

Євген Єлісеєв<sup>1</sup>, Ганна Морозовська<sup>2</sup>, Леся Юрченко<sup>1</sup>, Максим Стріха<sup>3,4</sup>

## Чи можна використовувати ефект негативної ємності у польових транзисторах із сегнетоелектричним затвором?

<sup>1</sup>Інститут проблем матеріалознавства ім. І.М. Францевича НАН України, Київ, Україна.

<sup>2</sup>Інститут фізики НАН України, Київ, Україна,

<sup>3</sup>Київський національний університет ім. Тараса Шевченка, Факультет радіофізики, електроніки та комп'ютерних систем, Київ, Україна, [maksym.strikha@gmail.com](mailto:maksym.strikha@gmail.com).

<sup>4</sup>Інститут фізики напівпровідників ім. В. Лашкарьова НАН України, Київ, Україна

Проаналізовано розподіл електричного потенціалу та поля, поляризації та заряду, а також диференціальну ємність кремнієвого метал-оксидно-сегнетоелектричного польового транзистора (MOSFET), в якому підзатворний ізолятор складається з тонких шарів діелектрика SiO<sub>2</sub> та «слабкого» сегнетоелектрика HfO<sub>2</sub>. Виявилось можливим досягти квазістаціонарної негативної ємності шару HfO<sub>2</sub>,  $C_{HfO_2} < 0$ , за умови, якщо товщина цього шару близька до критичної товщини фазового переходу сегнетоелектрик-параелектрик, індукованого розміром. Однак також з'ясувалося, що цей ефект зникає, коли напруга на затворі підвищується вище певного критичного значення, що можна пояснити нелінійністю сегнетоелектричної проникності. Квазістаціонарна негативна ємність, яка є дуже повільним перехідним станом сегнетоелектрика, відповідає позитивній ємності всієї системи, і тому її поява не порушує жодного термодинамічного принципу. Реалізація квазістаціонарної негативної ємності  $C_{ins}$  ізолятора (діелектрика SiO<sub>2</sub> та «слабкого» сегнетоелектрика HfO<sub>2</sub>) може відкрити принципову можливість зменшити підпорогове коливання MOSFET нижче критичного значення та зменшити напругу затвора нижче фундаментальної межі Больцмана. Однак нам не вдалося знайти параметри, для яких ємність  $C_{ins}$  є негативною у квазістаціонарних станах; і, таким чином, негативна ємність  $C_{HfO_2}$  не може зменшити підпорогове коливання нижче фундаментальної межі. Тим не менш, збільшення  $C_{ins}$ , пов'язане з  $C_{HfO_2} < 0$ , може зменшити коливання вище межі, зменшити нагрівання пристрою під час робочих циклів і, таким чином, сприяти подальшому покращенню продуктивності MOSFET.

**Ключові слова:** від'ємна ємність, сегнетоелектрична плівка, розмірний фазовий перехід, польовий транзистор метал-оксид-сегнетоелектрик.

Подано до редакції 02.09.2022; прийнято до друку 09.12.2022.

### Вступ

В останні роки були інтенсивні спроби створити пристрої, які б використовували ефект негативної ємності [1, 2, 3], передбачений Рольфом Ландауером ще в 1976 році [4]. У разі успіху такі спроби призвели б до справжнього прориву в масштабуванні сучасних електронних пристроїв [5, 6]. Зокрема, для цього запропоновано використання тонких сегнетоелектричних плівок, оскільки вони можуть зберігати сегнетоелектричні властивості при товщині

5 нм і навіть менше; сумісні зі CMOS і термостабільні в поєднанні з кремнієм; можуть бути нанесені на 3D підкладки; мають ширшу заборонену зону, ніж кремній, і утворюють значний контактний бар'єр для електронів із зони провідності кремнію. Принципова можливість зниження (у разі успіху) підпорогового коливання та напруги живлення до значень нижче фундаментальних меж зумовлює великий інтерес до створення цих систем із використанням сегнетоелектриків [7].

Тонкі плівки CMOS-сумісного «слабкого»

сегнетоелектрика  $\text{HfO}_2$ , спонтанна поляризація якого в залежності від умов знаходиться в діапазоні  $2 - 40$  мкКл/см<sup>2</sup>, ширина забороненої зони дорівнює  $5,8$  еВ, електронна спорідненість до вакууму  $\sim 2$  еВ і відносна діелектрична проникність становить близько  $25$ , є дуже перспективними кандидатами для метало-оксидних сегнетоелектричних польових транзисторів (MOSFET) [8, 9, 10, 11]. Нижче ми розглядаємо кремнієвий MOSFET, в якому підзатворний ізолятор складається з тонких шарів діелектрика  $\text{SiO}_2$  і слабого сегнетоелектрика  $\text{HfO}_2$ . Вивчається можливість реалізації в такій системі стійкої від'ємної ємності ізолятора, що відкриває принципову можливість знизити підпорогові коливання до значень нижче порогових  $60$  мВ/декаду при кімнатній температурі та напругу живлення до значень нижче фундаментальної межі Больцмана,  $0,5$  В, що було б важливим кроком до подальшої мініатюризації MOSFET-ів.

## I. Формулювання проблеми

Схема транзистора, в якому підзатворний ізолятор утворений тонкими шарами пасивного діелектрика  $\text{SiO}_2$ , слабого сегнетоелектрика  $\text{HfO}_2$  і кремнієвого напівпровідникового каналу  $p$ -типу, наведена на рис.

$$\varepsilon_0 \varepsilon_e \left( \frac{\partial^2}{\partial z^2} + \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right) \phi^{(e)} = 0, \quad -h - d \leq z \leq -h, \quad (1a)$$

$$\varepsilon_0 \varepsilon_b \left( \frac{\partial^2}{\partial z^2} + \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right) \phi^{(i)} = \frac{\partial P_3}{\partial z}, \quad -h \leq z \leq 0, \quad (16)$$

$$\varepsilon_0 \varepsilon_s \left( \frac{\partial^2}{\partial z^2} + \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right) \phi^{(s)} = -e(Z_d N_d^+ - n - Z_a N_a^- + p), \quad 0 \leq z \leq t. \quad (1b)$$

Діелектричні проникності мають величини:  $\varepsilon_e = 3,9$ ,  $\varepsilon_b = 7$ ,  $\varepsilon_s = 11,8$ . Концентрації нерухомих іонізованих донорів і акцепторів всередині каналу дорівнюють  $N_d^+$  та  $N_a^-$ , відповідно; густини зарядів рухомих вільних електронів і дірок дорівнюють  $n$  і  $p$  відповідно. Коли електричний струм відсутній, густини зарядів залежать від електричного потенціалу  $\phi^{(s)}$  у звичайний спосіб [14] (див. Додаток А в [15] для подробиць). Для моделювання напівпровідникових властивостей каналу використовуємо такі параметри: концентрація акцепторів  $N_{a0} = 10^{24}$  м<sup>-3</sup>, ступінь їх іонізації  $Z_a = 1$  та енергетичний рівень  $E_a = -1,05$  еВ; концентрація донорів  $N_{d0} \ll 10^{20}$  м<sup>-3</sup>, ширина забороненої зони  $E_g = 1,1$  еВ. Дно зони провідності вибирається як нульова енергія. Граничні умови для рівнянь (1) перераховані нижче.

