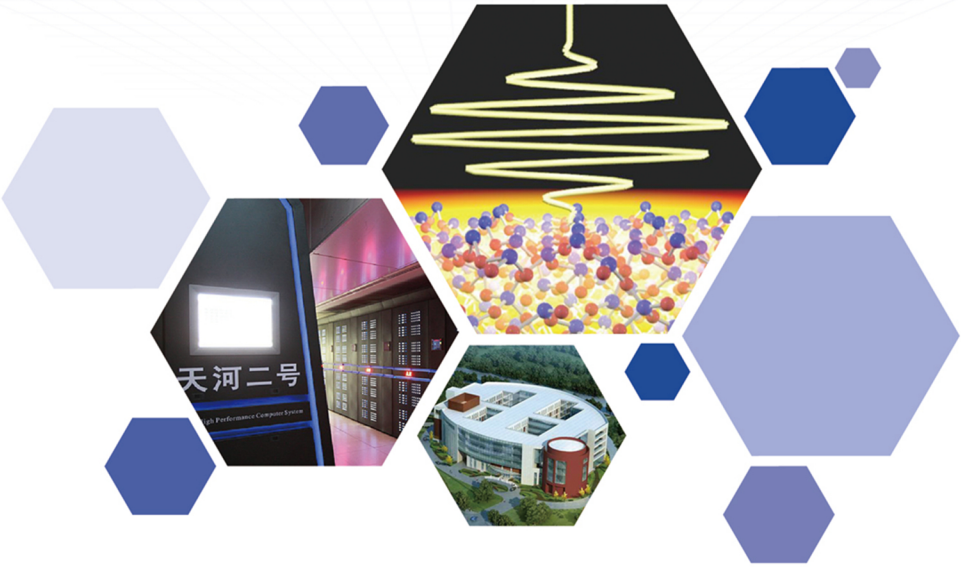
北京计算科学研究中心
BEIJING COMPUTATIONAL SCIENCE RESEARCH CENTER



培训手册

材料与能源前沿科学：强外场下的材料结构和物态调控培训班

2023 年 10 月　　四川 · 成都

培 训 班 简 介

北京计算科学研究中心（以下简称中心）是隶属于中国工程物理研究院的独立法人单位，是以计算科学为牵引的多学科基础研究机构。中心成立于 2009 年 8 月。中心的定位是开展计算科学研究，促进科技发展，打造一个国际一流的开展计算科学及相关学科交叉研究的综合平台。

中心积极引进高层次人才，努力开展计算科学相关学科的交叉和创新研究，共有七个研究部：物理系统模拟研究部、量子物理与量子信息研究部、材料与能源研究部、复杂系统研究部、应用与计算数学研究部、力学研究部、计算方法研究部。研究领域涵盖了数学、力学、物理学、化学、材料科学、计算机科学等多个基础、前沿领域。中心积极与国内外知名科研机构以合办会议、合带博士后、人员互访等丰富形式开展合作，努力推动学科交叉、加强学术交流。作为一个基础性、跨学科、开放式的综合研究平台，中心将成为中物院在各个研究领域开展创新研究的重要支撑，开展对外科学技术交流合作的桥梁和纽带，高层次人才引进与培养的摇篮，同时填补我国计算科学相关学科交叉研究领域的空白。

“材料与能源前沿科学”培训班是北京计算科学研究中心材料与能源研究部主办的系列培训班，每年选取领域内最新或最热的主题举办一次。2023 年的主题为“强外场下的材料结构和物态调控”，定于 2023 年 10 月 25 日-27 日在四川成都召开。本次培训班重点关注外场下半导体等材料的结构和物态调控的最新理论模型、计算方法和实验表征，旨在帮助中物院研究人员掌握不同外场条件下半导体中缺陷和电子态演化的基本规律，了解最前沿的实验和理论研究进展和发展趋势，同时加强与中物院内外研究单位和人员的合作交流。

