言
- Cu掺杂类金刚石薄膜的制备与表征
- 第一性原理计算方法与模型
- Cu掺杂对类金刚石薄膜应力的影响
- 应力降低机制的探讨
- 结论与展望

contents

01

CATALOGUE

引言



# 研究背景和意义

1

## Cu掺杂类金刚石薄膜的重要性

Cu掺杂类金刚石薄膜具有优异的力学、电学和光学性能，在微电子、光电子和机械等领域具有广泛的应用前景。

2

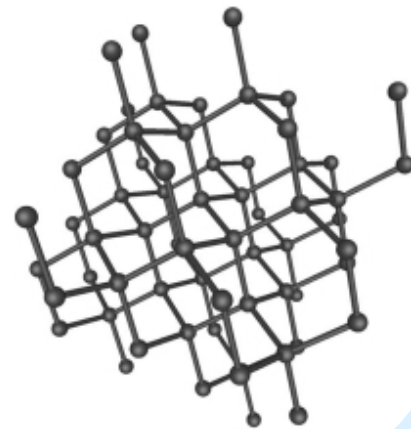
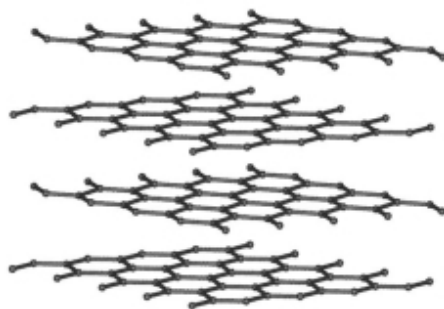
## 应力对薄膜性能的影响

