TCAD による強誘電体負性容量分極のコヒーレンシーとその時間的発展のシミュレーション

Simulation on Coherency of Polarization in Ferroelectric Negative Capacitance and Its Evolution Based on TCAD

産総研 [1]，東大 工 [2] ○太田 裕之 [1]，池上 努 [1]，福田 浩一 [1]，服部 淳一 [1]，浅井 栄大 [1]
遠藤 和彦 [1], 右田 真司 [1]，鳥海 明 [2]

AIST[1], Univ. of Tokyo[2], °H. Ota[1], T. Ikegami[1], K. Fukuda[1], J. Hattori[1], H. Asai[1],
K. Endo[1], S. Migita[1], and A. Toriumi[2]

E-mail: hi-ota@aist.go.jp

【はじめに】近年、スマートセンサーノード等の応用を見据えて、強誘電体をゲート絶縁膜として用いる強誘電体負性容量（NC）トランジスタ(NCFET)[1]が注目されている。NCFET では、強誘電体の負性容量効果[1]を利用することにより subthreshold swing (SS)を、従来トランジスタの物理限界である 60 mV/decade 以下にできると期待されている。最近、HfO_2 系強誘電材料をゲート絶縁膜とする NCFET において、SS の急峻化が多数報告[2,3]されているが、さらなる特性改善の指針を示すためには technology computer-aided design(TCAD)が重要である。

しかし、従来の枠組みの TCAD では多くの場合、強誘電体の分極が常にコヒーレントに揃ったシングルドメインが仮定されている。しかし、強誘電体の自発分極はシングルドメインとは限らない。本研究では、強誘電体の分極の不均一性を考慮したモデルを内製TCAD（Impulse TCAD）[5]にて開発し、マルチドメイン分極状態からシングルドメインのＮＣ分極へどのように遷移していくのかを計算したので報告する。

【Simulation】不均一な強誘電体分極を考慮した強誘電体自発分極を記述する Landau–Khalatnikov 方程式は

$$\rho \frac{dP}{dt} = -\nabla_p G \qquad (1)$$

$$G = \alpha P^2 + \beta P^4 + \gamma P^6 + \frac{1}{2}\delta(\nabla P)^2 - EP \qquad (2)$$

で与えられる[6]。ここに$\rho, \alpha, \beta, \gamma$は強誘電体の材料パラメータ、$G$ は Gibb's free energy, P は分極、E は強誘電体内部の電界である。またδは強誘電体分極間の相互作用を表すパラメータである。

計算では **Fig. 1** に示すように $t<0$ において、２つのドメインからなる自発分極状態を初期値として仮定し、$t>0$ において外部電圧を 0 にした状態で分極の時間発展を計算した。

【結果と考察】**Figs. 2(a)**及び**(b)**は界面層の膜厚を 0.8 nm の条件で計算した、0V 印加後のドメイン分極の時間発展を示している。**Fig. 2 (a)** においては$\delta = 10^{-7}$ m^3/F, **Fig. 2 (b)**では$\delta = 10^{-9}$ m^3/F としている。分極間の相互作用が強い$\delta = 10^{-7}$ m^3/F の場合、分極が急激に減衰している一方で、$\delta = 10^{-9}$ m^3/F の場合は逆向きの自発分極が維持されている。相互作用が弱い場合は、マルチドメイン構造が維持されやすく、分極間の相互作用が強くなるにつれてシングルドメインの NC 状態（電圧 0 V で分極 0 μC/cm^2）が維持されやすくなることを示している[7]。

【謝辞】本研究は、JST、CREST(JPMJCR14F2)の支援を受けたものである。

【参考文献】[1] S. Salahuddin and S. Datta, Nano Letters, **8** (2008) 405. [2] M.H. Lee *et al.*, IEDM Tech. Dig. 2015, p.616. [3] M.H. Lee *et al.*, IEDM Tech. Dig. 2016, p.306. [4] J. Zhou *et al.*, IEDM Tech. Dig. 2016, p. 310. [5] https://unit.aist.go.jp/neri/ja/ImpulseTCAD/index.html. [6] J. Hattori *et al.*, SISPAD-2018, p.214. [7] H. Ota *et al.*, IEDM Tech. Dig. 2018, p.197.

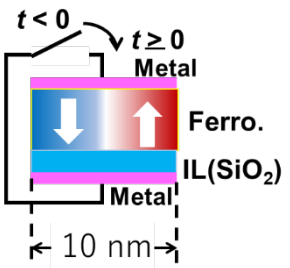

Fig. 1 A schematic setup of relaxation simulation. for metal/ferroelectric (F) /SiO_2 (IL)/metal structure. P_r and the coercive field are assumed as 20 μC/cm^2,

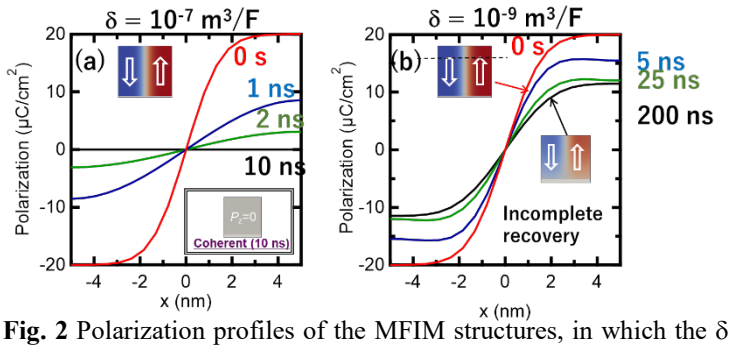

Fig. 2 Polarization profiles of the MFIM structures, in which the δ parameters of the ferroelectric layer are (a) 10^{-7} m^3/F and (b) 10^9 m^3/F, respectively.