(а) Потенціал  $\phi^{(e)}$  у верхній частині полі-Si затвора дорівнює прикладеному потенціалу,  $V_G$ ,  $\phi^{(e)}(-H) = V_G$ , де  $H \gg h$ . Потенціал  $\phi^{(e)}$  на межі  $n^+$  полі-Si затвор –  $\text{SiO}_2$ ,  $z = -h - d$ , дорівнює різниці потенціалів:

$$\phi^{(e)}|_{z=-h-d} = V_G - V_{FB} \equiv V_g, \quad (2a)$$

1(a). На рисунку 1(b) показано гетероструктуру для випадку плоских зон [12, 13], коли до затвору прикладна напруга плоских зон (ПС). Напруга плоских зон визначається різницею між роботою виходу затвора та напівпровідникового каналу, а також поверхневим зарядом на межі поділу  $\text{HfO}_2$ -Si. Ми вважаємо, що поверхневий заряд зумовлений зв'язаним зарядом, створеним поляризацією  $P_3$  у сегнетоелектричному шарі, який залежить від напруги на затворі, і нехтуємо зарядом на електронних пастках на межі поділу. Тонкі шари діелектрика  $\text{SiO}_2$ , сегнетоелектрика  $\text{HfO}_2$  і напівпровідникового кремнію  $p$ -типу мають товщину  $d$ ,  $h$  і  $t$  відповідно. Їхні відносні діелектричні проникності позначимо  $\varepsilon_e$ ,  $\varepsilon_b$  («фон») і  $\varepsilon_s$ , відповідно. Відповідні електричні потенціали позначаються як  $\phi^{(e)}$ ,  $\phi^{(i)}$  і  $\phi^{(s)}$ .

Сегнетоелектрична плівка вважається або параелектричною, або однодомною, що є дуже ймовірним припущенням для тонких плівок  $\text{HfO}_2$ . Для обох випадків вона характеризується неоднорідною однокомпонентною спонтанною поляризацією  $P_3(x,z)$ , перпендикулярною до поверхні плівки.

Просторовий розподіл і еволюція спонтанної поляризації описані за допомогою підходу Ландау-Гінзбурга-Девоншира (LGD) і електростатичних рівнянь. Система електростатичного регулювання розподілу потенціалу має вигляд:

де  $V_{FB}$  дорівнює потенціалу плоскої зони, і ми вважаємо, що  $V_{FB} \approx 1$  еВ для оцінок. Нижче, для простоти, ми вводимо  $V_g$  як «редуковану» напругу на затворі, маючи на увазі, що вона відрізняється від потенціалу  $V_G$ , прикладеного до верхньої поверхні  $n^+$  полі-Si затвора. Введення  $V_g$  в рівняння (2a) дозволяє нам моделювати тришарову структуру, що складається з шарів  $\text{SiO}_2$ ,  $\text{HfO}_2$  і каналу  $p$ -Si, замість реалістичної чотиришарової структури, показаної на рис. 1(b).

(б) Електричний потенціал є неперервним на межі поділу  $\text{HfO}_2 - p\text{-Si}$  та  $\text{SiO}_2 - \text{HfO}_2$ ,  $z = -h$  та  $z = 0$  відповідно (див., наприклад, [16]):

$$(\phi^{(e)} - \phi^{(i)})|_{z=-h} = 0 \quad \text{та} \quad (\phi^{(i)} - \phi^{(s)})|_{z=0} = 0 \quad (2b)$$

Нижня поверхня каналу заземлена,  $\phi^{(s)}|_{z=t} = 0$ . Електричний струм в каналі довжиною  $L$  регулюється

Чи можна використовувати ефект негативної ємності у польових транзисторах із сегнетоелектричним...

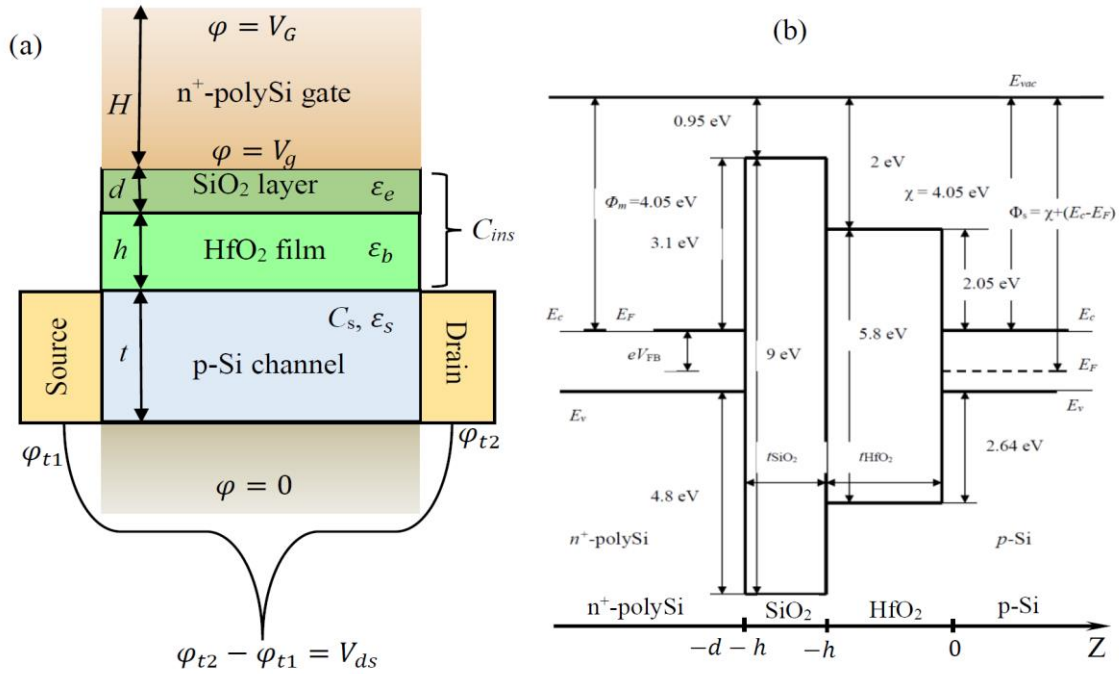


Рис. 1. Геометрія та зонна діаграма польового транзистора, що складається з  $n^+$  полі-Si затвора, діелектричного шару  $\text{SiO}_2$ , сегнетоелектричної плівки  $\text{HfO}_2$  та каналу Si  $p$ -типу.

різницею потенціалів на інтерфейсах витоку і стоку,  $\phi^{(s)}(x=0) - \phi^{(s)}(x=L) = V_{ds}$ .

