



## Diplomová práce

# Návrh tranzistoru řízeného polem využívajícího statickou zápornou kapacitu feroelektrického nanodoménového zárodku

*Studijní program:*

N3901 Aplikované vědy v inženýrství

*Studijní obor:*

Aplikované vědy v inženýrství

*Autor práce:*

**Bc. Vít Kosina**

*Vedoucí práce:*

prof. Ing. Pavel Mokrý, Ph.D.

Ústav mechatroniky a technické informatiky

Liberec 2023



## Zadání diplomové práce

# Návrh tranzistoru řízeného polem využívajícího statickou zápornou kapacitu feroelektrického nanodoménového zárodku

<i>Jméno a příjmení:</i>	<b>Bc. Vít Kosina</b>
<i>Osobní číslo:</i>	M20000194
<i>Studijní program:</i>	N3901 Aplikované vědy v inženýrství
<i>Studijní obor:</i>	Aplikované vědy v inženýrství
<i>Zadávající katedra:</i>	Ústav mechatroniky a technické informatiky
<i>Akademický rok:</i>	2022/2023

## Zásady pro vypracování:

1. Seznamte se s definicí počáteční a okrajové úlohy pro soustavu parciálních diferenciálních rovnic (PDR), seznamte se se slabou formulací okrajové úlohy nelineární PDR, seznamte se s Newtonovou metodou řešení nelineární PDR [1, 2].
2. Seznamte se s rovnicemi matematické fyziky, které řídí časový vývoj rovnovážné feroelektrické doménové struktury v jednoosém feroelektriku [3]. Seznamte se s rovnicemi matematické fyziky, které řídí proudové hustoty volných nosičů náboje v kanále tranzistoru řízeného polem [4].
3. Implementujte numerický model tranzistoru řízeného elektrickým polem. Implementujte numerický model tranzistoru řízeného elektrickým polem s feroelektrickou vrstvou vloženou mezi elektrodou hradla a polovodičový kanál v souladu s článkem [5].
4. Proveďte simulace tranzistoru řízeného elektrickým polem s feroelektrickou vrstvou ve zvoleném softwarovém nástroji založeném na metodě konečných prvků.
5. Proveďte výpočet makroskopických parametrů tranzistoru.
6. Zhodnoťte výsledky simulací.



*Rozsah grafických prací:* dle potřeby dokumentace  
*Rozsah pracovní zprávy:* 40-50 stran  
*Forma zpracování práce:* tištěná/elektronická  
*Jazyk práce:* Čeština

### **Seznam odborné literatury:**

- [1] M. Brzezina a kol.: Matematika IV, TUL Liberec 1996
- [2] S. Míka, A. Kufner: Okrajové úlohy pro obyčejné diferenciální rovnice, SNTL, Praha 1983
- [3] A. K. Tagantsev, L. E. Cross, J. Fousek: Domains in Ferroic Crystals and Thin Films, Springer, 2010
- [4] I. Uhlíř: Elektrické obvody a elektronika, Nakladatelství ČVUT, Praha, 2008
- [5] T. Sluka, P. Mokřý, N. Setter: Appl. Phys. Lett. 111, 152902 (2017); doi: 10.1063/1.4989391

*Vedoucí práce:* prof. Ing. Pavel Mokřý, Ph.D.  
Ústav mechatroniky a technické informatiky

*Datum zadání práce:* 26. října 2022  
*Předpokládaný termín odevzdání:* 22. května 2023

prof. Ing. Zdeněk Plíva, Ph.D.  
děkan

L.S.

doc. Ing. Josef Černohorský, Ph.D.  
vedoucí ústavu

V Liberci dne 26. října 2022

## Prohlášení

Prohlašuji, že svou diplomovou práci jsem vypracoval samostatně jako původní dílo s použitím uvedené literatury a na základě konzultací s vedoucím mé diplomové práce a konzultantem.

Jsem si vědom toho, že na mou diplomovou práci se plně vztahuje zákon č. 121/2000 Sb., o právu autorském, zejména § 60 – školní dílo.

Beru na vědomí, že Technická univerzita v Liberci nezasahuje do mých autorských práv užitím mé diplomové práce pro vnitřní potřebu Technické univerzity v Liberci.

Užiji-li diplomovou práci nebo poskytnu-li licenci k jejímu využití, jsem si vědom povinnosti informovat o této skutečnosti Technickou univerzitu v Liberci; v tomto případě má Technická univerzita v Liberci právo ode mne požadovat úhradu nákladů, které vynaložila na vytvoření díla, až do jejich skutečné výše.

Současně čestně prohlašuji, že text elektronické podoby práce vložený do IS/STAG se shoduje s textem tištěné podoby práce.

Beru na vědomí, že má diplomová práce bude zveřejněna Technickou univerzitou v Liberci v souladu s § 47b zákona č. 111/1998 Sb., o vysokých školách a o změně a doplnění dalších zákonů (zákon o vysokých školách), ve znění pozdějších předpisů.

Jsem si vědom následků, které podle zákona o vysokých školách mohou vyplývat z porušení tohoto prohlášení.

