

# 双轴错配应变对铁电双栅负电容晶体管性能的影响\*

纪婷伟 白刚†

(南京邮电大学集成电路科学与工程学院, 南京 210023)

(2022 年 11 月 16 日收到; 2022 年 12 月 20 日收到修改稿)

提出了双轴错配应变调节的对称双栅负电容场效应晶体管的电学特性的解析模型, 然后基于该模型对比研究了铁电层厚度和双轴错配应变分别对基于  $\text{PbZr}_{0.5}\text{Ti}_{0.5}\text{O}_3$  和  $\text{CuInP}_2\text{S}_6$  材料的两种负电容场效应晶体管的电学性能的影响. 结果表明: 对于基于  $\text{PbZr}_{0.5}\text{Ti}_{0.5}\text{O}_3$  的负电容场效应晶体管, 当增加其铁电层厚度或施加压缩应变时, 其亚阈值摆幅和导通电流得到改善, 但施加拉伸应变具有相反的作用. 对于基于  $\text{CuInP}_2\text{S}_6$  的负电容场效应晶体管, 在增加铁电层厚度或施加拉伸应变时性能有所改善, 但器件在压缩应变下是滞后的. 比较两者发现, 在低栅极电压下, 基于  $\text{CuInP}_2\text{S}_6$  的负电容场效应晶体管比基于  $\text{PbZr}_{0.5}\text{Ti}_{0.5}\text{O}_3$  的负电容场效应晶体管表现出更好的性能.

**关键词:** 负电容场效应晶体管,  $\text{CuInP}_2\text{S}_6$ ,  $\text{PbZr}_{0.5}\text{Ti}_{0.5}\text{O}_3$ , 错配应变

**PACS:** 77.55.fg, 77.55.fp, 77.65.Ly, 77.80.bn

**DOI:** 10.7498/aps.72.20222190

## 1 引言

超大规模集成电路中晶体管尺寸的缩小使微处理器的开关速度、密度、功能得到提升, 但同时也使内部发热和功耗问题更加紧迫<sup>[1,2]</sup>. 传统场效应晶体管 (metal-oxide-semiconductor field-effect transistors, MOSFETs), 在室温下表现出亚阈值摆幅 (subthreshold swing, SS) 为 60 mV/decade 的显著限制 ((1) 式), 这称为“Boltzmann 暴政”<sup>[3]</sup>. 因此, 开发能够克服“Boltzmann 暴政”的陡坡器件是解决集成电路高功耗问题的有效途径之一. 据报道, 在常规 MOSFET 器件的栅极叠层上添加铁电层形成的负电容场效应晶体管 (negative capacitance field effect transistors, NCFET) 可以利用铁电层的负电容 (negative capacitance, NC) 效应实现内部电压放大, 以在室温下实现小于

60 mV/decade 的 SS.

$$\begin{aligned} SS &= \frac{\partial V_{gs}}{\partial \log_{10}(I_{ds})} = \frac{\partial \phi_s}{\partial \log_{10}(I_{ds})} \times \frac{\partial V_{gs}}{\partial \phi_s} \\ &= \left(1 + \frac{C_s}{C_{in}}\right) \times \frac{k_B T}{q} \ln 10 \\ &\approx \left(1 + \frac{C_s}{C_{in}}\right) \times 60 \frac{\text{mV}}{\text{dec}} \Big|_{T=300\text{ K}}, \end{aligned} \quad (1)$$

其中  $V_{gs}$  是栅极电压,  $I_{ds}$  是漏极电流,  $\phi_s$  是沟道中的表面电势,  $C_s$  是半导体电容,  $C_{in}$  是绝缘体 (栅极氧化物) 电容,  $k_B$  是玻尔兹曼常数,  $T$  是温度,  $q$  是单位电荷.

近年来, 针对 NCFET 的研究不断增多, NCFET 的结构、工艺和参数变化以及栅极材料都会对其性能造成影响<sup>[4-7]</sup>. 通过解析模型研究 NCFET 的电学性能是一种直观的方法. 例如, Lee 等<sup>[8]</sup> 开发了一个半解析模型, 它结合了数值和解析方法的优点. Peng 等<sup>[9]</sup> 利用解析模型研究了铁电材料特性

\* 国家自然科学基金 (批准号: 51602159) 和南京邮电大学校级自然科学基金 (批准号: NY222128) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: baigang@njupt.edu.cn

对 NC-Ge-pFET 电学性能的影响. Jiang 等<sup>[10]</sup> 开发了一个全解析的电流-电压模型以描述 NCFET 的电学特征. Gaidhane 等<sup>[11]</sup> 推导了一个显式求解长沟道非掺杂对称双栅 NCFET(double-gate, DG-NCFET) 漏电流的解析模型.

铁电性能的提高被认为有利于增强负电容效应. 应变工程是调控氧化物铁电薄膜晶体结构与物理特性的有效途径, 传统意义的应变工程主要是指单晶衬底与薄膜之间晶格参数的不匹配所带来的外延应变<sup>[12–16]</sup>. 此外, 热膨胀失配应变可以在原本没有晶格失配的情况下产生较大的应变, 且能够在较厚的膜上产生连续可调的应变; 改变薄膜生长条件、离子注入和化学掺杂也可以引入应变工程; 超快光激发也可诱导较大的应变<sup>[16]</sup>. 应变调节铁电薄膜性能理论方面, Pertsev 等<sup>[17]</sup> 利用非线性热力学研究了错配应变对外延单畴  $\text{PbZr}_x\text{Ti}_{1-x}\text{O}_3$  (PZT) 薄膜物理性能的影响. 我们也用 Landau-Khalatnikov 理论研究过错配应变对 PZT 薄膜的 NC 效应的调节作用<sup>[18]</sup>. 也有研究者通过第一原理研究了双轴应变对 PZT 基 NCFET 性能的影响<sup>[19]</sup>. PZT 材料作为传统无机铁电材料之一, 这一类材料具有居里温度点高、抗疲劳特性优异和自发极化强度大等优点.  $\text{CuInP}_2\text{S}_6$  (CIPS) 铁电材料<sup>[20–22]</sup> 是一种有前途的范德瓦耳斯层状二维铁电材料, 其可以按比例缩小到单层极限并且可以很好地与二维 (2D) 材料耦合. 另外有报道通过 Landau-Devonshire 理论和实验结果<sup>[21]</sup> 预测到错配应变强烈影响纳米级 CIPS 的铁电相变和性能.

然而, 目前还没有关于应变调节铁电 NCFET 器件的电学性能的报告, 尤其是从分析模型的角度来看. 在这项工作中, 使用 Landau-Ginzburg-Devonshire (LGD) 唯象学理论推导了应变调节 NCFET 电学特性的解析模型. 此外, 基于该模型讨论并比较了薄膜厚度和双轴应变对 PZT 基 NCFETs 和 CIPS 基 NCFETs 电性能的影响. 此外利用 TCAD 模拟对应变调制器件电流模型的准确性进行了验证<sup>[23]</sup>.

## 2 模型建立

### 2.1 器件结构

DG-NCFET 的截面示意图如图 1(a) 所示, 其结构只需要在常规 MOSFET 栅极叠层中增加一个提供负电容的铁电薄膜层, NCFET 的生产工艺与常规 MOSFET 工艺技术兼容.