我们诚挚地欢迎

各位学员参加本期培训班！

培 训 须 知

为方便各位老师和学员的科研工作/学习和生活，现将有关事项提示如下：

一、培训与住宿地点：四川省成都市银河·云瑞酒店

（四川省成都市双流区银河路 596 号）

二、现场报到：

10 月 24 日（星期二）14:00~18:00（银河·云瑞酒店二楼大厅）

10 月 25 日（星期三）07:30~08:30（银河·云瑞酒店一楼云瑞厅外）

三、正式培训：

2023 年 10 月 25 日-27 日全天（银河·云瑞酒店一楼云瑞厅）

四、用餐时间与地点：

早餐、中餐、晚餐在酒店二楼西餐厅自助；

早餐刷房卡用餐，午餐晚餐凭餐券用餐。

五、WI-FI：

Luckycloud Hotel

其他注意事项：

一、培训期间应严格遵守培训纪律，注意人身和财产安全，有事及时与会务组联系（胸牌挂绳为黄色的人员为会务组工作人员）。

二、自觉遵守培训纪律，不迟到、不早退，因故不能参加培训或需提前离会，须告知会务组。（培训期间，中物院院内单位学员需每天签到一次作为考勤记录，全勤则具备证书颁发资格）

三、进入培训会场前，请自觉关闭手机或调至静音状态，以免影响他人。

四、禁止在公共场所谈论涉密信息。

五、10 月正处于四川天气多变时节，早晚温差大，请带好雨伞及御寒衣物。

会务组联系方式：

北京计算科学研究中心　　冯　怡　　18600984303　　fengyi@csrc.ac.cn

培 训 日 程

2023 年 10 月 25 日 星期三	
07:30~08:30	*现场注册、签到*
主持人：黄兵	
08:30~08:40	*开班仪式*
08:40~10:10	陈时友（复旦大学） 半导体缺陷和杂质的计算模拟
10:10~10:40	*问答讨论、合影、茶歇*
10:40~12:10	张燮（西北工业大学） 半导体材料中缺陷引起的非辐射复合计算
12:10~14:00	*问答讨论、午餐*
主持人：高世武	
14:00~15:30	缑慧阳（北京高压科学研究中心） 功能材料的高压结构和性能
15:30~16:00	*问答讨论、茶歇*
16:00~17:30	李兴冀（哈尔滨工业大学） 硅氧化物层缺陷调制及加固研究
17:30~19:00	*问答讨论、晚餐*
2023 年 10 月 26 日 星期四	
08:15~08:30	*签到*
主持人：魏苏淮	
08:30~10:00	郭红霞（西北核技术研究院） 辐射环境下功率器件模拟试验技术
10:00~10:30	*问答讨论、茶歇*
10:30~12:00	吕玲（西安电子科技大学） 宽禁带半导体器件辐射效应研究

培 训 日 程

2023 年 10 月 26 日 星期四	
12:00~14:00	*问答讨论、午餐*
主持人：黄兵	
14:00~15:30	贺朝会（西安交通大学） 多尺度模拟方法在半导体材料和器件位移损伤研究中的应用
15:30~16:00	*问答讨论、茶歇*
16:00~17:30	徐贲（中国工程物理研究院研究生院） 强磁场下的原子尺度模拟
17:30~19:00	*问答讨论、晚餐*
2023 年 10 月 27 日 星期五	
08:15~08:30	*签到*
主持人：康俊	
08:30~10:00	戴佳钰（国防科技大学） 强激光场下材料微观结构响应动力学
10:00~10:30	*问答讨论、茶歇*
10:30~12:00	李永钢（中国科学院合肥物质科学研究院固体物理研究所） 半导体器件辐射效应的多尺度模拟
12:00~14:00	*问答讨论、午餐*
主持人：康俊	
14:00~15:30	杨吉辉（复旦大学） 半导体材料和器件电输运性质的第一性原理研究
15:30~16:00	*问答讨论、颁发证书、茶歇*
16:00~17:30	杨学林（北京大学） GaN 基宽禁带半导体材料和器件研究
17:30~19:00	*问答讨论、总结闭幕、晚餐*