# Návrh tranzistoru řízeného polem využívajícího statickou zápornou kapacitu feroelektrického nanodoménového zárodku

## Abstrakt

Diplomová práce se věnuje hypotéze, která je v současné době intenzivně zkoumána v odborné literatuře a která konstatuje, že pomocí feroelektrických materiálů je možné snížit rozkmit napětí na hradle unipolárního tranzistoru. Rozkmit napětí je dán tzv. Boltzmannovou tyranií, která stanoví, že pro desetinásobné zvětšení proudu tekoucího unipolárním tranzistorem je nutné zvýšit napětí na hradle o 60 mV. Toto omezení v současné době brání dalšímu snižování spotřeby unipolárních tranzistorů. Cílem této práce je analyzovat vliv nanodoménového zárodku ve feroelektrickém kondenzátoru na napětí na kanálu v tranzistoru řízeném elektrickým polem. V diplomové práci byly vytvořeny analytické a numerické modely tranzistoru s feroelektrickou vrstvou. V rámci analytického modelu byl odvozen analytický vztah pro popis zesílení na kanále pomocí dvou sériově zapojených kondenzátorů. Dále byla provedena základní analýza stability záporné permitivity ve feroelektriku, které je součástí dvojvrstvy feroelektrikum-dielektrikum. V rámci numerického modelu byly provedeny simulace tranzistoru s hypotetickou dielektrickou vrstvou se zápornou permitivitou. Na numerickém modelu je ukázáno, že přítomnost volných nosičů nábojů ovlivňuje elektrická pole v MOSFETu a tedy, že jednoduchý analytický model sériového zapojení dvou kondenzátorů, který se často ve vědecké literatuře používá, je nepoužitelný pro přesný návrh tranzistoru. Dále byly provedeny numerické simulace modelu tranzistoru s feroelektrickou vrstvou, která obsahuje nanodoménový zárodek. Na těchto simulacích se podařilo prokázat přítomnost negativní diferenciální permitivity ve feroelektriku.

Klíčová slova: záporná kapacita, feroelektřina, MOSFET

# Design of field effect transistor using static negative capacitance of ferroelectric nanodomain nucleus

## Abstract

This thesis explores the hypothesis, which is currently intensively investigated in the scientific literature, that by using ferroelectric materials, it is possible to reduce the subthreshold swing on the gate of a unipolar transistor. The subthreshold swing is given by the so-called Boltzmann tyranny, which states that to increase the current flowing through a unipolar transistor tenfold, it is necessary to increase the gate voltage by 60 mV. This constraint currently prevents further reduction of the power consumption of unipolar transistors. The aim of this work is to analyze the effect of a nanodomain nucleus in a ferroelectric capacitor on the channel voltage in a field effect transistor. In this thesis, analytical and numerical models of a transistor with a ferroelectric layer have been developed. Within the analytical model, an analytical relation was derived to describe the gain on the channel using two capacitors connected in series. In addition, a basic analysis of the stability of the negative permittivity in the ferroelectric layer, which is part of the ferroelectric-dielectric double layer, was performed. Numerical model simulations of a transistor with a hypothetical dielectric layer with negative permittivity were performed. It is shown in the numerical model that the presence of free charge carriers affects the electric fields in the MOSFET and, therefore, that the simple analytical model of a series connection of two capacitors, which is often used in the scientific literature, is inapplicable for accurate transistor design. Furthermore, numerical simulations of a transistor model with a ferroelectric layer containing a nanodomain nucleus were performed. These simulations were able to demonstrate the presence of negative differential permittivity in the ferroelectric layer.

Keywords: negative capacitance, ferroelectricity, MOSFET

## Poděkování

Tímto děkuji prof. Ing. Pavlu Mokrému, Ph.D. za jeho ochotu, cenné připomínky a čas věnovaný vedení této práce.

# Obsah

Abstrakt	4
Poděkování	6
Seznam obrázků	8
Seznam tabulek	12
<b>1 Úvod</b>	<b>13</b>
1.1 Cíle diplomové práce	13
1.2 Struktura diplomové práce	14
<b>2 Transistory</b>	<b>15</b>
2.1 Polovodiče	15
2.1.1 Pásová struktura polovodičů	15
2.1.2 Elektrony a díry	16
2.1.3 Dopování	17
2.1.4 PN přechod	17
2.1.5 Tranzistory	18
2.2 MOSFET	18
2.3 Teoretické a praktické limity transistorů	20
<b>3 Feroelektrika</b>	<b>21</b>
3.1 Struktura feroelektrických látek	21
3.1.1 Polarizace a hystereze feroelektrik	22
3.1.2 Domény a doménové stěny ve feroelektrikách	23
3.2 Landauova teorie fázových přechodů	23
3.2.1 Vliv elektrického pole na vlastnosti feroelektrik	26
3.2.2 Ginzburgův člen a existence domén	28
<b>4 Analytický model unipolárního tranzistoru s feroelektrickou vrstvou</b>	<b>30</b>
4.1 Záporná kapacita	30
4.1.1 Analytický model MOSFETu jako soustavy dvou kondenzátorů	30
4.1.2 Nanodoménový zárodek	35