在本文中, 沟道厚度  $t_{\text{Si}}$  被设置为 5 nm, 绝缘层厚度  $t_{\text{in}}$  设置为 0.2 nm, 铁电层 (ferroelectric, FE) 厚度  $t_{\text{fe}}$  可变. 硅 (Si) 被用作沟道材料, 沟道是本征的, 假设沟道符合缓变沟道近似. 二氧化硅 ( $\text{SiO}_2$ ) 用作绝缘层材料. 图 1(b) 显示了对称器件一半的简化小信号电容模型. 其中  $C_{\text{fe}}$ ,  $C_{\text{in}}$  和  $C_{\text{s}}$  分别是铁电层、绝缘层和半导体沟道单位面积电容;  $C_{\text{eq}}$  是总的栅介质层等效单位面积电容, 即  $C_{\text{fe}}$  和  $C_{\text{in}}$  的串联;  $C_{\text{mos}}$  是 MOS 结构的总单位面积电容, 即  $C_{\text{s}}$  和  $C_{\text{in}}$  的串联;  $C_{\text{g}}$  为栅电极到地的总单位面积电容.  $V_{\text{gs}}$  和  $V_{\text{ds}}$  分别为栅压和漏压.

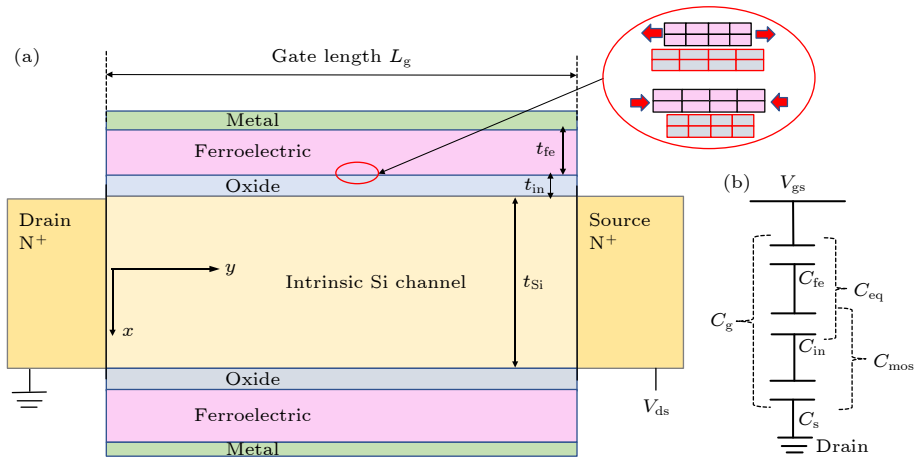


图 1 (a) DG-NCFET 示意图; (b) 简化的小信号电容模型

Fig. 1. (a) Schematic of DG-NCFETs; (b) simplified small-signal capacitance model.

## 2.2 模型推导

沟道中的载流子浓度  $n(x)$  可由泊松方程和玻尔兹曼分布定律导出<sup>[10]</sup>:

$$n(x) = \frac{n_0}{\cos^2 \left[ \left( \frac{q^2 n_0}{2\varepsilon_{\text{Si}} k_{\text{B}} T} \right)^{\frac{1}{2}} x \right]}, \quad (2)$$

其中  $n_0$  是沟道中心的可动电子浓度;  $\varepsilon_{\text{Si}}$  是 Si 的介电常数;  $T$  是绝对温度, 本文为 300 K.

沟道的表面电势  $\phi_s$  可以表示为<sup>[10]</sup>

$$\phi_s = V_{\text{ch}} + \frac{k_{\text{B}} T}{q} \ln \left\{ \frac{n_0}{n_i} \sec^2 \left[ \left( \frac{q^2 n_0}{2\varepsilon_{\text{Si}} k_{\text{B}} T} \right)^{\frac{1}{2}} \frac{t_{\text{Si}}}{2} \right] \right\}, \quad (3)$$

其中  $V_{\text{ch}}$  是沿着沟道方向的电子准费米势,  $n_i$  是本征载流子浓度.

单位面积的总移动电荷  $Q$  表示为

$$\begin{aligned} Q &= \int_0^{t_{\text{Si}}/2} n(x) dx \\ &= (2\varepsilon_{\text{Si}} k_{\text{B}} T n_0)^{\frac{1}{2}} \tan \left[ \left( \frac{q^2 n_0}{2\varepsilon_{\text{Si}} k_{\text{B}} T} \right)^{\frac{1}{2}} \right]. \end{aligned} \quad (4)$$

电压平衡条件可以表示为

$$\begin{aligned} V_{\text{gs}} - \phi_s - V_{\text{fb}} &= V_{\text{in}} + V_{\text{fe}}(Q), \\ V_{\text{in}} &= \frac{Q}{C_{\text{in}}}, \quad C_{\text{in}} = \frac{\varepsilon_{\text{in}}}{t_{\text{in}}}, \end{aligned} \quad (5)$$

其中,  $V_{\text{fb}}$  是平带电压,  $V_{\text{in}}$  是绝缘层电压,  $\varepsilon_{\text{in}}$  是氧化层材料的介电常数,  $V_{\text{fe}}(Q)$  是依赖于  $Q$  的铁电层的电压.

FE 层的电压可以通过结合 Landau-Khalatnikov(LK) 方程<sup>[24]</sup> 和 LGD 唯象理论<sup>[25]</sup> 获得.

根据 LGD 唯象理论, 仅考虑平面外极化 ( $P_1 = 0, P_2 = 0, P_3 \neq 0$ ), PZT 材料的热力学势表示为

$$\begin{aligned} U_{\text{PZT}} &= \frac{S_{\text{m}}^2}{s_{11} + s_{12}} + a_{\text{PZT}} P_3^2 + b_{\text{PZT}} P_3^4 \\ &\quad + c_{\text{PZT}} P_3^6 - P_3 \frac{V_{\text{fe}}}{t_{\text{fe}}}, \end{aligned} \quad (6)$$

$$a_{\text{PZT}} = a_1 - S_{\text{m}} \frac{2Q_{12}}{s_{11} + s_{12}}, \quad (7)$$

$$b_{\text{PZT}} = a_{11} + \frac{Q_{12}^2}{s_{11} + s_{12}}, \quad (8)$$

$$c_{\text{PZT}} = a_{111}, \quad (9)$$

其中  $P_3$  是极化分量;  $s_{11}$  和  $s_{12}$  是弹性顺度;  $Q_{12}$  是

电致伸缩常数;  $a_1$  是介电刚度,  $a_1 = (T - T_0)/2\varepsilon_0 C$  ( $T_0$  是居里外斯温度,  $\varepsilon_0$  是真空介电常数,  $C$  是居里外斯常数);  $a_{11}$  和  $a_{111}$  是高级介电刚度系数, 可被视为与温度无关;  $t_{\text{fe}}$  是铁电层的厚度;  $V_{\text{fe}}$  是施加到铁电层的电压;  $S_{\text{m}}$  为弹性错配应变.

同样地, CIPS 的热力学势表示为<sup>[21]</sup>

$$\begin{aligned} U_{\text{CIPS}} &= a_{\text{CIPS}} P_3^2 + b_{\text{CIPS}} P_3^4 + c_{\text{CIPS}} P_3^6 \\ &\quad + d_{\text{CIPS}} P_3^8 - P_3 \frac{V_{\text{fe}}}{t_{\text{fe}}}, \end{aligned} \quad (10)$$

$$a_{\text{CIPS}} = \frac{1}{2} \left[ \alpha_{\text{T}} (T - T_0) - 2S_{\text{m}} \frac{Q_{13} - Q_{23}}{s_{11} + s_{12}} \right], \quad (11)$$

$$\begin{aligned} b_{\text{CIPS}} &= \frac{1}{4} \left[ \beta + \frac{(Q_{13} + Q_{23})^2}{s_{11} + s_{12}} + \frac{(Q_{13} - Q_{23})^2}{s_{11} - s_{12}} \right. \\ &\quad \left. - 4S_{\text{m}} \frac{Z_{133} + Z_{233}}{s_{11} + s_{12}} \right], \end{aligned} \quad (12)$$

$$\begin{aligned} c_{\text{CIPS}} &= \frac{1}{6} \left\{ \gamma + 3 \left[ \frac{(Q_{13} + Q_{23})(Z_{133} + Z_{233})}{s_{11} + s_{12}} \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + \frac{(Q_{13} - Q_{23})(Z_{133} - Z_{233})}{s_{11} - s_{12}} \right] \right\}, \end{aligned} \quad (13)$$

$$\begin{aligned} d_{\text{CIPS}} &= \frac{1}{8} \left\{ \delta + \left[ \frac{(Z_{133} + Z_{233})^2}{s_{11} + s_{12}} \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + \frac{(Z_{133} - Z_{233})^2}{s_{11} - s_{12}} \right] \right\}, \end{aligned} \quad (14)$$