报告题目：半导体缺陷和杂质的计算模拟

报告人：陈时友

陈时友，复旦大学微电子学院和计算物质科学研究所研究员。主要从事半导体材料和器件的计算仿真和理论设计研究，包括多元化合物半导体、缺陷和杂质物理、电子器件的原子级仿真方法和 TCAD 软件、辐照损伤和可靠性物理等方面。发表论文 150 余篇，SCI 引用 13000 余次。曾入选中组部万人计划领军人才、国家自然科学基金优青、上海市优秀学术带头人等人才计划；获教育部自然科学一等奖和中国电子学会自然科学二等奖；担任半导体学报、*Computational Materials Sciences* 等期刊编委、半导体物理国际大会（ICPS）程序委员会委员。

报告摘要：

本报告将介绍我们开发的缺陷和杂质的第一性原理计算模拟软件 DASP，其能针对输入的半导体晶体结构信息，调用材料基因组数据库和第一性原理软件包，自动计算并输出半导体的热力学稳定性和元素化学势范围，缺陷和杂质形成能及离化能级，半导体样品中缺陷、杂质和载流子浓度及费米能级，关键缺陷和杂质诱导的光致发光谱、载流子辐射和非辐射复合速率及少子寿命。这些计算结果可以为连续介质级大尺度的电子器件和光电器件 TCAD 计算仿真提供基本输入参数，确定半导体器件可靠性相关的关键缺陷和杂质，揭示偏压不稳定性、随机电报噪声和介电层经时击穿等可靠性问题的微观机制，从而精准设计高可靠性器件。

报告题目：半导体材料中缺陷引起的非辐射复合计算

报告人：张燮

张燮，西北工业大学材料学院教授，入选第十六批国家海外高层次青年人才计划。2015 年取得德国马普钢铁研究所和波鸿大学博士学位（导师：Jörg Neugebauer 教授）。曾先后在德国马普钢铁研究所（2015-2016）和美国加州大学圣芭芭拉分校材料系（2017-2020，合作导师：Chris G. Van de Walle 院士）从事博士后研究。长期致力于先进结构与能源材料的计算与设计。近年来以第一或者通讯作者在 *Nature Materials, Nature Computational Science, Physical Review Letters, Nature Communications, Advanced Energy Materials* 等国际一流期刊发表论文三十余篇。2018 年获得加州大学圣芭芭拉分校固态发光与能源电子中心杰出研究成就奖。2019 年荣获美国能源部国家能源研究科学计算中心所颁发的高影响力科学计算青年成就奖（全美共三人，计算材料领域唯一获奖人）。担任材料学期刊 *Materials Research Letters* 青年编委。

报告摘要：

材料在强外场的作用下，很容易产生较多的点缺陷，而这些缺陷对材料，尤其是半导体材料的电学、光学、磁学等方面的性质产生非常重要的影响。这其中一个关键的过程就是由缺陷引起的载流子非辐射复合，导致半导体材料中自由载流子以声子的形式将能量耗散掉，从而影响器件的能量转换效率。本报告将系统地梳理缺陷引起的非辐射复合的基础知识以及如何通过量子力学第一性原理方法对缺陷的非辐射俘获系数进行精确计算。在此基础上，以钙钛矿等先进半导体材料作为实例，讨论利用第一性原理计算方法，如何帮助我们理解、认识以及优化材料的器件表现。

报告题目：功能材料的高压结构和性能

报告人：缑慧阳

缑慧阳，北京高压科学研究中心研究员，博导，国家杰出青年基金、中组部海外青年人才、德国洪堡基金获得者。发现金刚石的次晶态、四硼化铁超导体、黑磷结构聚合氮等系列新型功能材料。在 *Nature*、*Phys. Rev. Lett.*、*Nature* 子刊等国际著名杂志上发表论文 110 余篇。