<b>5</b>	<b>Numerický model unipolárního tranzistoru s feroelektrickou vrstvou</b>	<b>37</b>
5.1	Parciální diferenciální rovnice . . . . .	37
5.1.1	Základní informace . . . . .	37
5.1.2	Počáteční a okrajové podmínky pro soustavu PDR . . . . .	37
5.1.3	Slabá formulace PDR . . . . .	38
5.1.4	Metoda konečných prvků . . . . .	38
5.1.5	Newtonova metoda pro řešení nelineárních PDR . . . . .	39
5.2	Rovnice popisující MOSFET . . . . .	41
5.2.1	Drift-difuzní rovnice . . . . .	41
5.2.2	Stabilizované drift-difuzní rovnice . . . . .	41
5.2.3	Aproximace pomocí kvazi-Fermiho hladin . . . . .	43
5.3	Popis modelu MOSFETu . . . . .	43
5.3.1	Geometrie a materiálové parametry . . . . .	43
5.3.2	Okrajové podmínky . . . . .	45
<b>6</b>	<b>Výsledky modelování MOSFETu s dielektrickou vrstvou</b>	<b>47</b>
6.1	Chování MOSFETu při kladných permitivitách na dielektriku . . . . .	47
6.2	Chování MOSFETu při záporných permitivitách na dielektriku . . . . .	49
6.3	Změny chování MOSFETu v závislosti na permitivitě dielektrika . . . . .	50
<b>7</b>	<b>Výsledky modelování MOSFETu s feroelektrickou vrstvou</b>	<b>69</b>
7.1	Model nanodoménového feroelektrika . . . . .	69
7.2	Vytvořené doménové struktury . . . . .	71
7.3	Numerické simulace transistoru s feroelektrikem . . . . .	71
7.3.1	Diferenciální zesílení ve feroelektriku s tloušťkou přes 50 nm . . . . .	71
<b>8</b>	<b>Závěr</b>	<b>79</b>
	<b>Použitá literatura</b>	<b>81</b>

## Seznam obrázků

2.1	Pásový model atomu u kovu, polovodiče a izolantu. (Zdroj: Přejvzato a upraveno z ( <i>Band gap comparison</i> , [b.r.])) . . . . .	16
2.2	a) PN přechod v propustném směru. b) PN přechod v závěrném směru. (Zdroj: Přejvzato a upraveno z ( <i>PN Junction Bias</i> , [b.r.])) . . . . .	18
2.3	Konstrukční schéma MOSFETu. (Zdroj: Přejvzato a upraveno z ( <i>Construction Of MOSFET</i> , [b.r.])) . . . . .	19
3.1	Vztah mezi feroelektriky, piezoelektriky, pyroelektriky a dielektriky. (Zdroj: Přejvzato a upraveno z (Khanbareh, 2016)) . . . . .	22
3.2	Struktura titaničnanu barnatého. a) Kubická mřížka nad Curieho teplotou. b) Tetragonální mřížka pod Curieho teplotou. (Zdroj: Přejvzato z (Korkmaz a Kariper, 2021)) . . . . .	23
4.1	Zjednodušené schéma MOSFETu. (Zdroj: Autor) . . . . .	31
4.2	Ekvivalentní elektrický obvod struktury MOSFETu jako kondenzátor. (Zdroj: Autor) . . . . .	32
4.3	Křivka závislosti polarizace na elektrickém poli ve feroelektriku. (Zdroj: Autor) . . . . .	33
4.4	Zjednodušený model MOSFETu s feroelektrickou vrstvou. (Zdroj: Autor) . . . . .	34
5.1	Ukázka kroku Newtonovy metody. (Zdroj: Přejvzato a upraveno z ( <i>Newton iteration</i> , [b.r.])) . . . . .	40
5.2	Geometrie modelu MOSFETu. . . . .	45
6.1	VA charakteristika pro $\varepsilon = 2$ logaritmická škála. . . . .	48
6.2	VA charakteristika pro $\varepsilon = 2$ nelogaritmická škála. . . . .	49
6.3	Hustota elektronů v transistoru při $V_g = 1,2$ V a $V_s = 0$ V. . . . .	50
6.4	Hustota elektronů v transistoru při $V_g = 1,2$ V a $V_s = 4$ V. . . . .	51
6.5	Hustota děr v transistoru při $V_g = 0$ V a $V_s = 0$ V. . . . .	52
6.6	Hustota děr v transistoru při $V_g = 1,2$ V a $V_s = 8$ V. . . . .	53
6.7	Elektrický potenciál v transistoru při $V_g = 0$ V a $V_s = 0$ V. . . . .	54
6.8	Elektrický potenciál v transistoru při $V_g = 1,2$ V a $V_s = 0$ V. . . . .	55
6.9	Elektrický potenciál v transistoru při $V_g = 1,2$ V a $V_s = 8$ V. . . . .	55
6.10	VA charakteristika pro $\varepsilon = 4$ logaritmická škála. . . . .	56
6.11	Elektronová hustota v transistoru při $V_g = 0,6$ V a $V_s = 0$ V. . . . .	56