(в) Електричне зміщення також безперервне на межах ізолятора,  $z = -h$  і  $z = 0$ :

$$\left( -\varepsilon_0 \varepsilon_b \frac{\partial \phi^{(i)}}{\partial z} + P_3 + \varepsilon_0 \varepsilon_e \frac{\partial \phi^{(e)}}{\partial z} \right) \Big|_{z=-h} = 0,$$

$$\left( -\varepsilon_0 \varepsilon_b \frac{\partial \phi^{(i)}}{\partial z} + P_3 + \varepsilon_0 \varepsilon_s \frac{\partial \phi^{(s)}}{\partial z} \right) \Big|_{z=0} = 0. \quad (2в)$$

(г) Слід зазначити, що на краях зони провідності та валентної зони повинні бути стрибки, пов'язані з

відмінностями відповідних рівнів Фермі та спорідненості до електронів на межі поділу  $\text{HfO}_2$ - $p$ -Si та  $\text{SiO}_2$ - $\text{HfO}_2$  відповідно:

$$\chi_i - \chi_s \approx 1.05 \text{ eV}, \quad \chi_i - \chi_s \approx -2.05 \text{ eV}. \quad (2г)$$

Ці умови впливають на розриви концентрації носіїв на межах поділу. За відсутності струмів ці умови випливають з умов неперервності локального електрохімічного потенціалу (квазі-рівнів Фермі).

Рівняння LGD, що визначає розподіл поляризації, має вигляд:

$$\Gamma \frac{\partial P_3}{\partial \tau} + \alpha P_3 + \beta P_3^3 + \gamma P_3^5 - g \frac{\partial^2 P_3}{\partial z^2} - g^* \frac{\partial^2 P_3}{\partial x^2} = -\frac{\partial \phi^{(i)}}{\partial z}, \quad -h \leq z \leq 0, \quad (3а)$$

Тут  $\Gamma$  – кінетичний коефіцієнт Халатнікова [17], і відповідний час релаксації Ландау-Халатнікова  $\tau_K$  переполяризації можна ввести як  $\tau_K = \Gamma/|\alpha|$ . Коефіцієнт  $\alpha = \alpha_T(T - T_C)$ . Час перемикання  $\tau_K$  можна оцінити як  $10^{-9}$ – $10^{-10}$  секунд при температурах, далеких від температури Кюрі  $T_C$ . Однак ця оцінка працює для однодомного бездефектного сегнетоелектрика  $\text{HfO}_2$ . Завдяки різним механізмам закріплення очікується, що кінетика перемикання, обмежена дефектами, призведе до значно вищого, наприклад, мікросекундного часу перемикання. Таким чином, нижче ми аналізуємо квазістатичний поляризаційний відгук, коли період прикладеної напруги значно перевищує  $\tau_K$ .

Коефіцієнти LGD розкладу для  $\text{HfO}_2$ :Si були визначені з експериментальних даних, як описано в Додатку В у пос. [15]. Вони становлять:

$\alpha_T = 1.72 \times 10^6 \text{ м}/(\Phi \text{ К})$ ,  $T_C = 334 \text{ К}$ ,  
 $\beta = 1.013 \times 10^{10} \text{ Кл}^4 \cdot \text{м}^5 \text{ Дж}$ ,  $\gamma = 0$ ,  
 $g = 5 \times 10^{-10} \text{ м}^3/\Phi$ . Ми змінюємо товщини в діапазоні  $d = (5 - 10) \text{ нм}$ ,  $h = (10 - 100) \text{ нм}$  і  $t = 30 \text{ нм}$  і враховуємо, що  $T = 300 \text{ К}$ .

Ми використовуємо так звані природні умови для сегнетоелектричної поляризації,

$$\left( \frac{\partial P_3}{\partial z} \right) \Big|_{z=-h,0} = 0, \quad (3б)$$

які підтримують однодомний стан у плівці  $\text{HfO}_2$  і нехтують присутністю вільних носіїв всередині діелектричного та сегнетоелектричного шарів, вважаючи верхній електрод затвора ідеальним металом.

Формально диференціальна ємність розглянутої

гетероструктури задається виразом

$$C = \frac{dQ}{dV_g}, \quad (4a)$$

де  $Q$  – заряд верхнього електрода. Цей заряд, узятий з протилежним знаком, дорівнює сумі заряду нижнього електрода  $Q_b$  і сумарного просторового заряду каналу  $Q_s$ ,  $Q = -Q_b - Q_s$ . Припустимо, що вираз для оберненої ємності є лінійно-залежним від обернених ємностей її частин:

$$\frac{1}{C} = \frac{1}{C_{ins}} + \frac{1}{C_s} \quad (4б)$$

де  $C_{ins}$  – диференціальна ємність ізолятора, що складається з сегнетоелектричного та діелектричного шарів,  $C_s$  – диференціальна ємність каналу. Хоча подібний вираз для оберненої ємності,

$$\frac{1}{C_{ins}} = \frac{1}{C} - \frac{1}{C_s}, \quad C_{ins} = \frac{C}{1 - \frac{C}{C_s}} \quad (4в)$$

$$\frac{1}{C_{HfO_2}} \approx \frac{1}{C_{ins}} - \frac{1}{C_{SiO_2}} = \frac{1}{C} - \frac{1}{C_s} - \frac{1}{C_{SiO_2}}, \quad C_{HfO_2} \approx \frac{C}{1 - \frac{C}{C_s} - \frac{C}{C_{SiO_2}}} \quad (4г)$$

Ефект негативної сегнетоелектричної ємності означає, що  $C_{HfO_2} < 0$ , тоді як загальна ємність  $C$  повинна бути додатною в термодинамічній рівновазі, оскільки стабільна негативна ємність частини системи може бути досягнута лише послідовно з позитивною електростатичною енергією та ємністю всієї системи [19]. З тих самих причин  $C_{ins}$  має бути додатною у стаціонарному режимі роботи двошарової конденсаторної структури (див., наприклад, [20] і посилання там), тоді як будь-які термодинамічні обмеження на знак  $C_{ins}$  у розглянутій тришаровій структурі відсутні, тому не виключена ситуація  $C_{ins} < 0$ .

## II. Результати теоретичного моделювання для нульової напруги між витоком та стоком

Типові результати самоузгодженого моделювання методом скінчених елементів (FEM) електричного потенціалу, сегнетоелектричної поляризації та густини просторового заряду в розглянутій системі за відсутності напруги витік-стік,  $V_{sd} = 0$ , наведено на рис. 2–3. Розрахунки проводилися для ультратонкого шару  $SiO_2$  з товщиною  $d = (1-2)$  нм, кімнатної температури,  $T = 300$  К, змінної товщини плівки  $h = (5-50)$  нм і ширини каналу  $t = (1-30)$  нм [21].