报告摘要：

探索和发展新材料对于未来材料的技术应用和创新至关重要。高压是寻找和发现具有优异物理和化学特性新材料的有效手段。我的报告将汇报典型材料的高压结构演变规律以及高压相结构特点，由此发现金刚石的新型态---次晶金刚石的现象和证据，探索具有新颖结构功能材料的高效制备途径和策略。此外，汇报我们在探索新型功能材料方面的研究进展，揭示晶格、轨道杂化和物理性能之间的相互关联。

报告题目：硅氧化物层缺陷调制及加固研究

报告人：李兴冀

李兴冀，哈尔滨工业大学，国家级高层次人才，教授/博导，空间材料与器件系主任，长期从事电子器件基础理论及仿真技术研究，担任中国核学会辐射物理分会常务理事、《现代应用物理》期刊第三届编辑委员会委员、IEEE Senior Member 等多个学术职务。在器件辐射损伤机理与加固技术及仿真分析方面取得多项创新性成果。主持包括国家重大专项工程、重大科技、基础科研等国家级科研项目 20 余项；获省部级奖 4 项、发表 SCI 论文 100 余篇、出版学术专著 2 部、国家发明专利 42 项，以及软件著作权 100 余项。

报告摘要：

硅基双极器件在航天工程有着广泛应用，然后极易受到空间电离辐射环境影响，特别是低剂量率。硅基双极器件的抗电离辐射损伤能力与 SiO_2 层中电离缺陷密切相关，基于离子注入在硅基双极器件的 SiO_2 层中进行电离缺陷调控，有望成为一种提升双极器件抗电离辐射损伤能力的有效手段。鉴于试验表征手段分析有限，缺少有效的缺陷模拟仿真物理模型，导致离子注入调控电离缺陷的机制尚不明确，限制了基于离子注入提高硅基双极器件辐射可靠性的发展。对此，本报告中介绍了硅基双极器件 SiO_2 层中的电离辐射缺陷演化仿真模型构建过程，从仿真角度讨论了电离缺陷调控因素及机制。基于不同能量、类型的离子注入与 Co-60 辐照顺序试验，分析了不同剂量率条件下以及不同类型硅基双极器件中的电离缺陷调控及抗电离损伤行为，为国产双极器件的抗辐射加固提供理论依据和技术支持。

报告题目：辐射环境下功率器件模拟试验技术

报告人：郭红霞

郭红霞，西北核技术研究所研究员，博士，博士生导师。2020 年全国三八妇女红旗手，第十三届全国政协委员，2010 年入选中国科学院国内“百人计划”。主要从事电子元器件辐射效应模拟试验技术和仿真模拟研究，是抗辐射加固应用技术研究领域的学术带头人，在空间辐射效应模拟试验技术、仿真模拟技术、评估技术等方向作出了多项研究成果，部分成果已应用于型号设计，为我国抗辐射加固技术发展做出了重要贡献。获省部级一等奖 6 项，3 项排名第一，在核心期刊发表文章 100 余篇，被 SCI、EI 收录 80 余篇，授权国家发明专利 30 多项。

报告摘要：

报告内容针对功率器件受到不同种类粒子辐照，产生缺陷导致器件性能退化的问题，对缺陷形成机制、微观结构变化及其对宏观特性的影响进行深入研究，特别是针对功率器件的单粒子栅穿和单粒子烧毁效应开展了系统性的研究。结合数值模拟仿真和实验表征，揭示了不同辐照条件下功率器件性能退化的物理机制，建立了评估实验方法，为我国新一代空间装备用宽禁带器件的太空应用提供关键技术支撑。