6.12	Elektronová hustota v transistoru při $V_g = 1,2$ V a $V_s = 0$ V. . . . .	57
6.13	Elektronová hustota v transistoru při $V_g = 0$ V a $V_s = 0$ V při kladné permitivitě $\varepsilon = 4$ . . . . .	57
6.14	VA charakteristika pro $\varepsilon = -2$ logaritmická škála. . . . .	58
6.15	VA charakteristika pro $\varepsilon = -2$ nelogaritmická škála. . . . .	58
6.16	VA charakteristika pro $\varepsilon = -4$ logaritmická škála. . . . .	59
6.17	VA charakteristika pro $\varepsilon = -4$ nelogaritmická škála. . . . .	59
6.18	Elektrický potenciál při $V_g = -1,2$ V a $V_s = 0$ V pro zápornou permitivitu $\varepsilon = -2$ . . . . .	60
6.19	Elektronová hustota při $V_g = -0,6$ V a $V_s = 0$ V pro zápornou permitivitu $\varepsilon = -2$ . . . . .	61
6.20	Elektronová hustota při $V_g = -0,6$ V a $V_s = 1,2$ V pro zápornou permitivitu $\varepsilon = -2$ . . . . .	62
6.21	Závislost proudu do kolektoru v závislosti na napětí na hradle při různých permitivitách dielektrika na při $V_s = 1$ V. . . . .	62
6.22	Závislost napětí na kanále v závislosti na napětí na hradle při různých permitivitách dielektrika. . . . .	63
6.23	Porovnání závislostí napětí na kanále v závislosti na napětí na hradle při různých permitivitách dielektrika mezi výpočty z rovnic a výsledky ze simulace. . . . .	63
6.24	Elektronová hustota v transistoru při $V_g = 0$ V a $V_s = 0$ V při záporné permitivitě $\varepsilon = -4$ . . . . .	64
6.25	Závislost práce na kanále na napětí na hradle při různých permitivitách dielektrika. . . . .	64
6.26	Závislost práce na kanále na napětí na hradle při různých tloušťkách dielektrika při $\varepsilon = -2$ . . . . .	65
6.27	Podíl napětí na kanálu a na hradle v závislosti na podílu relativní permitivity dielektrika a křemíku při různých tloušťkách dielektrika při kladných permitivitách. Graf jsou spočítány pro $s = 7$ nm. . . . .	65
6.28	Podíl napětí na kanálu a na hradle v závislosti na podílu relativní permitivity dielektrika a křemíku při různých tloušťkách dielektrika při záporných permitivitách. Graf jsou spočítány pro $s = 7$ nm . . . . .	66
6.29	Podíl napětí na kanálu a na hradle v závislosti na podílu relativní permitivity dielektrika a křemíku při různých tloušťkách dielektrika při záporných permitivitách a nízké $V_g$ . Graf jsou spočítány pro $s = 7$ nm. . . . .	66
6.30	Podíl napětí na kanálu a na hradle v závislosti na podílu relativní permitivity dielektrika a křemíku při různých tloušťkách dielektrika ve všech předchozích případech. Graf jsou spočítány pro $s = 7$ nm. . . . .	67
6.31	Porovnání výsledků z numerického a analytického modelu a) Porovnání výsledků zesílení pro kladné permitivity. b) Porovnání výsledků zesílení pro záporné permitivity. c) Porovnání výsledků zesílení pro záporné permitivity a nízké napětí $V_g$ . d) Voltampérová charakteristika transistoru při nízkých hodnotách $V_g$ a velkém zesílení. Grafy jsou spočítány pro $s = 7$ nm. . . . .	68

a	.....	68
b	.....	68
c	.....	68
d	.....	68
7.1	Geometrie modelu MOSFETu s feroelektrickou vrstvou. . . . .	70
7.2	Nanodoménové struktury při různých tlouškách dielektrika a různých rozměrech elektrody. . . . .	72
a	Nanodoménová struktura vzniklá při tloušťce feroelektrika 5 nm a délce elektrody 3 nm při napětí 0,7 V na elektrodě. . . .	72
b	Nanodoménová struktura vzniklá při tloušťce feroelektrika 5 nm a délce elektrody 6 nm při napětí 0,7 V na elektrodě. . . .	72
c	Nanodoménová struktura vzniklá při tloušťce feroelektrika 10 nm a délce elektrody 6 nm při napětí 0,7 V na elektrodě. . . .	72
d	Nanodoménová struktura vzniklá při tloušťce feroelektrika 5 nm a délce elektrody 1 nm při napětí 0,7 V na elektrodě. . . .	72
7.3	Napětí na kanále v závislosti na napětí na hradle pro různé geometrické konfigurace. . . . .	73
7.4	Vlastnosti transistoru s feroelektrikem o tloušťce 100 nm. . . . .	75
a	Závislost napětí na kanále na napětí na hradle s diferenciálním zesílením. . . . .	75
b	Oblast diferenciálního zesílení v detailu. . . . .	75
c	Závislost proudu na kanále na napětí na hradle se zesílením. . . . .	75
d	Závislost práce na kanále na napětí na hradle se zesílením. . . . .	75
7.5	Doménové struktury před a po zesílení. . . . .	76
a	Doménová struktura před diferenciálním zesílením. . . . .	76
b	Doménová struktura při diferenciálním zesílení. . . . .	76
7.6	Graf diferenční kapacity pro feroelektrikum s tloušťkou 100 nm. . . .	77
a	Diferenční kapacita feroelektrika v závislosti na napětí na hradle. . . . .	77
b	Detail diferenční kapacity v bodě se zápornou kapacitou. . . .	77
7.7	Závislost náboje na hradle na rozdílu napětí mezi hradlem a kanálem. . . . .	78

## Seznam tabulek

5.1	Geometrické parametry použité pro simulace . . . . .	44
5.2	Materiálové parametry použité pro simulace . . . . .	44
7.1	Materiálové parametry ferroelektrika oxidu hafničitého . . . . .	70