«Інверсія» електричного потенціалу на межі поділу діелектрик/сегнетоелектрик видна на рис. 2(а), де знак падіння напруги в сегнетоелектричній плівці протилежний знакам падіння потенціалу в шарі діелектрика та в напівпровідниковому каналі. Тобто,

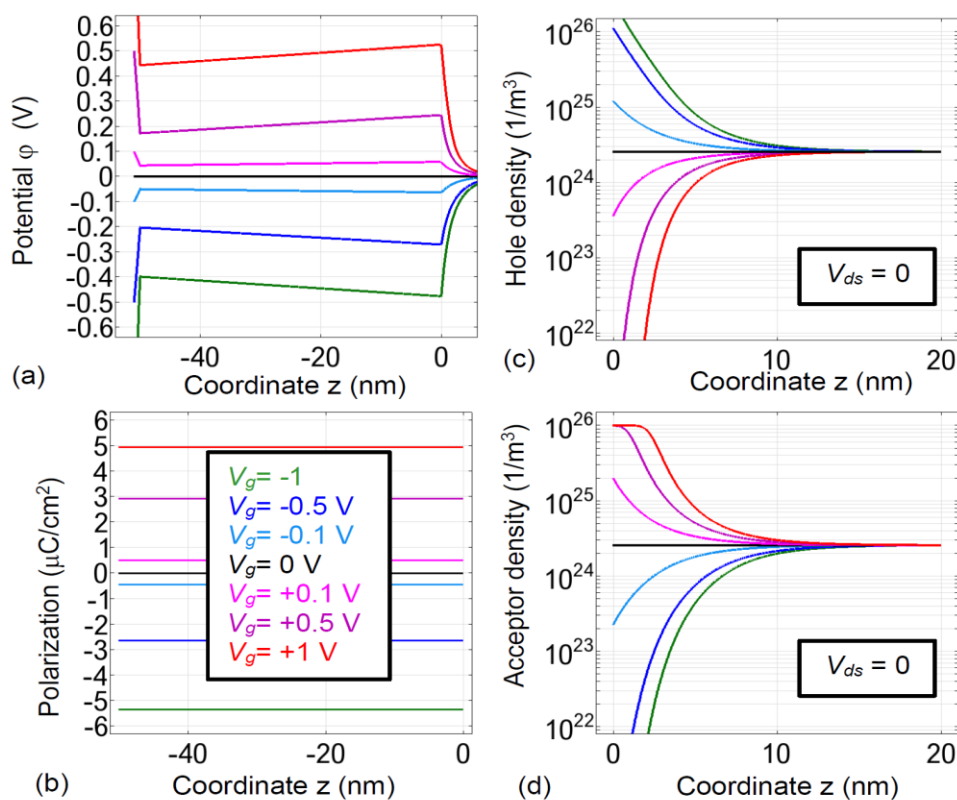
$1/C_{ins} = 1/C_{SiO_2} + 1/C_{HfO_2}$ , не є строгим виразом, якщо у сегнетоелектрику є домени, відповідальні за нелокальну діелектричну проникність сегнетоелектричного шару, яка характеризує всю систему, а не його окремі частини [18]. Ми можемо використати цей вираз для верхньої оцінки диференціальної ємності сегнетоелектричного шару,  $C_{HfO_2}$ , і покласти  $C_{SiO_2} = \frac{\epsilon_0 \epsilon_e}{d}$  для діелектричного шару. Ємність каналу становить  $C_s \cong \frac{dQ_s}{d\phi_s}$ , де  $\phi_s$  – падіння потенціалу, а  $Q_s$  – загальний об’ємний заряд каналу. Приблизно ємність каналу можна оцінити як  $C_s \approx \frac{\epsilon_0 \epsilon_s}{w}$ , де  $w$  – залежна від напруги товщина екрануючого шару просторового заряду.

З наведених вище оцінок диференціальні ємності  $C_{ins}$  і  $C_{HfO_2}$  є

падіння потенціалу всередині шарів діелектрика та сегнетоелектрика мають різні знаки, а локальний потенціал у деяких випадках інвертований. Зауважимо, що ефект інверсії відсутній на межі поділу сегнетоелектрик–канал.

Саме ефект інверсії в сегнетоелектричному шарі трактується багатьма авторами як прояв ефекту негативної ємності [22, 23, 24]. При цьому локальне електричне поле, як  $z$ -похідна потенціалу, спрямоване проти середнього поля в  $HfO_2$ , а напрямок поля в діелектрику та напівпровіднику збігається з напрямком середнього поля. Коли сегнетоелектрична плівка досить тонка ( $h \leq 50$  нм), а шар діелектрика достатньо товстий ( $d \geq 1$  нм), параелектрична фаза є або стабільною, або метастабільною, і тому спонтанна поляризація практично відсутня в статичному випадку [див. чорну криву,  $P_3 = 0$ , при  $V_g = 0$  на рис. 2(б)]. Індукована полем поляризація, показана кольоровими кривими на рис. 2(б), пропорційна локальному електричному полю в плівці  $HfO_2$ . За сприятливих умов поляризація, викликана полем, сприяє ефекту негативної ємності через негативну локальну сприйнятливість. Вільні носії в каналі екранують поляризаційний зв’язаний заряд і електричне поле; відповідний розподіл густини дірок показано на рис. 2(с). Для параметрів зонної структури, показаних на рис. 1(б), розрахована густина електронів виявилася мізерно малою порівняно з густиною дірок у каналі. З тих самих причин можна знехтувати концентрацією іонізованих донорів порівняно з концентрацією іонізованих акцепторів, показаною на рис. 2(д).

Ефект негативної ємності спостерігається в сегнетоелектричному шарі при помірних напругах затвора,  $|V_g| \leq 1$  В, як показано на рис. 2(а). Від’ємна



**Рис. 2.** Ефект інверсії електричного потенціалу на межі поділу діелектрик/сегнетоелектрик. Розподіл електричного потенціалу в гетероструктурі SiO<sub>2</sub>-HfO<sub>2</sub>-p-Si (а), електричної поляризації в шарі HfO<sub>2</sub> (б), густини дірок (в) і концентрації іонізованих акцепторів (г) в каналі p-Si, розраховані для  $V_{ds} = 0$  і різної редукованої напруги затвора:  $V_g = -1$  В (темно-зелені криві),  $-0,5$  В (темно-сині криві),  $-0,1$  В (сині криві),  $0$  (чорні криві),  $+0,1$  В (пурпурові криві) і  $+1$  В (червоні криві). Товщина HfO<sub>2</sub>  $h = 50$  нм і товщина p-Si  $t = 30$  нм.

ємність зникає при збільшенні напруги на затворі вище 1,5 В. Зникнення можна пояснити впливом сегнетоелектричної та/або напівпровідникової нелінійності, оскільки сприйнятливості сегнетоелектричного шару зменшується зі збільшенням електричного поля; а глибина проникнення електричного поля в канал (тобто ефективна товщина  $w$  виснаженого шару) нелінійним чином залежить від різниці потенціалів.