其中  $Q_{i3}$  和  $Z_{i33}$  表示线性和非线性电致伸缩应变张量分量;  $\alpha_{\text{T}}(T - T_0)$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$  和  $\delta$  是体 CIPS 的朗道系数. CIPS 的线性电致伸缩系数 (在 300 K 时  $Q_{13} > 0$ ) 与大多数经典钙钛矿铁电体的线性电伸缩系数 ( $Q_{12} < 0$ )<sup>[21]</sup> 不同. 根据经典的朗道理论, 可以得到系数  $\beta$ ,  $\gamma$  和  $\delta$  与温度无关, 但是在许多铁性材料, 包括  $\text{CuInP}_2(\text{S,Se})_6$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$  和  $\delta$  能随着温度、压力和化学成分变化而改变它们的符号, 导致临界现象出现. 通过对温度依赖的介电常数和自发极化实验数据以及单轴和静水压下的晶格常数的拟合, 确定了  $T_0$ ,  $\alpha_{\text{T}}$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$ ,  $\delta$ ,  $Q_{i3}$  和  $Z_{i33}$  的值<sup>[21]</sup>. 因此, CIPS 的朗道自由能表达式与 PZT 不同. 表 1 列出了 PZT 和 CIPS 计算所需要的热力学参数.

FE 层的电压可以通过找到自由能  $U$  的最小值来确定:

$$\partial U / \partial Q = 0. \quad (15)$$

由于自发极化  $P$  比  $\varepsilon_0 E$  大得多, 每单位面积的电位移或电荷可以表示为  $Q(D) = P + \varepsilon_0 E \approx P$ .

因此, FE 层的电势 ( $V_{fe}$ ) 与电荷 ( $Q$ ) 的关系可表示为

$$V_{PZT}(Q) = 2a_{PZT}t_{fe}Q + 4b_{PZT}t_{fe}Q^3 + 6c_{PZT}t_{fe}Q^5 = \alpha_{PZT}Q + \beta_{PZT}Q^3 + \gamma_{PZT}Q^5, \quad (16)$$

$$V_{CIPS}(Q) = 2a_{CIPS}t_{fe}Q + 4b_{CIPS}t_{fe}Q^3 + 6c_{CIPS}t_{fe}Q^5 + 8d_{CIPS}t_{fe}Q^7 = \alpha_{CIPS}Q + \beta_{CIPS}Q^3 + \gamma_{CIPS}Q^5 + \delta_{CIPS}Q^7. \quad (17)$$

最后, 结合 (4) 式, 使用 Pao-Sah 积分公式获得漏极电流 [10,26]:

$$I_{ds} = 2\mu_n \frac{W}{L_g} \int_0^{V_{ds}} Q dV_{ch} = 2\mu_n \frac{W}{L_g} \int_{n_{os}}^{n_{od}} Q(n_0) \frac{dV_{ch}}{dn_0} dn_0 =$$

$$\frac{2\mu_n \varepsilon_{Si} W}{L_g} \left( \frac{2k_B T}{q} \right)^2 \left\{ -\frac{q^2 n_0 t_{Si}}{8\varepsilon_{Si} k_B T} + \left( \frac{q^2 n_0}{2\varepsilon_{Si} k_B T} \right)^{1/2} \tan \left[ \left( \frac{q^2 n_0}{2\varepsilon_{Si} k_B T} \right)^{1/2} \frac{t_{Si}}{2} \right] \right.$$

$$+ \left( \alpha_{CIPS/PZT} + \frac{1}{C_{in}} \right) \frac{q^2 n_0}{4k_B T} \tan^2 \left[ \left( \frac{q^2 n_0}{2\varepsilon_{Si} k_B T} \right)^{1/2} \frac{t_{Si}}{2} \right] + \frac{3}{4} \beta_{CIPS/PZT} q^2 \varepsilon_{Si} n_0^2 \tan^4 \left[ \left( \frac{q^2 n_0}{2\varepsilon_{Si} k_B T} \right)^{1/2} \frac{t_{Si}}{2} \right]$$

$$\left. + \frac{5}{6} \gamma_{CIPS/PZT} \left( 2k_B T q^2 \varepsilon_{Si}^2 \right) n_0^3 \tan^6 \left[ \left( \frac{q^2 n_0}{2\varepsilon_{Si} k_B T} \right)^{1/2} \frac{t_{Si}}{2} \right] + \frac{7}{8} \delta_{CIPS} (2k_B T q)^2 \varepsilon_{Si}^3 n_0^4 \tan^8 \left[ \left( \frac{q^2 n_0}{2\varepsilon_{Si} k_B T} \right)^{1/2} \frac{t_{Si}}{2} \right] \right\} \Bigg|_{n_{od}}^{n_{os}}, \quad (18)$$

表 1 PbZr<sub>0.2</sub>Ti<sub>0.8</sub>O<sub>3</sub> [18] 和 CuInP<sub>2</sub>S<sub>6</sub> [21] 材料的相关系数 (温度  $T$  的单位为 K)

Table 1. Paramaters for bulk ferroelectric PbZr<sub>0.2</sub>Ti<sub>0.8</sub>O<sub>3</sub> and CuInP<sub>2</sub>S<sub>6</sub> [18,21].

	Coefficient	Value
PZT	$a_1/(C^{-2} \cdot m^2 \cdot N)$	$1.33(T - 665.7) \times 10^5$
	$a_{11}/(C^{-4} \cdot m^6 \cdot N)$	$4.764 \times 10^7$
	$a_{111}/(C^{-4} \cdot m^6 \cdot N)$	$1.336 \times 10^8$
	$s_{11}/(C^{-6} \cdot m^{10} \cdot N)$	$10.5 \times 10^{-12}$
	$s_{12}/(C^{-6} \cdot m^{10} \cdot N)$	$-3.7 \times 10^{-12}$
	$Q_{12}/(m^4 \cdot C^{-2})$	$-0.0460$
CIPS	$\alpha_T/(C^{-2} \cdot mJ \cdot K^{-1})$	$1.64067 \times 10^7$
	$T_0/K$	$292.67$
	$\alpha/(C^{-4} \cdot m^5 \cdot J)$	$3.148 \times 10^{12}$
	$\gamma/(C^{-6} \cdot m^9 \cdot J)$	$-1.0776 \times 10^{16}$
	$\delta/(C^{-8} \cdot m^{13} \cdot J)$	$7.6318 \times 10^{18}$
	$Q_{13}/(C^{-2} \cdot m^4)$	$1.70136 - 0.00363T$
	$Q_{23}/(C^{-2} \cdot m^4)$	$1.13424 - 0.00242T$
	$Q_{33}/(C^{-2} \cdot m^4)$	$-5.622 + 0.0105T$
	$Z_{133}/(C^{-2} \cdot m^4)$	$-2059.65 + 0.8T$
	$Z_{233}/(C^{-2} \cdot m^4)$	$-1211.26 + 0.45T$
	$s_{11}/Pa^{-1}$	$1.510 \times 10^{-11}$
	$s_{12}/Pa^{-1}$	$0.183 \times 10^{-11}$
结构参数	$L_g/nm$	$1000$
	$W/nm$	$1000$

其中  $V_{ds}$  是漏极电压;  $L_g$  是栅极的长度;  $W$  是栅极的宽度;  $\mu_n$  是有效电子迁移率, 在本文中为  $300 \text{ cm}^2 \cdot \text{V}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$ ;  $n_{od}$  和  $n_{os}$  分别为漏极和源极沟道中心的电子浓度.