# 1 Úvod

## 1.1 Cíle diplomové práce

V současnosti je náš svět extrémně závislý na počítačích a technologiích na nich postavených, jako je internet a umělá inteligence. Základním konstrukčním prvkem všech počítačů je procesor. Procesor je v moderních počítačích konstruován jako integrovaný obvod, přičemž veškeré operace procesoru (numerické i logické) jsou binární (logické), a to vyžaduje implementaci logických hradel, která jsou velmi rychlá. V současnosti jsou logickými hradly pro počítače transistory. Lze tedy říct, že na technologii transistoru stojí v podstatě celý moderní svět. Proto také lidstvo vydává nezměrné úsilí k neustálému zdokonalování transistoru, k jeho zmenšování, ke snižování spotřeby energie a ke zvyšování jeho rychlosti. Bohužel se stávajícími technologiemi již brzy narazíme na fyzikální zákony, které nám zabrání dále transistory vylepšovat. Je tedy nutné hledat nové technologie, nové materiály a další způsoby, jak bychom mohli vyrábět výkonnější počítače.

Takzvaná Boltzmannova tyranie vychází z termodynamických zákonů a definuje minimální možný rozdíl napětí mezi dvěma logickými stavy transistoru (vede/nevede proud). V současnosti se řeší různé možnosti jak obejít Boltzmannovu tyranii při konstrukci tranzistorů využitím nestability krystalové mřížky, která nastává ve feroelektriku, které je nanesené na dielektrické (polovodičové) vrstvě. (Salahuddin a Datta, 2008)

Cílem použití feroelektrika s nestabilním stavem krystalové mřížky je docílit napětového zesílení na kanále. Toto zesílení je možné, pokud je permitivita izolační vrstvy záporná. Zesílení se dá jednoduše spočítat pouze v jednoduchém dielektrickém případě. Pokud jsou v polovodičové vrstvě volné nosiče nábojů (elektrony a díry), potom mohou výsledky předpovězené jednoduchým dielektrickým modelem selhávat. Cílem práce je ověřit a zhodnotit aplikovatelnost jednoduchého dielektrického modelu pro reálný tranzistor.

Záporné permitivity lze docílit několika způsoby. Některé byly již demonstrovány i experimentálně ve feroelektrických-dielektrických supermřížkách (Zubko et al., 2016). Supermřížky ale bohužel není jednoduché implementovat do CMOS technologie. Podle (Sluka et al., 2017) existuje relativně jednoduchý způsob, jak vytvořit nestabilní dielektrický stav a zápornou permitivitu pomocí nanodoménového zárodku. Simulace v (Sluka et al., 2017) byly provedeny pro  $BaTiO_3$  a  $PbTiO_3$ , ale v současné době se zdá být nejvýhodnějším materiálem pro výrobu transistorů  $HfO_2$ , tedy oxid hafničitý, často dopovaný sírou. Cílem této práce je vytvořit hrubý návrh ge-

ometrických parametrů transistoru s použitím tohoto moderního materiálu a ověřit jeho použitelnost.

## 1.2 Struktura diplomové práce

V první části této práce jsou popsány vlastnosti polovodičů a transistorů se zaměřením na transistor řízený polem, dále jsou zde popsány vlastnosti ferroelektrických látek a matematicky popsáno jejich chování v oblasti kolem fázového přechodu. Dále je v první části kapitola o záporné kapacitě a způsobech, jak ji vyvolat v transistoru.

Ve druhé části jsou detailně popsány rovnice použité v simulacích, parametry pro simulace a okrajové podmínky, a poté zajímavější část s výsledky ze simulací. Nejprve jsou popsány simulace, ve kterých se počítá s tím, že záporné kapacity bylo dosaženo, a v simulacích se zkoumá její důsledek na chování transistoru, a poté jsou simulace zkoušející vytvořit zápornou kapacitu ve vhodném ferroelektrickém materiálu.

## 2 Transistory

### 2.1 Polovodiče

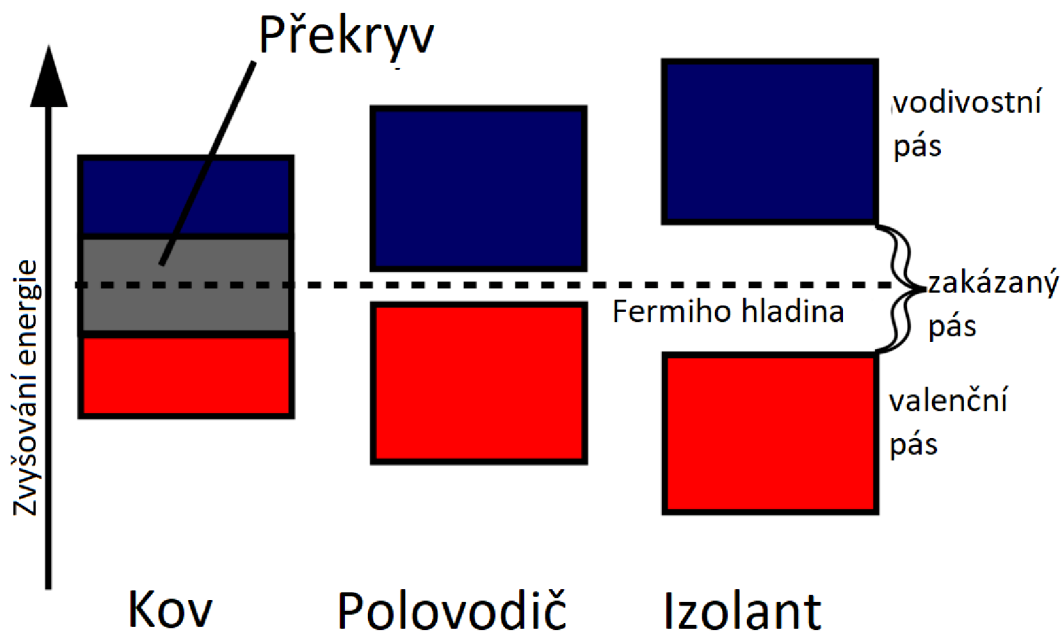
V této kapitole jsou popsány vlastnosti a struktura polovodičů, a jakým způsobem se dají vhodně upravovat. Dále je zde popsán transistor typu MOSFET a jeho fundamentální omezení. Tato omezení se pokoušíme obejít s použitím negativní kapacity ferroelektrické vrstvy.