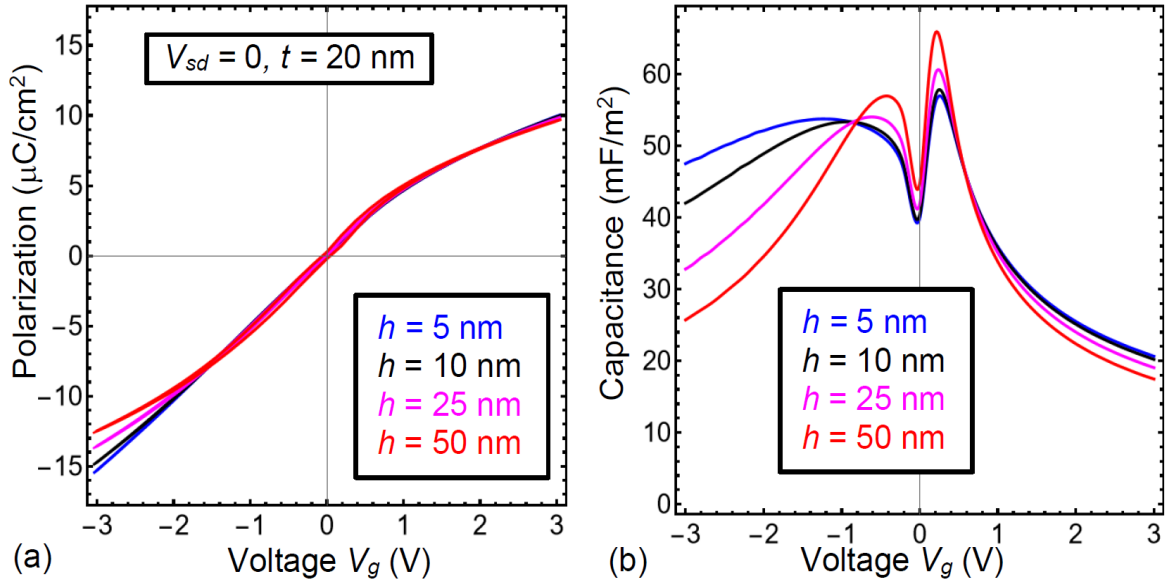
Квазістатичні залежності поляризації плівки HfO<sub>2</sub>,  $P_3$ , від напруги на затворі  $V_g$  наведено на рис. 3(а). Залежності розраховані для різних товщин плівки  $h$ . Поляризаційні криві демонструють параелектричну залежність від  $V_g$  для плівок HfO<sub>2</sub> з  $h \leq 25$  нм незалежно від ширини каналу. Висота і нахил дуже тонких сегнетоелектричних петель гістерезису, які з'являються для товщих плівок з  $h > 25$  нм (наприклад, для  $h = 50$  нм), залежать від товщини каналу  $t$  складним чином. Звернімо увагу, що товщина для  $h = 50$  нм дуже близька до критичної товщини фазового переходу сегнетоелектрик-параелектрик, спричиненого розміром. Петлі асиметричні по відношенню до напруги на затворі, і ця асиметрія пов'язана з асиметрією електричних граничних умов, оскільки верхня поверхня плівки HfO<sub>2</sub> контактує з шаром діелектрика SiO<sub>2</sub>, а нижня поверхня контактує з напівпровідником p-Si.

Квазістатичні залежності повної диференціальної ємності,  $C$ , від приведеної напруги на затворі  $V_g$

наведено на рис. 3(б). Залежності розраховані для різних товщин плівки  $h$ . Криві ємності рідко демонструють параелектричну залежність від  $V_g$  для розглянутого діапазону ширини каналу (один асиметричний максимум, розташований поблизу  $V_g = 0$ ). Частіше ці залежності є кривими сегнетоелектричного типу з двома несиметричними максимумами. Асиметрія пов'язана з асиметрією поляризаційних кривих, зображених на рис. 3(а). Висота та поділ цих максимумів стають більш вираженими для товщих плівок з  $h > 25$  нм і залежать від товщини каналу  $t$  складним чином. Загальна ємність додатна і залежить від  $V_g$  через параелектричну та/або сегнетоелектричну нелінійність у шарі HfO<sub>2</sub>. Ємність є максимальною в околі  $V_g = 0$ , тому що діелектрична сприйнятливості шару HfO<sub>2</sub> максимальна в діапазоні малих напруг і значно зменшується зі збільшенням напруги.

### III. Вплив ємності сегнетоелектрика на характеристики MOSFET

Струм витік-стік  $I_{ds}$ , як функція напруг затвора і витоку-стоку,  $V_g$  і  $V_{ds}$ , можна описати наближеним феноменологічним аналітичним виразом:



**Рис. 3.** Квазістатичні залежності поляризації плівки  $\text{HfO}_2$  (а) та повної диференціальної ємності (б) від приведеної напруги на затворі  $V_g$ , розраховані для різної товщини плівки  $\text{HfO}_2$   $h = 5, 10, 25$  та  $50$  нм (синя, чорна, пурпурова та червона криві відповідно). Ширина каналу  $t = 20$  нм.

$$I_{ds} \approx \frac{V_{ds}}{R(1 + \frac{V_{ds}}{V_s})} F\left(\frac{e(V_g - V_{th})}{k_B T}\right), \quad (5)$$

де ефективний опір  $R$  і напруга насичення  $V_s$  є підгоночними параметрами, а функція  $F$  задана виразом:

$$F(\xi) = \frac{(1 + \xi^2)}{(1 + \xi^2)\exp(-\xi) + 1} \approx \begin{cases} \exp(\xi), & \xi \ll -1, \\ \xi^2, & \xi \gg 1. \end{cases} \quad (6a)$$

Порогову напругу можна оцінити як:

$$V_{th} \cong V_{FB} - \phi_{inv}^{(s)} - \frac{P_s(\phi_{inv}^{(s)})}{C_{ins}}. \quad (6b)$$

де  $C_{ins}$  – загальна ємність сегнетоелектричних і діелектричних шарів, введена в рівнянні (4б);  $\phi_{inv}^{(s)}$  – потенціал на поверхні напівпровідника,  $z = 0$ , що відповідає інверсії типу провідності в каналі (див., наприклад, [12]). Від’ємна ємність сегнетоелектричного шару,  $C_{\text{HfO}_2} < 0$ , може бути досягнута в розглянутій гетероструктурі, оскільки криві з інвертованим нахилом існують всередині сегнетоелектричного шару (див. рис. 2(a)). Залежно від знаку  $C_{\text{HfO}_2}$ , обернені ємності,  $\frac{1}{C_{\text{HfO}_2}}$  і  $\frac{1}{C_{\text{SiO}_2}}$ , або підсумовуються, або віднімаються, щоб утворити повну ємність.