### 3 结果与讨论

图 2(a) 和图 2(b) 分别显示了 PZT 和 CIPS 两种材料在不同双轴错配应变下的自由能势阱曲线. 对于 PZT, 随着压缩应变的增加, 势阱逐渐变深, 能量势垒变高, 表明负电容效应增强 [27,28], 而在拉伸应变作用下, 自由能势阱曲线变化趋势相反. 对于 CIPS, 当施加拉伸应变时, 在  $P = 0$  附近的自由能曲线中有两个明显的势阱, 并且随着拉伸应变的增加, 两个对称势阱的深度增加, 势垒变高. CIPS 在压缩应变下存在两个潜在的势垒.

图 3(a) 和图 3(b) 分别说明了 PZT 和 CIPS 的极化特性. PZT 在  $P = 0$  附近有一个 NC 区,  $P-V_{fe}$  曲线斜率 ( $dP/dV_{fe}$ ) 由于双轴错配应变而显著变化. 当施加压缩应变时, 低电压下的曲线斜率增加, NC 效应增强; 而施加拉伸应变时, 低电压下的曲线斜率减小, NC 效应减弱. 对于 CIPS, 没有施加应变时有两个 NC 区域; 施加应变时曲线斜率随着压缩应变的增加而减小, 表明 NC 效应减弱. 然而, 在拉伸应变下的 CIPS 在  $P = 0$  附近只有一个 NC 区域, 并且曲线斜率随着拉伸应变的增加而增加, 表明 NC 效应增强.

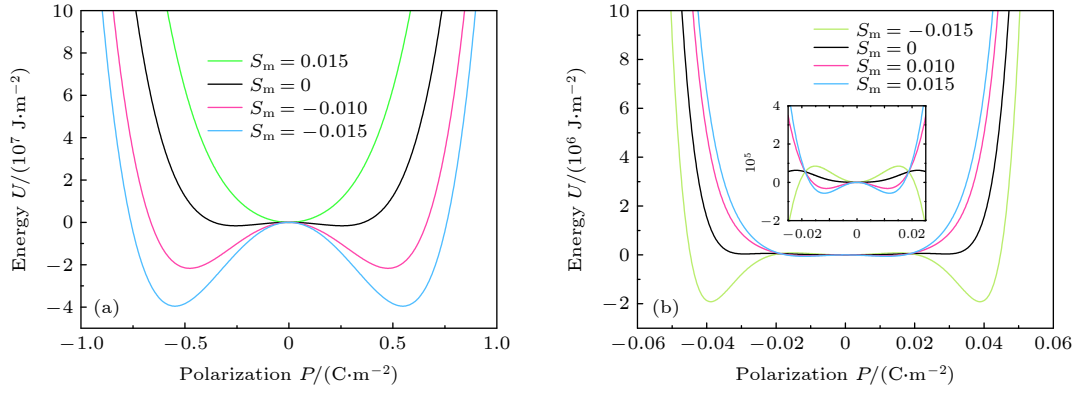


图 2 (a) PZT 和 (b) CIPS 的自由能  $U$  作为不同应变下电极化  $P$  的函数的双阱图

Fig. 2. Double-well landscape of the free energy  $U$  for (a) PZT and (b) CIPS, respectively, as a function of the electric polarization  $P$  under different strains.

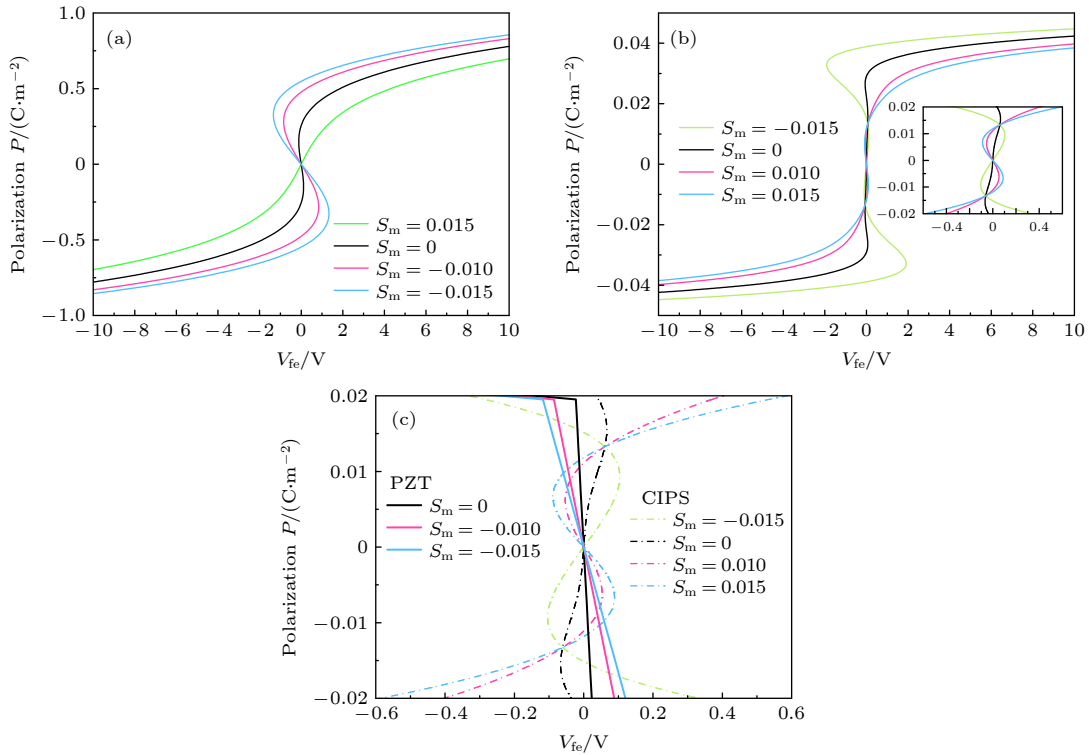


图 3 (a) PZT 和 (b) CIPS FE 层在不同应变下电压  $V_{fe}$  和极化  $P$  之间的关系; (c) PZT 和 CIPS 之间  $P-V_{fe}$  曲线的比较

Fig. 3. Relationship between the voltage  $V_{fe}$  and the polarization  $P$  under different strains for (a) PZT and (b) CIPS FE layers, respectively; (c) comparison on  $P-V_{fe}$  curves between PZT and CIPS.

图 4(a) 和图 4(b) 分别显示了在不同应变和厚度下 PZT 基和 CIPS 基 NCFET 的表面电势  $\phi_s$  作为栅极电压  $V_{gs}$  的函数。对于两种 NCFET, 表面电势均随着铁电层厚度的增加而增加。对于 PZT 基的 NCFET, 表面电位由于拉伸应变而降低, 由于压缩应变而增加。对于 CIPS 基的 NCFET, 器件在拉伸应变下的表面电势曲线更陡, 表明器件的电压转换能力增强。可以注意到, 当没有施加应变时, CIPS 基 NCFET 在较高栅极电压 (约 0.8 V)

下表现出滞后行为 (本模型不考虑)。通过比较两种 NCFET 发现, 在较高栅极电压范围 (约  $>0.7$  V) 时, 施加压缩应变的 PZT 基 NCFET 的表面电势比常规 MOSFET ( $t_{fe}=0$  nm) 高, 而施加拉伸应变的 CIPS 基 NCFET 可以在较低栅极电压下 (约 0.5—0.7 V) 实现表面电势高于常规 MOSFET。表面电势放大的原因可以通过以下事实来理解: 当栅极电压逐渐增加时, FE 层中的铁电极化  $P$  逐渐增加, 由于双轴错配应变不同和 FE 层厚度不同,



$P$ - $V_{fe}$  曲线斜率不同. 由于  $dP/dV_{fe} < 0$  (表明 NC 效应), 铁电层电压  $V_{fe}$  可能变为负, 如图 5 所示.  $V_{fe}$  负压降引起表面电势的增加, 随着 FE 层越厚、PZT 的压缩应变越大或 CIPS 的拉伸应变越大, 表面电势越大. 由于 FE 层电压  $V_{fe}$  的负值增加了有效栅极电压和沟道电势, 因此与常规 MOSFET 相比, 强反转区域中的总电荷增加.