Polovodiče jsou látky, jejichž elektrická vodivost závisí na vnějších či vnitřních podmínkách a dá se snadno ovlivnit ve velkém rozsahu změnění těchto podmínek. Mezi tyto materiály patří křemík, germanium a arsenid gallia. Elektrická vodivost polovodičů se může pohybovat a měnit ve velkém rozsahu od izolantů ( $10^{-6} (\Omega\text{m})^{-1}$ ) až po vodiče ( $10^4 (\Omega\text{m})^{-1}$ ). Tato vlastnost je vysvětlena pomocí pásového modelu atomu, který popisuje, jak v krystalické struktuře dochází k překryvu valenčních orbitalů jednotlivých atomů a k jejich sloučení do kontinuálních pásů energie. (Banerjee S., 2006)

#### 2.1.1 Pásová struktura polovodičů

Tyto pásy ukazují, jaké veškeré možné energetické stavy můžou elektrony v materiálu zaujímat. Pro vodivost polovodiče jsou nejdůležitější valenční pás, zakázaný pás a vodivostní pás. Valenční pás je pás s nejvyšší energií, který je zcela zaplněný elektrony. Vodivostní pás je pás s nejnižší energií, který je prázdný, a zakázaný pás je oblast mezi nimi, ve které nemohou být žádné elektrony, protože jí neodpovídají žádné možné elektronové orbitály. Na obrázku 2.1 je zobrazen rozdíl mezi kovy, polovodiči a izolanty ve velikosti zakázaného pásu. Pokud je elektronový pás zcela zaplněný, nedochází k přenosu elektrického náboje, protože elektrony se nemají kudy přesouvat. Ke vzniku elektrického proudu tedy musí být pás částečně prázdný. To nastane, pokud se část elektronů přesune přes zakázaný pás do vodivostního pásu.

Schopnost elektronů přesouvat se přes zakázaný pás je závislá na jeho šířce. Čím je širší, tím větší energii elektron potřebuje k jejímu překonání. Jak je vidět na obrázku 2.1, dochází u kovů k překryvu valenčního a vodivostního pásu, a tak elektrony k překonání zakázaného pásu nepotřebují žádnou energii. U polovodičů je potřeba malá energie do 3 eV a u izolantů je potřeba velká energie nad 5 eV. (Banerjee S., 2006)



Obrázek 2.1: Pásový model atomu u kovu, polovodiče a izolantu. (Zdroj: Převzato a upraveno z (*Band gap comparison*, [b.r.]))

### 2.1.2 Elektrony a díry

Dodání energie elektronu způsobí jeho přechod z valenčního do vodivostního pásu, což znamená, že se elektron uvolní z elektronového obalu a může se volně pohybovat po objemu materiálu. Pohyb volných elektronů způsobuje elektronovou vodivost. Na původním umístění elektronu vznikne díra. Díra je kladně nabitá kvazičástice, která se také může pohybovat přeskokováním z místa na místo v rámci krystalické struktury, tedy výměnou pozice s okolními elektrony. Pohyb děr způsobuje děrovou vodivost. Díry se v elektrickém poli pohybují opačným směrem než elektrony. Celkový elektrický proud je dán součtem příspěvků pohybu záporných volných elektronů a kladných děr.

Jev, při kterém dochází ke vzniku elektronu a díry v důsledku dodání energie, se nazývá generace. Dodání energie vznikne buď pohlcením fotonu o vhodné energii nebo samovolně v důsledku tepelného pohybu. Opačným jevem je rekombinace, tedy zaplnění díry volným elektronem, přičemž dojde k vyzáření fotonu nebo tepelné energie (fononu). Generace a rekombinace se opakují, přičemž jejich počet závisí na teplotě polovodiče. Při vyšší teplotě dochází k těmto jevům častěji, a proto roste celková vodivost polovodiče. Vodivost polovodiče, která je způsobena generací a rekombinací, se nazývá vlastní neboli intrinzičká, protože k ní dochází v důsledku rozbíjení vazeb v čistém materiálu. (Banerjee S., 2006)



### 2.1.3 Dopování

Vodivost polovodiče se dá velmi snadno ovlivnit přidáním nepatrného množství příměsí do jeho struktury. Tento proces se nazývá dopování a příměsi jsou často nazývané dopanty. Vodivost způsobená přidáním dopantů se nazývá nevlastní, příměšová nebo extrinzická. Příměšová vodivost závisí na množství přidávaných dopantů a může být o mnoho řádů větší než vlastní vodivost.