报告题目：宽禁带半导体器件辐射效应研究

报告人：吕玲

吕玲，博士，西安电子科技大学微电子学院副教授。从事教育教学和科学研究等工作，一直致力于氮化镓材料与器件辐射效应基础研究。作为项目负责人先后主持了国家自然科学青年基金、陕西省自然科学基金、国家重点实验室开放课题等项目，参与多个国家级、省部级项目十余项。针对氮化镓器件位移损伤效应、总剂量效应和单粒子效应，在电学参数退化规律分析、辐射缺陷表征、辐射模型建立等方面开展了一系列创新研究。相关研究成果在 *IEEE Transactions on Nuclear Science*，*Microelectronics Reliability*，*Chinese Physics B* 等国内外可靠性领域顶级期刊及会议上发表学术论文 50 余篇。

报告摘要：

宽禁带半导体器件，是电力电子和微波射频器件的“核芯”，具备高频、高效、耐高压、耐高温、抗辐射能力强等优越性能，已成为全球半导体技术研究前沿和新的产业竞争焦点。随着空间应用技术日新月异，宽禁带半导体器件辐射效应成为当前国内外研究热点。本报告聚焦宽禁带半导体氮化镓和氧化镓，阐述其射频和功率器件工作机理、器件发展中面临的关键科学问题，探讨其辐射效应机制、国内外研究进展，旨在推进宽禁带半导体器件空间环境安全可靠的应用。

报告题目：多尺度模拟方法在半导体材料和器件位移损伤研究中的应用

报告人：贺朝会

贺朝会，西安交通大学教授，博士生导师，入选首届教育部“新世纪优秀人才支持计划”，*International Journal of Advanced Nuclear Reactor Design and Technology (JANDT)* 编委，《原子能科学技术》编委，中国核学会核测试与分析分会常务理事、辐射物理分会理事、核化学与放射化学分会环境放射化学专业委员会委员，中国仿真学会集成微系统建模与仿真专业委员会委员，中国电子学会高级会员，中国宇航学会会员，陕西省核与辐射安全专家，曾任中国核学会核电子学与核探测技术分会理事、陕西省核学会理事，获部级科技进步一等奖（排名第一）1 项、三等奖 2 项，发表论文 200 多篇，出版学术专著 2 本：《纳米级系统芯片单粒子效应研究》、《多尺度模拟方法在半导体材料位移损伤研究中的应用》，参与编书 2 本：《电子元器件抗辐射加固技术》和《辐射物理研究中的基础科学问题》。主持国家自然科学基金重点项目和基础加强重点课题及国防预研等课题近 50 项。

报告摘要：

介绍用于材料位移损伤研究的多尺度模拟方法，包括辐射与材料相互作用模拟方法、分子动力学方法、动力学蒙特卡罗方法、第一性原理方法、器件电学性能模拟方法等，模拟尺寸从原子尺度 10^{-10}m 到百纳米、时间从亚皮秒量级到 10^{6}s，并给出多尺度模拟方法在硅、砷化镓、碳化硅、氮化镓材料位移损伤研究中的应用，揭示典型半导体材料的位移损伤机理和规律。

报告题目：强磁场下的原子尺度模拟

报告人：徐贲

中国工程物理研究院副研究员，长期从事计算材料学研究，在 *Science*，*Physical Review Letters*，*Advanced Materials* 等国际一流杂志上发表 SCI 论文 70 余篇，其中数篇论文入选 ESI 高被引论文。软件著作权 6 项。研究兴趣包括，多物理场下原子尺度模拟方法的开发，材料中组织结构对能量输运和损耗的影响研究。