Кілька випадків  $C_{\text{HfO}_2} < 0$  показані синіми кривими на рис. 4(a, c) і 4(b, d) для плівки  $\text{HfO}_2$  товщиною  $h = 5$  нм і  $h = 50$  нм, відповідно. Можливим фізичним походженням спостережуваної негативної ємності  $C_{\text{HfO}_2}$  є ситуація, коли квазістатичний заряд на верхньому та нижньому електродах гетероструктури зростає повільніше, ніж сегнетоелектрична поляризація. Незважаючи на те, що  $C_{\text{HfO}_2} < 0$ , ємність  $C_{ins}$ , розрахована для залежної від напруги

диференціальної ємності каналу,  $C_s \cong \frac{dQ_s}{d\phi_s}$ , є додатною (див. суцільні чорні, сині та пурпурові криві на рис. 4). Від’ємна ємність,  $C_{ins} < 0$ , була розрахована для незалежної від напруги ємності каналу  $C_s \approx \frac{\epsilon_0 \epsilon_s}{w}$ , коли шар просторового заряду має постійну ширину  $w \cong 12$  нм (див. пунктирні чорні, сині та пурпурові криві на рис. 4). Цей приклад показує, що наближення шару просторового заряду постійної ширини може призвести до критичної помилки в оцінці ємності каналу та ізолятора.

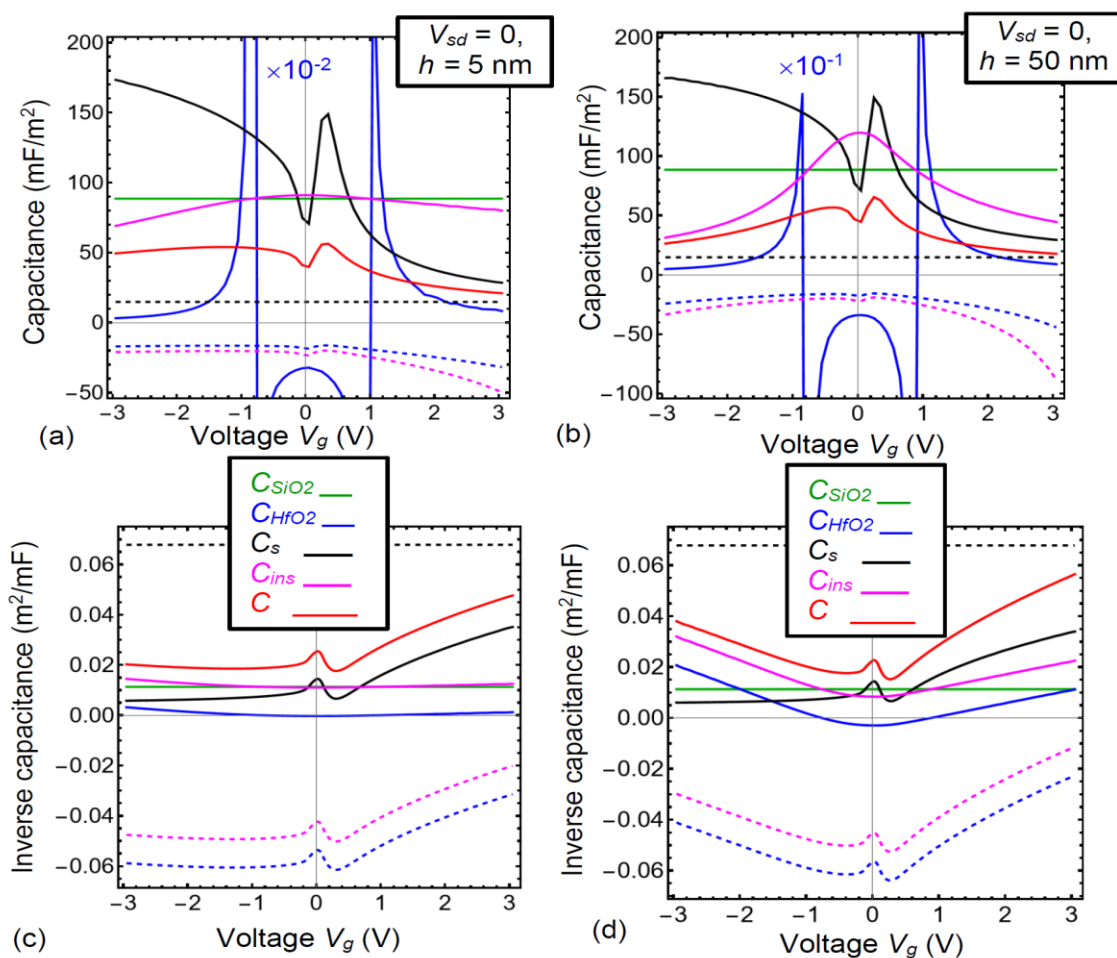
Далі ми оцінимо підпороговий розкид  $S$ , який характеризує збільшення напруги затвора, необхідне для досягнення десятиразового збільшення струму стоку, як [3]:

$$S = \left[ \frac{\partial(\log_{10} I_{ds})}{\partial V_g} \right]^{-1} = 2,3 \frac{k_B T}{e} \left( 1 + \frac{C_s}{C_{ins}} \right). \quad (7)$$

Для позитивних  $C_{ins}$  мінімальне значення  $S$ , досягнуте при  $C_s \ll C_{ins}$ , становить 60 мВ/декаду при кімнатній температурі. Можливий перехід до від’ємної ємності ізоляторної частини гетероструктури,  $C_{ins} < 0$ , зменшить значення  $S$  нижче цієї межі, що означає, що протікання струму в режимі «ON» відповідатиме меншій напрузі витік-стік  $V_{ds}$ . Це знизить б напругу живлення нижче фундаментального ліміту Больцмана в 0,5 В, що відкрило б можливість подальшої мініатюризації MOSFET, який зараз працює при напругах живлення не менше 0,7 В.

Ємність  $C_{ins}$  повинна бути позитивною в стаціонарному режимі, тоді як будь-які термодинамічні обмеження на ємність  $C_{ins}$  перехідних станів відсутні. Однак нам не вдалося знайти умов, за яких  $C_{ins} < 0$  або в стаціонарному, або в квазістаціонарному стані (див., наприклад, суцільні





**Рис. 4.** Квазістатична залежність напруги затвора прямої (а, б) та оберненої (с, д) диференціальних ємностей  $C$ ,  $C_{ins}$ ,  $C_s$ ,  $C_{HfO_2}$  і  $C_{SiO_2}$  (суцільні червоні, пурпурові, чорні, сині і зелені криві, відповідно) від редукованої напруги затвора  $V_g$ . Товщина плівки  $HfO_2$   $h = 5$  нм на графіку (а,с) і  $h = 50$  нм на графіках (б, д), ширина каналу  $t = 20$  нм. Штрихові чорні, сині та пурпурові криві розраховані для постійної ширини шару просторового заряду,  $w \cong 12$  нм.