Monokrystalický křemík, který je nejpoužívanějším polovodičem, má ve svém valenčním elektronovém obalu čtyři elektrony, a tak tvoří čtyři kovalentní vazby se sousedními atomy. Pokud do krystalické mřížky čistého křemíku přidáme prvek, který má pět valenčních elektronů (používá se fosfor nebo arzen), vytvoří vazby se čtyřmi sousedními atomy a pátý valenční elektron se velice snadno uvolní jako volný elektron a bude přispívat k vodivosti. Tento druh dopantů nazýváme donory, protože darují volný elektron. Polovodič, který je dopován donory, je označován jako polovodič typu N (negativní), protože v něm převládajícím (majoritním) nosičem náboje záporný elektron.

Pokud do čistého křemíku přidáme prvek se třemi valenčními elektrony (používá se bór, hliník nebo gallium), vytvoří se tři vazby se sousedními atomy a na místě čtvrté vazby zůstane pozitivně nabitá díra, která bude přispívat k vodivosti. Tomuto druhu dopantů říkáme akceptory, protože mohou přijmout elektron. Polovodič, který je dopován akceptory, je polovodič typu P (pozitivní), protože je v něm majoritním nosičem náboje kladná díra.

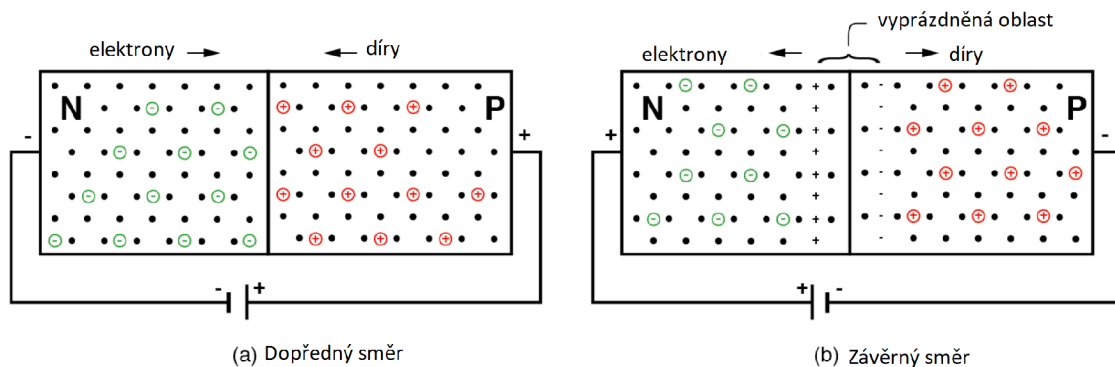
V příměšových polovodičích jsou kromě majoritních nosičů, které jsou způsobeny příměsami, i minoritní nosiče, které jsou způsobeny vlastní vodivostí, tedy obvykle generací páru elektron-díra v důsledku tepelného pohybu. Tyto minoritní nosiče proudu mají opačný náboj než majoritní a jejich výskyt je nežádoucí, protože narušují požadovanou funkčnost polovodiče. Počet minoritních nosičů roste s teplotou, a proto jsou příměšové polovodiče použitelné jen v omezeném teplotním rozsahu. (Banerjee S., 2006)

### 2.1.4 PN přechod

PN přechod je rozhraní mezi polovodičem typu N a polovodičem typu P. Typ N obsahuje přebytek volných elektronů a typ P přebytek děr. Tento přechod je vytvořen pomocí dopování každé strany jiným typem dopantu. Tato struktura umožňuje pohyb elektrického proudu pouze jedním směrem.

Na rozhraní totiž dojde k vytvoření vyprázdněné oblasti. Některé volné elektrony z polovodiče typu N v důsledku tepelného pohybu projdou přes rozhraní do polovodiče typu P, rekombinují se s tamními dírami a tím se navzájem vyruší. Stejný proces probíhá i opačně, díry z polovodiče typu P tepelně migrují do polovodiče typu N a rekombinují se s tamními volnými elektrony. Toto způsobí vznik pozitivně nabitě oblasti v polovodiči typu N a negativně nabitě oblasti v polovodiči typu P. Této oblasti se říká vyprázdněná, protože její elektrické pole ze sebe vypudí naprostou většinu pohyblivých nosičů náboje (děr a volných elektronů) a zabraňuje dalším do ní pronikat.





Obrázek 2.2: a) PN přechod v propustném směru. b) PN přechod v závěrném směru. (Zdroj: Převzato a upraveno z (*PN Junction Bias*, [b.r.]))

Pokud připojíme kladný zdroj k polovodiči typu P a záporný k typu N, dojde k zeslabení nebo úplnému zrušení elektrického pole vyprázdněné oblasti, a elektrický proud může téct. Pokud to uděláme obráceně a připojíme kladný zdroj k polovodiči typu N a záporný k typu P, způsobíme rozšíření vyprázdněné zóny a žádný proud nepoteče. Názorná ukázka je na obrázku 2.2.