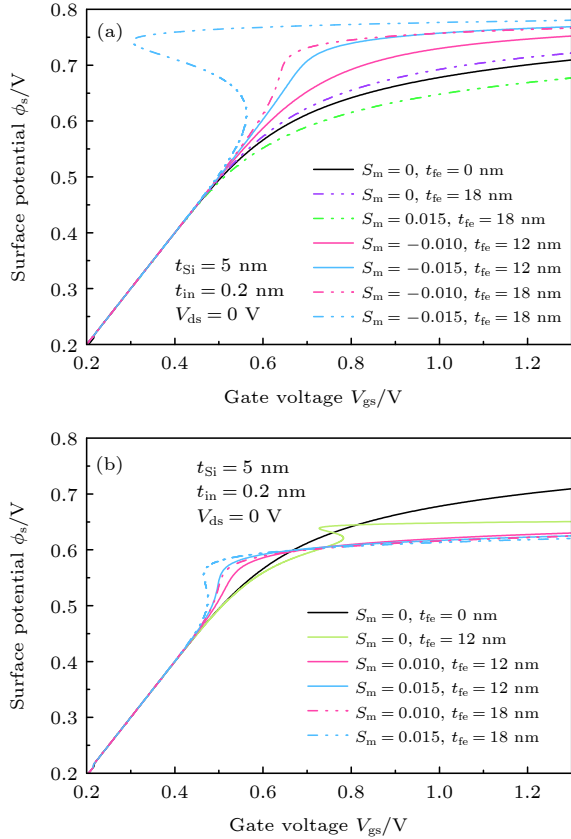


图 4 不同 FE 层厚度和双轴应变对 (a) PZT 基 NCFETs 和 (b) CIPS 基 NCFETs 表面电势的影响

Fig. 4. Effects of the FE layer thickness and biaxial strain on the surface potential for (a) PZT based NCFETs and (b) CIPS based NCFETs, respectively.

图 6 展示了基于该模型计算的不同 FE 层厚度和双轴应变下 NCFET 的表面电势增益  $G$ .

$$G = \frac{d\phi_s}{dV_{gs}} = \frac{1}{1 + \frac{C_s}{C_{eq}}}, \quad \frac{1}{C_{eq}} = \frac{1}{C_{in}} + \frac{1}{C_{fe}}. \quad (19)$$

对于基于 PZT 的 NCFET,  $G$  随着压缩应变增加而增加, 如图 6(a) 所示. 对于基于 CIPS 的 NCFET, 在拉伸应变下  $G$  增加. 当  $G > 1$  时, 意味着器件的内部电压被放大,  $C_{eq} < 0$ , 即器件工作在 NC 区.

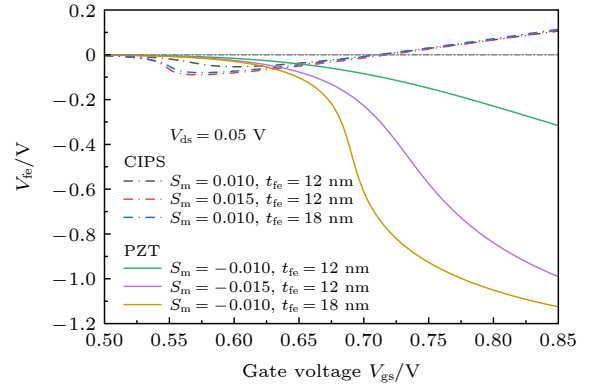


图 5 在不同 FE 膜厚度和双轴错配应变下, PZT 基 NCFETs 和 CIPS 基 NCFETs 的  $V_{gs}$ - $V_{fe}$  曲线

Fig. 5.  $V_{gs}$ - $V_{fe}$  curves for PZT based NCFETs and CIPS based NCFETs under different FE film thicknesses and biaxial misfit strains.

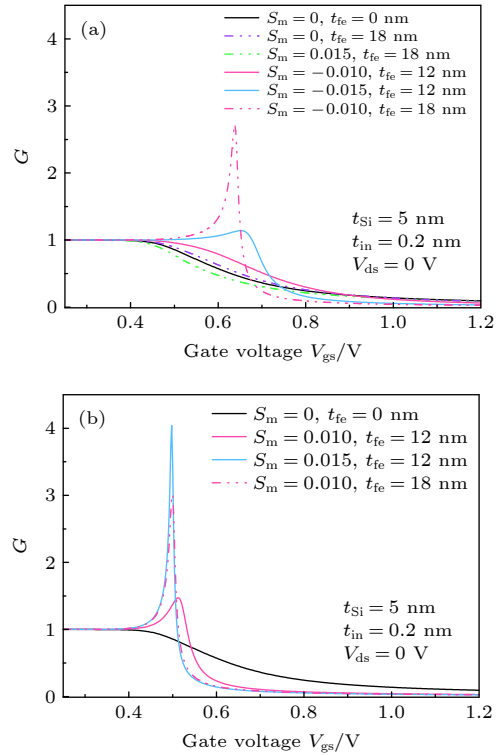


图 6 FE 层厚度和双轴应变分别对 (a) PZT 基 NCFETs 和 (b) CIPS 基 NCFETs 的电压增益  $G$  的影响

Fig. 6. Effects of the FE layer thickness and biaxial strain on the voltage gain  $G$  for (a) PZT based NCFETs and (b) CIPS based NCFETs, respectively.

不同 FE 层厚度和双轴应变作用下的两种 NCFET 的转移特性如图 7 所示. 模型分析结果与 TCAD 模拟的数值仿真结果基本一致. 对于基于 PZT 的 NCFET, 导通电流随着 FE 层厚度或压缩应变的增加而增加, 同时曲线变得更陡, 可以实现比常规 MOSFET 更好的性能, 而拉伸应变提供了

相反的效果 (图 7(a)). 对于基于 CIPS 的 NCFET, 随着 FE 层厚度或拉伸应变的增加, 导电电流在一定栅极电压内增加, 传输特性曲线变得更陡, 性能优于常规 MOSFET, 如图 7(b) 所示. 拉伸应变对 CIPS 基 NCFET 的影响与压缩应变对 PZT 基 NCFET 的影响不同. 通过比较两种 NCFET 发现, 在低栅极电压下, 基于 CIPS 的 NCFET 的导电电流大于基于 PZT 的 NCFET. 在高栅极电压下, 基于 PZT 的 NCFET 的导电电流大于常规 MOSFET 的, 而基于 CIPS 的 NCFET 的导电电压低于常规 MOSFET 的. 结果可解释为: 基于 PZT 的 NCFET 在压缩应变条件下, 在栅极电压范围内其表面电势都较高; 而对于 CIPS, 在拉伸应变条件下, 仅是在较低栅极电压下其表面电势较高. 根据 (3) 式和 (18) 式, 沟道中心可动电子浓度  $n_0$  与表面电势正相关, 源漏电流  $I_{ds}$  与  $n_0$  正相关, 因此  $I_{ds}$  也与表面电势正相关. 因此, 基于 PZT 的 NCFET 的  $I_{ds}$  的

增加是由于在压缩应变下其表面电势的增加. 在一定的栅极电压范围内, 基于 CIPS 的 NCFET 的  $I_{ds}$  的增加是由于拉伸应变引起的表面电势的增加. 图 8 是从模型中获得的 NCFET 的  $n_0$  与  $V_{gs}$  的关系图, 与  $I_{ds}$ - $V_{gs}$  曲线类似.  $n_0$  随  $V_{gs}$  的变化也反映了栅压对沟道的控制.