пурпурові криві на рис. 4). Натомість ми отримали збільшення  $C_{ins}$  і зменшення  $C_s$  за одночасного виконання умов  $C_{HfO_2} < 0$  і  $C_{SiO_2} > 0$  поблизу  $V_g \approx 0$  [див. широкий максимум на фіолетових кривих і різкі мінімуми на чорних суцільних кривих при  $V_g \approx 0$  на рис. 4]. Оскільки  $C_{ins}$  є максимальним, а  $C_s$  мінімальним в околі  $V_g \approx 0$ , співвідношення  $C_s/C_{ins}$  є мінімальним в околі  $V_g \approx 0$ , і умова  $0 < C_s/C_{ins} \ll 1$ , яка зменшує  $S$ , може бути справедливою при малих  $V_g$ .

Оскільки позитивна ємність  $C_{ins}$ , а не негативна ємність сегнетоелектричного шару, визначає робочі характеристики польового транзистора, і, зокрема, підпороговий розкид  $S$ , стаціонарна від'ємна ємність сегнетоелектричного шару не може зменшити  $S$  нижче фундаментальної межі. Тим не менш, збільшення  $C_{ins}$  може зменшити  $S$  вище фундаментальної межі у випадку  $C_s/C_{ins} \ll 1$ ; також це може значно зменшити перехідні втрати та нагрівання MOSFET під час робочих циклів.

## Висновки

Ми проаналізували розподіл електричного потенціалу та поля, поляризацію та заряд, а також

диференціальну ємність кремнієвого MOSFET, в якому підзатворний ізолятор складається з тонких шарів діелектрика  $SiO_2$  та слабого сегнетоелектрика  $HfO_2$ .

Виявилось можливим досягти квазістаціонарної негативної ємності сегнетоелектричного шару, якщо його товщина близька до критичної товщини індукованого розміром фазового переходу сегнетоелектрик-параелектрик. Квазістаціонарна від'ємна ємність сегнетоелектрика, що є дуже повільно змінним перехідним станом, відповідає позитивній ємності всієї системи, і тому не порушує жодного термодинамічного принципу. Крім того, ми показали, що сегнетоелектрична ємність стає додатною, коли напруга на затворі зростає вище певного критичного значення, що можна пояснити нелінійністю діелектричної проникності сегнетоелектриків, а також зменшенням ємності напівпровідника зі збільшенням абсолютного значення напруги.

Оскільки ємність ізолятора,  $C_{ins}$ , а не негативна ємність лише сегнетоелектричного шару,  $C_{HfO_2}$ , визначає робочі характеристики польового транзистора, реалізація квазістаціонарної негативної ємності  $C_{ins}$  може відкрити принципову можливість

зменшити підпорогове колювання  $S$  нижче критичне значення та зменшити напругу на затворі нижче фундаментальної межі Больцмана. Однак наш загальний висновок полягає в тому, що  $C_{ins} > 0$  у квазістаціонарних станах, що означає, що негативна ємність не проникає «за межі» сегнетоелектричного шару MOSFET, і тому вона не може зменшити підпороговий розкид нижче фундаментальної межі 60 мВ/декада. Цей висновок узгоджується з [19], де його було отримано в рамках загальних принципів термодинаміки.

Натомість ми отримали збільшення  $C_{ins}$  при одночасному виконанні умов  $C_{HfO_2} < 0$  та  $C_{SiO_2} > 0$  при малих напругах на затворі. Збільшення  $C_{ins}$  може зменшити  $S$  вище фундаментальної межі; також це може значно зменшити перехідні втрати та нагрівання MOSFET під час робочих циклів.

### Подяки

Автори вдячні д-ру Павлу Зубку за дуже корисні пояснення та обговорення. Г.М.М. дякує Національній академії наук України (програма 1230) та проекту №778070 обміну дослідницьким та інноваційним персоналом (RISE) «Оксиди перехідних металів з метастабільними фазами: шлях до покращення фероїдних властивостей». М.В.С. висловлює подяку Київському національному університету імені Тараса

Шевченка за часткову підтримку цієї роботи.

### Внесок авторів

Г.М.М. та М.В.С. висловили ідею дослідження, а Г.М.М. сформулювала задачу математично. Є.А.Є. та Л.П.Ю. виконали чисельне моделювання. Г.М.М. та М.В.С. написали рукопис. Всі співавтори обговорили результати.

### Наявність даних

Обчислення проводили та візуалізували в програмному забезпеченні Mathematica 13.1 ©Wolfram Research. Ці коди доступні за обґрунтованим запитом.

**Єлісєєв Є.А.** – провідний науковий співробітник Інституту проблем матеріалознавства НАН України, доктор фіз.-мат. наук;  
**Морозовська Г.М.** – провідний науковий співробітник Інституту фізики НАН України, доктор фіз.-мат. наук;  
**Юрченко Л.П.** – старший науковий співробітник Інституту проблем матеріалознавства НАН України, кандидат фіз.-мат. наук;  
**Стріха М.В.** – професор факультету радіофізики, електроніки та комп'ютерних систем КНУ імені Тараса Шевченка, головний науковий співробітник Інституту фізики напівпровідників НАН України, професор, доктор фіз.-мат. наук.

- [1] J. Íñiguez, P. Zubko, I. Luk'yanchuk, and A. Cano, *Ferroelectric negative capacitance*, Nat. Rev. Mater., 4, 243 (2019); <https://doi.org/10.1038/s41578-019-0089-0>.
- [2] W. Cao and K. Banerjee, *Is negative capacitance FET a steep-slope logic switch?* Nat. Commun., 11, 196 (2020); <https://doi.org/10.1038/s41467-019-13797-9>.
- [3] M. Hoffmann, S. Slesazek, Thomas Mikolajick. *Progress and future prospects of negative capacitance electronics: A materials perspective*, APL Mater., 9, 020902 (2021); <https://doi.org/10.1063/5.0032954>.
- [4] R. Landauer. *Can capacitance be negative?* Collect. Phenom., 2, 167-170 (1976).
- [5] S. Salahuddin and S. Datta, *Use of negative capacitance to provide voltage amplification for low power nanoscale devices*, Nano letters, 8, 405 (2008); <https://doi.org/10.1021/nl071804g>.
- [6] S. Salahuddin, S.Datta. *The era of hyper-scaling in electronics*, Nat. Electron., 1, 442-450 (2018); <https://doi.org/10.1038/s41928-018-0117-x>.
- [7] M. Hoffmann, M. Pešić, S. Slesazek, U. Schroeder, and T. Mikolajick, *On the stabilization of ferroelectric negative capacitance in nanoscale devices*, Nanoscale, 10, 10891 (2018); <https://doi.org/10.1039/C8NR02752H>.
- [8] T.S. Boscke, S. Teichert, D. Brauhaus, J. Muller, U. Schroder, U. Bottger, and T. Mikolajick, *Phase transitions in ferroelectric silicon doped hafnium oxide*, Appl. Phys. Lett., 99, 112904 (2011); <https://doi.org/10.1063/1.3636434>.
- [9] P. Nukala, M. Ahmadi, Y.F. Wei, S. de Graaf, E. Stylianidis, T. Chakraborty, S. Matzen, H.W. Zandbergen, A. Bjorling, D. Mannix, D. Carbone, B. Kooi, B., Noheda, *Reversible oxygen migration and phase transitions in hafnia-based ferroelectric devices*, Science, 372, 630 (2021); <https://doi.org/10.1126/science.abf3789>.
- [10] H. Mulaosmanovic, S. Dünkler, J. Müller, M. Trentzsch, S. Beyer, E.T. Breyer, T. Mikolajick, and S. Slesazek, *Impact of read operation on the performance of HfO<sub>2</sub>-based ferroelectric FETs*, IEEE Electron. Device Lett., 41, 1420 (2020); <https://doi.org/10.1109/LED.2020.3007220>.
- [11] P.D. Lomenzo, S. Jachalke, H. Stoecker, E. Mehner, C. Richter, T. Mikolajick, U. Schroeder, *Universal Curie constant and pyroelectricity in doped ferroelectric HfO<sub>2</sub> thin films*, Nano Energy, 74, 104733 (2020).
- [12] Yu. A. Kruglyak, M. V. Strikha, *Physics of nanotransistors: MOSFET theory in traditional approach, zero level virtual source model, and depletion approximation*, Sensor Electronics and Microsystem Technologies, 16(1), 24 (2019); <https://doi.org/10.18524/1815-7459.2019.1.159485>
- [13] Yu. A. Kruglyak, M. V. Strikha, *Physics of nanotransistors: gate voltage and surface potential, mobile charge in bulk MOS and in thin SOI*, Sensor Electronics and Microsystem Technologies, 16(2), 5 (2019); <https://doi.org/10.18524/1815-7459.2019.2.171224>
- [14] S. M. Sze, *Physics of Semiconductor Devices*, 2<sup>nd</sup> ed. (Wiley-Interscience, New York, 1981).
- [15] Supplementary materials in <http://arxiv.org/abs/2208.13187>