报告摘要：

材料中的磁性序构不仅在自旋电子学中有着重要的应用，而且对一些未呈现宏观磁性的材料如三元锂电池材料、氧化铀材料、奥氏体钢等的性能也有非常重要的影响。相关研究不仅涉及复杂的原子结构和磁性序构，同时也要考虑温度以及外场对体系基态及演化机制的影响。更重要的是对能量的精度和分辨率也有很高的要求，需要能够区分局域原子环境下 10meV 左右的能量变化。为了应对上述挑战，原子尺度的晶格-自旋动力学计算方法较为适合。该路线中的关键问题是如何准确地描述晶格与自旋的相互作用。为了实现这一目标，我们自主开发了第一性原理磁性激发态的计算方法，全空间非共线磁性构型的深度模型研究方法，以及磁性和晶格的协同共轭梯度方法。能够在原子尺度的模拟中，准确计算体系能量、原子受力以及磁转矩，精度达到 0.1meV/atom, 0.01meV/Å 和 0.1meV/ μ B。结合自旋晶格动力学方法，该模型可以广泛应用于大尺度、复杂构型以及复杂相互作用的相关物理问题之中。

报告题目：强激光场下材料微观结构响应动力学

报告人：戴佳钰

戴佳钰，男，博士，国防科技大学理学院首席专家，教授。主要从事物质结构及其动力学性质研究，发展多尺度模拟方法，联合超快激光等实验手段研究极端条件下的物态物性。获国家自然科学基金优秀青年基金资助，教育部青年长江学者，全军学科拔尖人才，湖南省科技创新领军人才。在 PRL 等杂志发表 80 余篇论文。获邓稼先青年科技奖、湖南省自然科学一等奖 1 项、二等奖 1 项。湖南省物理学会副理事长，全国光学青年论坛副主席，钢系物理与化学学会理事，中国物理学会高压物理专业委员会委员等学术兼职。

报告摘要：

高温高压物态的产生通常采用强激光和冲击波等手段，带来了诸如非平衡、瞬态、激发态等科学研究的挑战。报告将介绍发展和利用大尺度原子模拟方法，对强冲击波和强激光带来的内壳层空动态和热电子诱导电子-离子结构演化，冲击波诱导离子结构相变的微观结构演化等过程进行研究，获得了一系列丰富的物理现象，逐步建立起一套基于密度泛函精度的研究冲击压缩/激光破坏动力学的有效工具。

报告题目：半导体器件辐射效应的多尺度模拟

报告人：李永钢

李永钢，研究员，博导。2009 年中国科学技术大学物理系博士毕业，2012-2014 年美国麻省理工学院核工系访问学者，2009 起在中科院固体物理研究所工作至今。中科院青促会会员（2016）和优秀会员（2021），安徽省自然科学基金杰出青年基金获得者，中国材料研究学会计算材料学分会委员（2016 至今），中国聚变堆材料大会青年委员会委员（2021）。主要从事于材料辐射效应与缺陷物理研究，专注于核能材料和半导体器件辐射损伤/失效机理的多尺度模拟。主持国家自然科学基金 7 项和国家重点研发计划子课题等多项。发表 SCI 论文 60 余篇，一作英文论著章节 1 篇次，受邀综述 2 篇；参与制定 ISO 国际和国家标准各 1 项；获软件著作权 6 项、开源软件 1 个、中国专利 3 项；国内外会议邀请报告 10 余次。

报告摘要：

理解辐射下半导体器件的光电特性退化需要揭示其位移和电离损伤的微观机制。鉴于实验辐射和探测困难，相关理论模拟至关重要，但也始终面临很大的挑战性。为此，我们开发了一个顺序多尺度模型框架以模拟空间辐射下半导体中的缺陷/载流子演化及其相互作用。模型耦合了缺陷性质计算的密度泛函理论（DFT）、初级辐照损伤的蒙特卡洛自主软件（IM3D）、带电缺陷/载流子演化的对象动力学蒙特卡洛软件（MMonCa/RAM-KMC）和缺陷充电的连续动力学自主模型（IRadMat）。利用多尺度模型系统研究了离子/中子/γ 射线等辐射下 Si/SiC/GaN 基半导体器件的电离/位移损伤等关键问题，包括离子掺杂、缺陷充电、深能级缺陷识别和总电离剂量（TID）效应，获得了与实验一致的模拟结果。这为辐射下半导体器件的失效机理分析、深能级缺陷识别和加固方案设计等提供了新的研究方法和理论指导。