图 9 绘制了从解析模型计算的  $SS$ - $I_{ds}$  曲线. 如图 9(a) 所示, 对于 PZT 基 NCFET, 压缩应变的增加或 FE 层厚度的增加可将  $SS$  降低到 60 mV/dec 以下. 根据模型计算, 当  $S_m = -0.010$  时, 厚度从 12 nm 增至 18 nm, 最低  $SS$  从 60 mV/dec 降至 21.9 mV/dec; 当厚度为 12 nm, 应变从 -0.010 增至 -0.015, 最低  $SS$  从 60 mV/dec 降到 52.6 mV/dec. 如图 9(b) 所示, 对于 CIPS 基 NCFET, 拉伸应变的增加或铁电层厚度的增加可以将  $SS$  降低到 60 mV/dec 以下并且没有滞后行为. 根据模型计算, 当铁电层厚度从 12 nm 增加到 18 nm 时相同

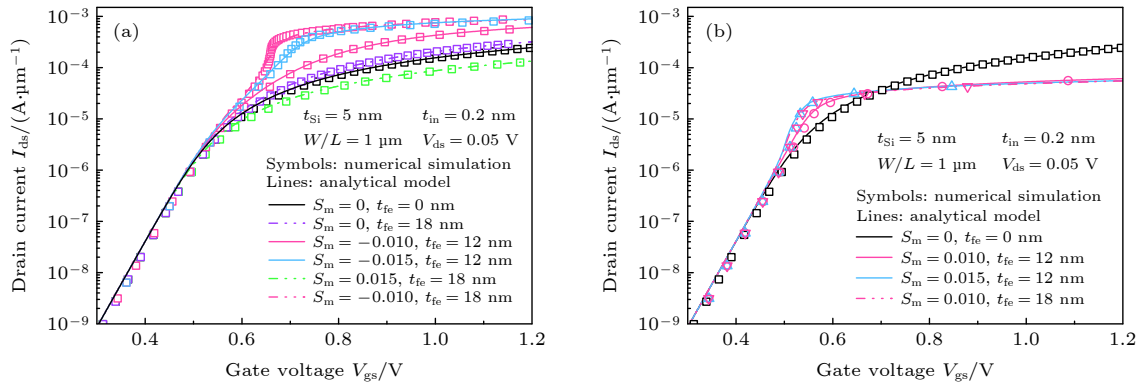


图 7 FE 层厚度和应变对 (a) PZT 基 NCFETs 和 (b) CIPS 基 NCFETs 传输特性图的影响

Fig. 7. Effects of the FE layer thickness and strain on the transfer characteristic graph for (a) PZT based NCFETs and (b) CIPS based NCFETs, respectively.

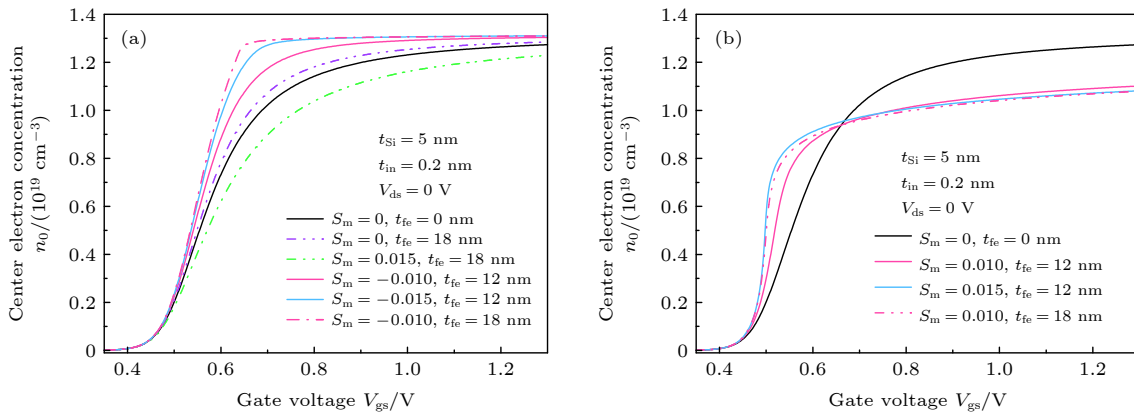


图 8 (a) PZT 基 NCFETs 和 (b) CIPS 基 NCFETs 的 FE 层厚度和双轴错配应变对沟道中心电子密度  $n_0$  的影响

Fig. 8. Effects of the FE layer thickness and biaxial misfit strain on electron density  $n_0$  at the center of the channel for (a) PZT based NCFETs and (b) CIPS based NCFETs, respectively.

应变条件下, 最低  $SS$  值从 40.8 mV/dec 降到约 19.8 mV/dec, 在相同铁电层厚度 12 nm 时, 应变从 0.01 增加到 0.015, 最低  $SS$  值从 40.9 mV/dec 降到 14.8 mV/dec 左右. 与 CIPS 基 NCFET 相比, PZT 基 NCFET 具有更大的  $SS$  低于 60 mV/dec 时的导通电流范围. 然而, 由于低矫顽场, CIPS 基 NCFET 在最小  $SS$  下的漏极电流低于 PZT 基 NCFET(图 3).

图 10 为 PZT 基和 CIPS 基的两种 NCFET 在不同 FE 层厚度和不同双轴错配应变下的输出特性曲线. 当  $V_{gs} = 0.6$  V 时, 如图 10(a) 和图 10(b) 所示, 应变调节下的两种基于不同 FE 材料的 NCFET 的饱和电流均高于常规 MOSFET. 应变对 CIPS 基 NCFET 的饱和电流的影响比对 PZT 基 NCFET 更显著. 如图 10(c) 和图 10(d) 所示, 当  $V_{gs} = 0.8$  V 时, 与 CIPS 基 NCFET 相比, PZT 基 NCFET 的

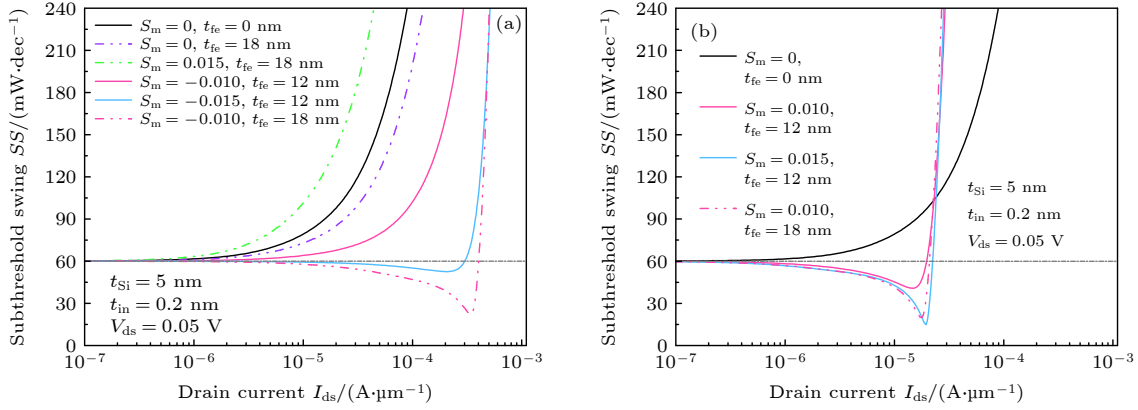


图 9 (a) 基于 PZT 的 NCFETs 和 (b) 基于 CIPS 的 NCFETs 的 FE 层厚度和应变对  $SS$  的影响

Fig. 9. Effects of the FE layer thickness and strain on  $SS$  for (a) PZT based NCFETs and (b) CIPS based NCFETs, respectively.