应力是影响薄膜稳定性和性能的重要因素，过高的应力会导致薄膜开裂、剥落等问题，降低其使用寿命和可靠性。

3

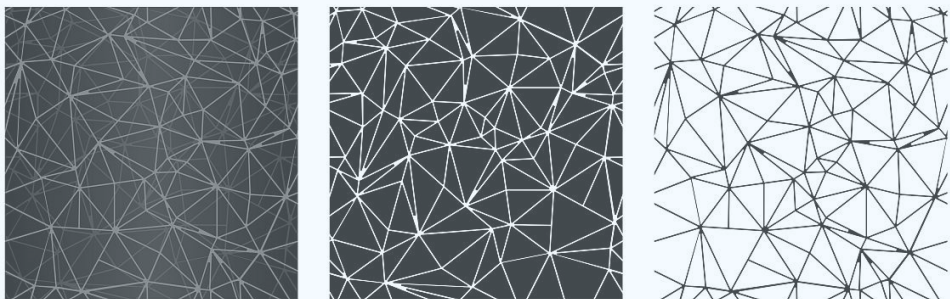
## 降低应力的意义

通过降低Cu掺杂类金刚石薄膜的应力，可以提高其稳定性和性能，进一步拓展其应用领域。





# 国内外研究现状及发展趋势



Set of Triangles Repeat Seamless Pattern

## 国内外研究现状

目前，国内外学者主要通过实验手段研究Cu掺杂类金刚石薄膜的应力降低机制，如改变掺杂浓度、优化制备工艺等。

## 发展趋势

随着计算机模拟技术的发展，第一性原理计算在材料科学领域的应用越来越广泛。通过第一性原理计算可以深入揭示Cu掺杂类金刚石薄膜的应力降低机制，为实验提供理论指导。



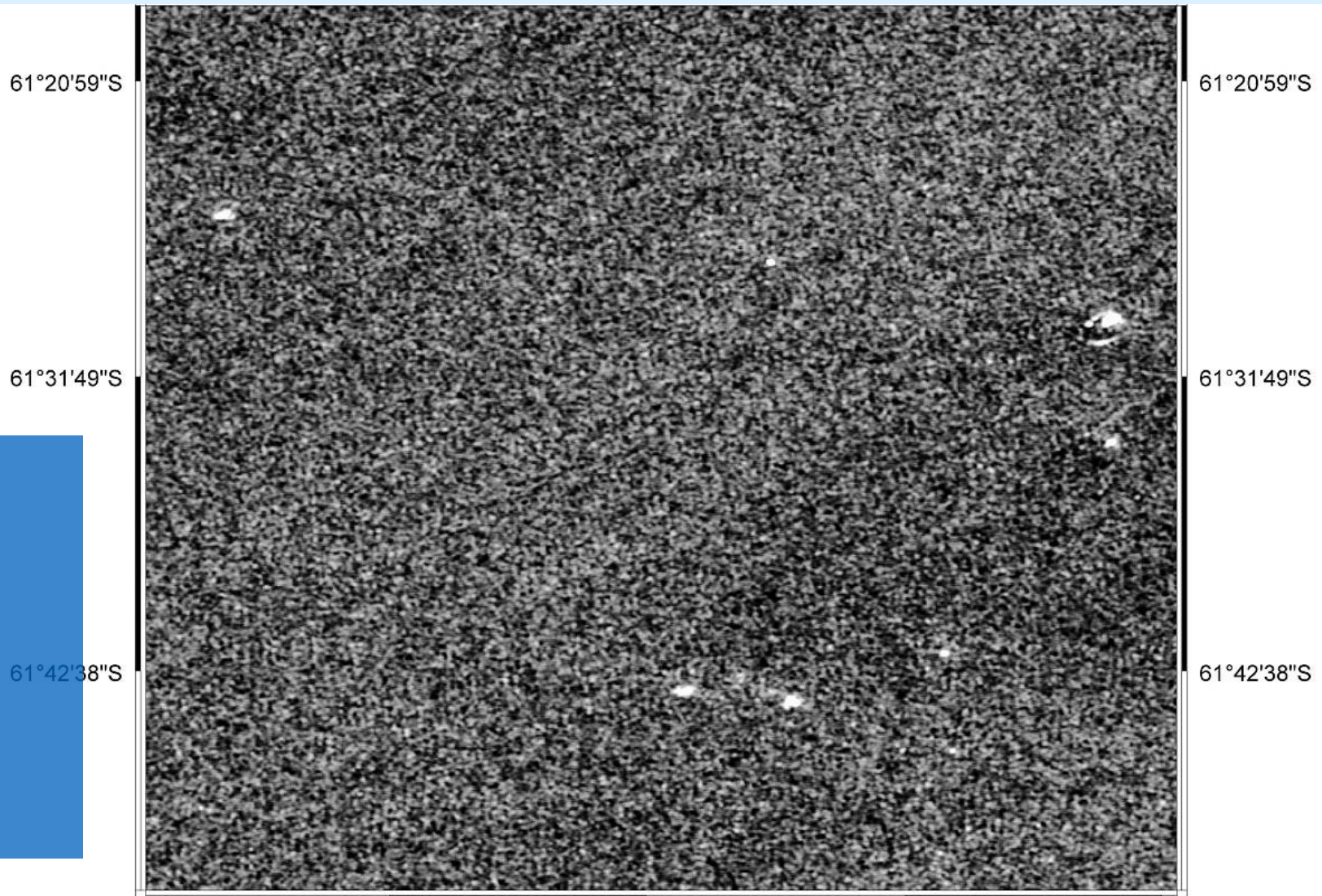
# 研究目的和内容

## 研究目的

本研究旨在通过第一性原理计算，揭示Cu掺杂类金刚石薄膜的应力降低机制，为其在微电子、光电子和机械等领域的应用提供理论指导。

## 研究内容

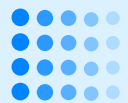
首先建立Cu掺杂类金刚石薄膜的模型，然后通过第一性原理计算研究不同掺杂浓度对薄膜应力的影响，最后分析应力降低的微观机制。



02

CATALOGUE

# Cu掺杂类金刚石薄膜的制备与表征



# 制备方法



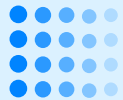
## 化学气相沉积法

利用含碳气体（如甲烷）在基体表面进行化学反应，生成类金刚石薄膜。通过控制反应条件，如温度、压力、气体浓度等，实现Cu元素的掺杂。

## 物理气相沉积法

在高真空环境下，利用物理方法将含碳和Cu的靶材蒸发，使蒸发物质在基体表面沉积成膜。通过控制蒸发条件，如温度、真空度等，调控薄膜的成分和结构。





# 薄膜结构表征

## X射线衍射分析

利用X射线在晶体中的衍射现象，分析薄膜的晶体结构和相组成。通过对比掺杂前后衍射峰的变化，研究Cu掺杂对类金刚石薄膜结构的影响。

## 拉曼光谱分析

通过测量薄膜的拉曼散射光谱，分析薄膜的化学键结构和振动模式。根据特征峰的位置和强度变化，探讨Cu掺杂对类金刚石薄膜化学键的影响。



# 薄膜性能表征

## 硬度测试

采用显微硬度计测量薄膜的硬度值，评估Cu掺杂对类金刚石薄膜力学性能的影响。通过对比掺杂前后的硬度变化，分析Cu元素在提高薄膜硬度方面的作用。

## 摩擦磨损试验

利用摩擦磨损试验机模拟实际工作条件下的摩擦过程，研究Cu掺杂类金刚石薄膜的耐磨性能。通过测量摩擦系数和磨损量等指标，评价Cu掺杂对薄膜耐磨性的改善效果。

03

CATALOGUE

# 第一性原理计算方法与模型



# 第一性原理计算方法简介

## 第一性原理计算

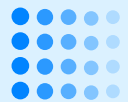
基于量子力学理论，通过自洽计算求解体系薛定谔方程，从而得到体系基态能量、电子结构等物理性质的方法。

## 密度泛函理论

以电子密度作为基本变量，通过求解Kohn-Sham方程得到体系基态性质的一种第一性原理计算方法。

## 赝势方法

通过引入等效势场来近似描述原子核对价电子的作用，从而简化计算过程。



# 计算模型与参数设置

01

## 计算模型

采用包含Cu原子和C原子的超胞模型来模拟Cu掺杂类金刚石薄膜，超胞大小根据实际需要选择。

02

## 参数设置

选择适当的交换关联泛函（如LDA或GGA），设置截断能、k点网格等参数，进行自治计算。

03

## 收敛标准

设置能量、电子密度等收敛标准，确保计算结果的准确性和可靠性。

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/678066020043006076>