报告题目：半导体材料和器件电输运性质的第一性原理研究

报告人：杨吉辉

杨吉辉，男，2018 年 10 月加入复旦大学，现任物理学系青年研究员。分别于 2008 和 2013 年在复旦大学取得本科和博士学位，导师为龚新高院士。毕业之后先后在美国国家可再生能源实验室和莱斯大学从事博士后研究工作，合作导师分别为魏苏淮和 Boris I. Yakobson 教授。主要研究方向为计算半导体物理。基于第一性原理计算，发展了相应的计算方法和半导体理论，研究了半导体材料中与电子产生、复合、输运、分离等相关的物理性质和物理过程，同时设计了新型材料，目前发表 SCI 论文 80 余篇，其中以第一或者通讯作者在 *Nature Materials*，*Phys. Rev. Lett.*，*Phys. Rev. Research* 等杂志上发表 40 篇，Google Scholar 被引 7400 多次，H 因子 36。2019 年入选海外青年专家人才项目。

报告摘要：

电输运行为对半导体器件性能和功能有着重要影响，理解电输运中的物理过程和机制对于优化器件性能乃至设计新型器件均具有重要意义。本报告将首先围绕载流子迁移率这一重要电输运性质，说明基于第一性原理计算电声耦合对于准确预言载流子本征迁移率的必要性，进一步提出决定散射通道的电子能带和声子谱的能量匹配函数。基于匹配函数和散射机制分析，揭示 MoS_2 从块体到单层迁移率反常增大的物理原因，提出利用基本物理量筛选高迁移率体系的基本规则，预言若干种高迁移率单层半导体。进一步，提出利用面内拉应力来减弱电声耦合提高迁移率的原则以及探索利用高电场来提高迁移率的可能性。其次，本报告将研究强电场下半导体中的击穿机制，揭示决定本征击穿强度上限的基本物理量并非是能隙，而是导带底到导带底+能隙能量范围内的最大电子态密度，为优化功率器件性能指明了理论方向。最后，本报告将围绕器件中金属和半导体界面费米能级钉扎对电输运性能的限制问题，通过从理论上预言新型半导体硼材料，来设计金属硼电极、半导体硼通道的全硼基场效应管，从而为高性能电子器件的实现提供理论方案。

报告题目：GaN 基宽禁带半导体材料和器件研究

报告人：杨学林

杨学林，北京大学教授级高工，国家优秀青年科学基金获得者。先后在吉林大学和北京大学获学士和博士学位，2012 年从日本东京大学回国后加入到北京大学物理学院。近年来主要围绕 GaN 基电子材料和器件开展研究工作，在 Si 衬底上 GaN 厚膜及其异质结构的 MOCVD 外延生长、GaN 基材料中杂质缺陷研究等方面取得了多项成果。迄今共发表 SCI 论文 130 多篇，包括以第一/通讯作者在 *Phys. Rev. Lett.*、*Adv. Funct. Mater.*、*Appl. Phys. Lett.*等期刊上发表 SCI 论文 45 篇。在本领域国内外学术会议上做邀请报告 20 次，申请/授权国家发明专利 15 件。主持国家自然科学基金重点/优青/面上项目、科技部国家重点研发计划课题，华为/北方华创等产学研合作项目，正在积极推动科研成果转化。

报告摘要：

本报告主要介绍以 GaN 为代表的宽禁带半导体材料基本性质、国内外研究现状和发展趋势，以及本课题组的研究工作汇报。主要包括：（1）GaN 基电子材料和器件的发展历史和应用前景；（2）GaN 薄膜及其异质结构的 MOCVD 外延生长；（3）GaN 材料中的杂质缺陷研究进展。