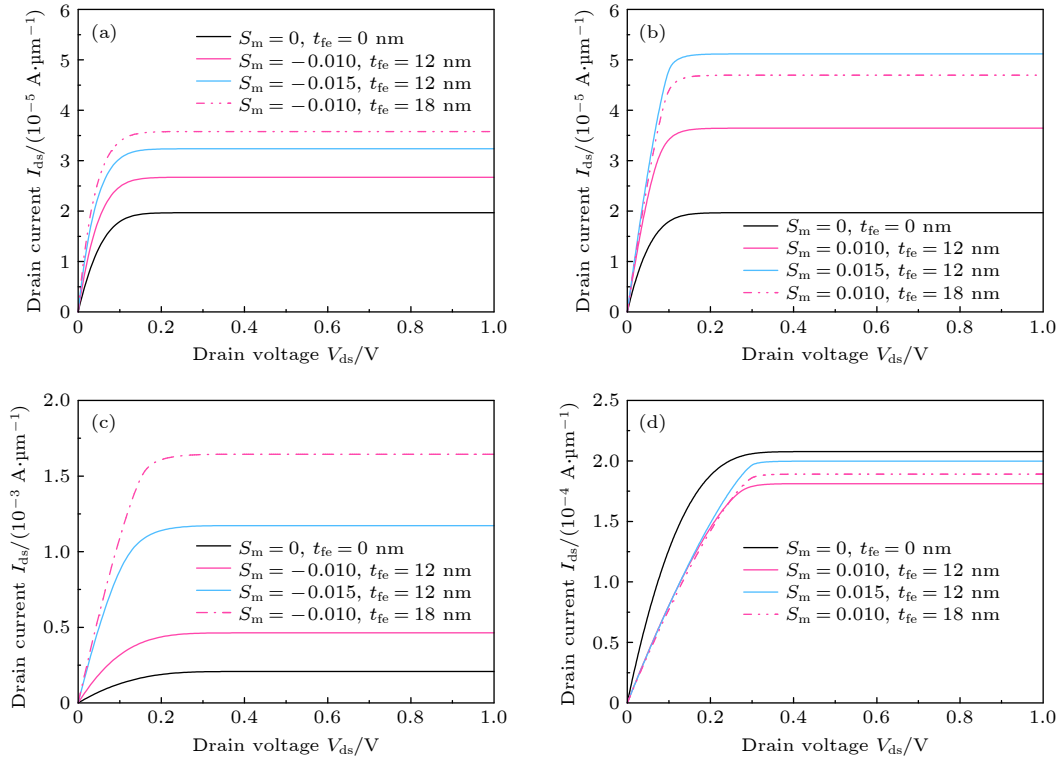


图 10 (a)  $V_{gs} = 0.6$  V 和 (c)  $V_{gs} = 0.8$  V 时 FE 层厚度和应变对 PZT 基 NCFET 输出特性的影响; (b)  $V_{gs} = 0.6$  V 和 (d)  $V_{gs} = 0.8$  V 时 FE 层厚度和应变对 CIPS 基的 NCFET 输出特性的影响

Fig. 10. Effects of the FE layer thickness and strain on output characteristics for PZT based NCFETs at (a)  $V_{gs} = 0.6$  V and (c)  $V_{gs} = 0.8$  V; for CIPS based NCFETs at (b)  $V_{gs} = 0.6$  V and (d)  $V_{gs} = 0.8$  V.



饱和电流显著增加. CIPS 基 NCFET 的饱和电流比 PZT 基 NCFET 的饱和电流小得多, 并且也比常规 MOSFET 的小. 原因如下: 当  $V_{gs} = 0.6$  V 时, FE 层的铁电极化  $P$  相对较小. CIPS 和 PZT 都满足  $dP/dV_{fe} < 0$ , 这意味着它们都在 NC 区, 因此电流大于常规 MOSFET 的电流. 然而, CIPS 的  $P$ - $V_{fe}$  曲线斜率大于 PZT 的 (图 3(c)), 因此 CIPS 基 NCFET 的  $V_{fe}$  绝对值大于 PZT 基 NCFET 的  $V_{fe}$  (图 5), 所以 CIPS 基 NCFET 对应于更大的表面电势从而  $I_{ds}$  更大. 当  $V_{gs} = 0.8$  V 时, FE 层的铁电极化  $P$  继续增大, PZT 处于 NC 区, 而 CIPS 不在 NC 区, 如图 5 所示. 因此, PZT 基 NCFET 的  $I_{ds}$  大大增加并大于常规 MOSFET 的  $I_{ds}$ , 而 CIPS 基 NCFET 的  $I_{ds}$  小于常规 MOSFET 的  $I_{ds}$ .

## 4 结 论

本文基于 LGD 唯象理论建立了应变调节对称双栅负电容场效应晶体管的电学特性的解析模型. 基于该模型, 分别研究了铁电薄膜厚度和双轴错配应变对 PZT 基负电容场效应晶体管和 CIPS 基负电容场效应晶体管电学性能的影响. 结果表明, 增加铁电层的厚度可以改善两种负电容场效应晶体管的性能, 但错配应变对两者的影响不同: 对于 PZT 基负电容场效应晶体管, 压缩应变增强了高栅极电压范围内的负电容效应, 而 CIPS 基负电容场效应晶体管在低栅极电压区域内、拉伸应变下具有更强的负电容效应. 采用应变和厚度共同调控有助于进一步降低负电容晶体管的 SS 和器件的进一步微缩.