- [16] R. L. Anderson, *Experiments on Ge-GaGs heterojunctions*, Solid-State Electronics, 5, 341 (1962); [https://doi.org/10.1007/978-94-009-3073-5\\_2](https://doi.org/10.1007/978-94-009-3073-5_2).
- [17] L. D. Landau, and I. M. Khalatnikov, *On the anomalous absorption of sound near a second order phase transition point*, In Dokl. Akad. Nauk SSSR, 96, 496 (1954).
- [18] A.M. Bratkovsky, and A. P. Levanyuk, *Very large dielectric response of thin ferroelectric films with the dielectric layers*, Phys. Rev., B 63, 132103 (2001); <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.63.132103>.
- [19] M. V. Strikha, A. M. Morozovska, *On the impossibility of a stable negative capacitance realization in mosfet transistors with insulators based on thin layers of dielectric and ferroelectric*, Sensor Electronics and Microsystem Technologies, 19(1/2), 19 (2022); <https://doi.org/10.18524/1815-7459.2022.1/2.258446>
- [20] E. A. Eliseev, M. E. Yeliseiev, S. V. Kalinin and A. N. Morozovska. *Observability of negative capacitance of a ferroelectric film: Theoretical predictions*. Phys. Rev. B, 105, 174110 (2022); <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.105.174110>.
- [21] The realized minimal thickness of the SiO<sub>2</sub> layer is about 1.8 nm, and the minimal width of p-Si channel is 4 nm. We use smaller sizes in FEM to show how the sizes influence on the polar properties and capacitance of HfO<sub>2</sub> film.
- [22] A.I. Khan, K. Chatterjee, B. Wang, S. Drapcho, L.You, C. Serrao, S.R. Bakaul, R. Ramesh, and S. Salahuddin, *Negative capacitance in a ferroelectric capacitor*, Nat. Mater., 14, 182 (2015); <https://doi.org/10.1038/nmat4148>.
- [23] M. Hoffmann, M. Pešić, K. Chatterjee, A.I. Khan, S. Salahuddin, S. Slesazeck, U. Schroeder, and T. Mikolajick, *Direct observation of negative capacitance in polycrystalline ferroelectric HfO<sub>2</sub>*. Adv. Func. Mater., 26, 8643 (2016); <https://doi.org/10.1002/adfm.201602869>.
- [24] P. Zubko, J. C. Wojdeł, M. Hadjimichael, S. Fernandez-Pena, A. Sené, I. Luk'yanchuk, J.-M. Triscone, and J. Íñiguez, *Negative capacitance in multidomain ferroelectric superlattices*, Nature, 534, 524 (2016); <https://doi.org/10.1038/nature17659>.

E. A. Eliseev<sup>1</sup>, A. N. Morozovska<sup>2</sup>, L. P. Yurchenko<sup>1</sup> and M. V. Strikha<sup>3,4</sup>

## Could the negative capacitance effect be used in field-effect transistors with a ferroelectric gate?

<sup>1</sup>*Institute for Problems of Materials Science, National Academy of Sciences of Ukraine, Kyiv, Ukraine*

<sup>2</sup>*Institute of Physics, National Academy of Sciences of Ukraine, Kyiv, Ukraine,*

<sup>3</sup>*Taras Shevchenko Kyiv National University, Faculty of Radiophysics, Electronics and Computer Systems, Kyiv, Ukraine, [maksym.strikha@gmail.com](mailto:maksym.strikha@gmail.com).*

<sup>4</sup>*V.Lashkariov Institute of Semiconductor Physics, National Academy of Sciences of Ukraine, Kyiv, Ukraine*

We analyze the electric potential and field, polarization and charge, and differential capacitance of a silicon metal-oxide-ferroelectric field effect transistor (MOSFET), in which a gate insulator consists of thin layers of dielectric SiO<sub>2</sub> and weak ferroelectric HfO<sub>2</sub>. It appeared possible to achieve a quasi-steady-state negative capacitance (NC) of the HfO<sub>2</sub> layer,  $C_{\text{HfO}_2} < 0$ , if the layer thickness is close to the critical thickness of the size-induced ferroelectric-paraelectric phase transition. However, this effect disappears as the gate voltage increases above a certain critical value, which can be explained by the nonlinearity of the ferroelectric permittivity. The quasi-steady-state NC corresponds to a positive capacitance of the whole system. Implementation of the gate insulator NC,  $C_{\text{ins}}$ , can open the principal possibility to reduce the MOSFET subthreshold swing below the critical value, and to decrease the gate voltage below the fundamental Boltzmann limit. However, we failed to find the parameters for which  $C_{\text{ins}}$  is negative in the quasi-steady states; and thus, the negative  $C_{\text{HfO}_2}$  cannot reduce the subthreshold swing below the fundamental limit. Nevertheless, the increase in  $C_{\text{ins}}$ , related with  $C_{\text{HfO}_2} < 0$ , can decrease the swing above the limit, reduce device heating during the operation cycles, and thus contribute to further improvements of MOSFET performances.

**Keywords:** negative capacitance, ferroelectric film, size-induced phase transition, metal-oxide-ferroelectric field effect transistor.