## 参考文献

- [1] Danowitz A, Kelley K, Mao J, Stevenson J P, Horowitz M 2012 *Commun. ACM* **55** 55
- [2] Sakurai T 2004 *IEICE Trans. Electron.* **87** 429
- [3] Salahuddin S, Datta S 2008 *Nano Lett.* **8** 405
- [4] Tu L, Wang X, Wang J, Meng X, Chu J 2018 *Adv. Electron. Mater.* **4** 1800231
- [5] Bacharach J, Ullah M S, Fouad E 2019 *IEEE 62nd International Midwest Symposium on Circuits and Systems (MWSCAS)* Dallas, TX, USA, August 4–7, 2019 p180
- [6] Sakib F I, Mullick F E, Shahnewaz S, Islam S, Hossain M 2020 *Semicond. Sci. Technol.* **35** 025005
- [7] Chen J D, Han W H, Yang C, Zhao X S, Guo Y Y, Zhang X D, Yang F H 2020 *Acta Phys. Sin.* **69** 137701 (in Chinese) [陈俊东, 韩伟华, 杨冲, 赵晓松, 郭仰岩, 张晓迪, 杨富华 2020 物理学报 **69** 137701]
- [8] Lee H, Yoon Y, Shin C 2017 *IEEE Electron Device Lett.* **38** 669
- [9] Peng Y, Han G, Chen Z, Li Q, Zhang J, Hao Y 2018 *IEEE J. Electron Device Soc.* **6** 233
- [10] Jiang C, Liang R, Wang J, Xu J 2015 *J. Phys. D:Appl. Phys.* **48** 365103
- [11] Gaidhane A D, Pahwa G, Verma A, Chauhan Y S 2018 *4th IEEE International Conference on Emerging Electronics (ICEE)* Bengaluru, India, December 17–19, 2018 p1
- [12] Choi K J, Biegalski M, Li Y L, Sharan A, Schubert J, Uecker R, Reiche P, Chen Y B, Pan X Q, Gopalan V, Chen L Q, Schlom D G, Eom C B 2004 *Science* **306** 1005
- [13] Zhang S R, Zhu M X, Suriyaprakash J, Liu J M, Du T, Wang Y J, Long C B, Liao M 2022 *J. Phys. Chem. C* **126** 4630
- [14] Haeni J, Irvin P, Chang W, Uecker R, Reiche P, Li Y, Choudhury S, Tian W, Hawley M, Craigo B 2004 *Nature* **430** 758
- [15] Schlom D G, Chen L Q, Eom C B, Rabe K M, Streiffer S K, Triscone J M 2007 *Annu. Rev. Mater. Res.* **37** 589
- [16] Sun F, Chen D, Gao X, Liu J M 2021 *J. Materiomics* **7** 281
- [17] Pertsev N A, Kukhar V G, Kohlstedt H, Waser R 2003 *Phys. Rev. B* **67** 054107
- [18] Lin C, Bai G, Li W, Gao C F 2021 *Acta Phys. Sin.* **70** 187701 (in Chinese) [林翠, 白刚, 李卫, 高存法 2021 物理学报 **70** 187701]
- [19] Kim M, Seo J, Shin M 2018 *International Conference on Simulation of Semiconductor Processes and Devices (SISPAD)* Austin, TX, USA, September 24–26, 2018 p318
- [20] Liu F C, You L, Seyler K L, Li X B, Yu P, Lin J H, Wang X W, Zhou J D, Wang H, He H Y, Pantelides S T, Zhou W, Sharam P, Xu X D, Ajayan P M, Wang J L, Liu Z 2016 *Nat. Commun.* **7** 12357
- [21] Morozovska A N, Eliseev E A, Kalinin S V, Vysochanskii Y M, Maksymovych P 2021 *Phys. Rev. B* **104** 054102
- [22] Wu M, Jena P 2018 *Wiley Interdiscip. Rev. Comput. Mol. Sci.* **8** e1365
- [23] Synopsys 2010 *Sentaurus Device User Guide* (Mountain View, CA)
- [24] Landau L, Khalatnikov I 1954 *Dokl. Akad. Nauk* **96** 469
- [25] Rabe K M, Dawber M, Lichtensteiger C, Ahn C H, Triscone J M (Rabe K M, et al. Ed.) 2007 *Physics of Ferroelectrics: A Modern Perspective* (Berlin: Springer) pp1–30
- [26] Pao H C, Sah C T 1966 *Solid State Electron.* **9** 927
- [27] Hoffmann M, Fengler F P G, Herzig M, Mittmann T, Max B, Schroeder U, Negrea R, Pintilie L, Slesazek S, Mikolajick T 2019 *Nature* **565** 464
- [28] Neumayer S M, Eliseev E A, Susner M A, Tselev A, Rodriguez B J, Brehm J A, Pantelides S T, Panchapakesan G, Jesse S, Kalinin S V, McGuire M A, Morozovska A N, Maksymovych P, Balke N 2019 *Phys. Rev. Mater.* **3** 024401

# Effect of biaxial misfit strain on properties of ferroelectric double gate negative capacitance transistors<sup>\*</sup>

Ji Ting-Wei    Bai Gang<sup>†</sup>

(College of Integrated Circuit Science and Engineering, Nanjing University of Posts and Telecommunications, Nanjing 210023, China)

( Received 16 November 2022; revised manuscript received 20 December 2022 )

## Abstract

In order to continue Moore's law, the reduction of power consumption has received much attention. It is necessary to develop steep devices that can overcome the "Boltzmann tyranny" and solve the problem of high power consumption of integrated circuits. Negative capacitance field-effect transistors are one of the most promising candidates in numerous steep devices. Strain engineering has been widely studied as an effective means of regulating the properties of ferroelectric thin films. However, the influence of strain on the performance of negative capacitance field-effect transistor has not been clear so far. Therefore, in this work, an analytical model of double gate negative capacitance field-effect transistor (DG-NCFET) regulated by biaxial misfit strain is proposed. Using this model, we investigate the influences of ferroelectric layer thickness and biaxial misfit strain on electrical properties of  $\text{PbZr}_{0.5}\text{Ti}_{0.5}\text{O}_3$  (PZT)-based and  $\text{CuInP}_2\text{S}_6$  (CIPS)-based negative capacitance field-effect transistors (NCFETs), respectively. The results show that for the negative capacitance field-effect transistor based on  $\text{PbZr}_{0.5}\text{Ti}_{0.5}\text{O}_3$ , when the ferroelectric layer thickness is increased or the compression strain is applied, the subthreshold swing and conduction current are improved, but the tensile strain has the opposite effect. For the negative capacitance field-effect transistor based on  $\text{CuInP}_2\text{S}_6$ , its performance is improved when the thickness of the ferroelectric layer is increased or the tensile strain is applied, but the device lags behind under the compressive strain. It is found that the CIPS-based NCFET exhibits better performance than PZT-based NCFET at low gate voltages.

**Keywords:** negative capacitance field effect transistors,  $\text{CuInP}_2\text{S}_6$ ,  $\text{PbZr}_{0.5}\text{Ti}_{0.5}\text{O}_3$ , misfit strain

**PACS:** 77.55.fg, 77.55.fp, 77.65.Ly, 77.80.bn

**DOI:** 10.7498/aps.72.20222190

<sup>\*</sup> Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 51602159) and the Natural Science Foundation of Nanjing University of Posts and Telecommunications, China (Grant No. NY222128).

<sup>†</sup> Corresponding author. E-mail: baigang@njupt.edu.cn

## 双轴错配应变对铁电双栅负电容晶体管性能的影响

纪婷伟 白刚

## Effect of biaxial misfit strain on properties of ferroelectric double gate negative capacitance transistors

Ji Ting-Wei Bai Gang

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 72, 067701 (2023) DOI: 10.7498/aps.72.20222190

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.72.20222190>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn>

### 您可能感兴趣的其他文章

#### Articles you may be interested in

外延 $\text{PbZr}_{0.2}\text{Ti}_{0.8}\text{O}_3$ 薄膜负电容的应变调控

Strain tuning of negative capacitance in epitaxial  $\text{PbZr}_{0.2}\text{Ti}_{0.8}\text{O}_3$  thin films

物理学报. 2021, 70(18): 187701 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20210810>

铁电负电容场效应晶体管研究进展

Recent research progress of ferroelectric negative capacitance field effect transistors

物理学报. 2020, 69(13): 137701 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20200354>

相场模拟应变调控 $\text{PbZr}_{(1-x)}\text{Ti}_x\text{O}_3$ 薄膜微观畴结构和宏观铁电性能

Phase field simulation of misfit strain manipulating domain structure and ferroelectric properties in  $\text{PbZr}_{(1-x)}\text{Ti}_x\text{O}_3$  thin films

物理学报. 2020, 69(12): 127801 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20200310>

纳米线环栅隧穿场效应晶体管的电容模型

Capacitance model for nanowire gate-all-around tunneling field-effect-transistors

物理学报. 2021, 70(21): 218501 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20211128>

(111)取向无铅 $\text{K}_{0.5}\text{Na}_{0.5}\text{NbO}_3$ 外延薄膜的相变和电卡效应: 外应力与错配应变效应

Phase transitions and electrocaloric effects of (111)-oriented  $\text{K}_{0.5}\text{Na}_{0.5}\text{NbO}_3$  epitaxial films: effect of external stress and misfit strains

物理学报. 2022, 71(9): 097701 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20220234>

一个圆柱形双栅场效应晶体管的物理模型

A physical model of cylindrical surrounding double-gate metal-oxide-semiconductor field-effect transistor

物理学报. 2021, 70(15): 157302 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20202156>