PN přechod je základním prvkem všech polovodičových součástek, jako jsou diody, tranzistory, fotovoltaické články a integrované obvody. (Banerjee S., 2006)

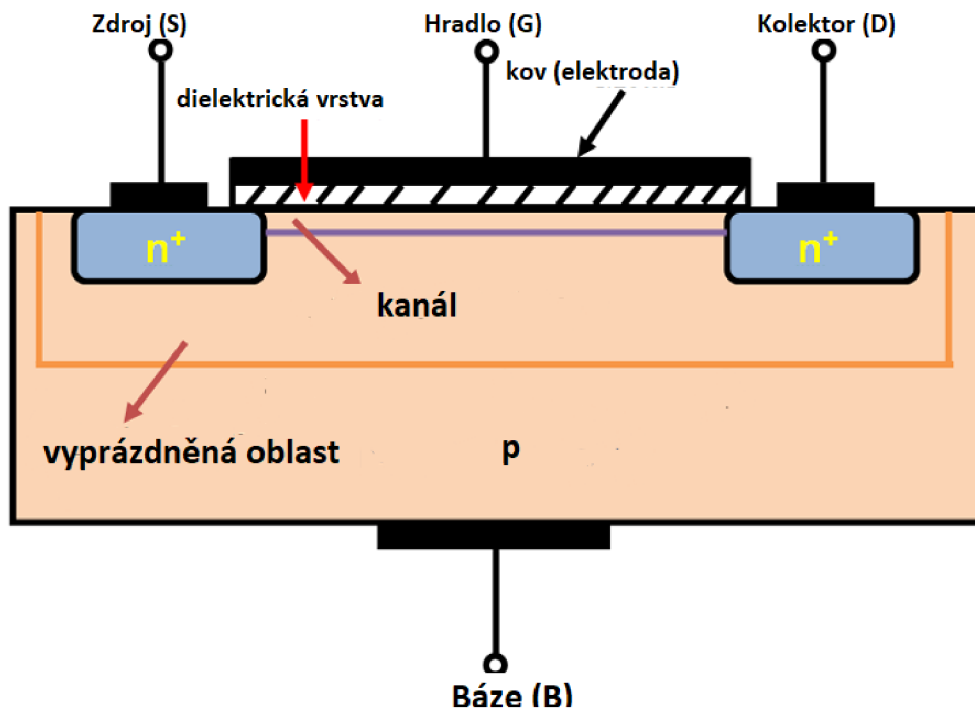
### 2.1.5 Tranzistory

Tranzistor je polovodičová součástka, která slouží k zesilování nebo přepínání elektrického signálu. Jsou základním stavebním prvkem současné elektroniky, tedy především integrovaných obvodů. Existují dva základní typy: bipolární a unipolární, které se liší strukturou a terminologií, ale v této práci bude podrobně popsán pouze unipolární transistor řízený polem MOSFET. (Banerjee S., 2006)

## 2.2 MOSFET

V této části bude popsána konstrukce a základní vlastnosti unipolárního tranzistoru řízeného elektrickým polem (angl. Field Effect Transistor, FET). Jde o transistor, který používá elektrické pole k ovládní toku proudu v polovodiči. FETy jsou řízeny se třemi elektrodami zvanými zdroj/přívod (source), kolektor/vývod (drain) a hradlo (gate). Principem fungování je, že napětí na hradle ovládá vodivost oblasti mezi zdrojem a kolektorem. Tato oblast se nazývá kanál (channel). FETů existuje řada druhů, ale zdaleka nejpoužívanějším a nejrozšířenějším je MOSFET.

MOSFET je zkratka Metal-Oxide-Semiconductor Field Effect Transistor, ve volném překladu tranzistor řízený elektrickým polem, kde elektroda hradla je od vodivostního kanálu oddělena izolující dielektrickou mezivrstvou. Křemíková vrstva tvořící základ MOSFETu je samozřejmě vhodně nadopována, přičemž oblasti kolem zdroje a kolektoru jsou extrémně nadopovány, proto jsou označovány jako n+.



Obrázek 2.3: Konstrukční schéma MOSFETu. (Zdroj: Převzato a upraveno z (*Construction Of MOSFET*, [b.r.]))

Konstrukční schéma MOSFETu je na obrázku 2.3. Oblast materiálu mezi elektrodou hradla a substrátem (body), který je uzemněný, efektivně tvoří kondenzátor. Pokud na hradlo přivedeme kladné napětí, vytvoří se pod ní vyprázdňená oblast, protože elektrické pole vypudí všechny pozitivní díry z oblasti. Přesněji díry nejsou vypuzeny, ale ke kladnému napětí jsou přitaženy volné elektrony a ty zaplní díry. Pokud je na hradlo přivedeno dostatečně silné napětí, vytvoří se přímo pod izolující vrstvou inverzní oblast. Je přitaženo víc volných elektronů, než je děr. V inverzní oblasti je velké množství volných negativních elektronů a to umožní pohyb volných nosičů náboje mezi zdrojem a kolektorem. Napětí, při kterém je stejná hustota elektronů v inverzní oblasti, jako je děr v substrátu, se nazývá prahové napětí (threshold voltage). Inverzní oblast tedy způsobí vodivost v kanálu. Při napětí mezi hradlem a zdrojem menším než je prahové napětí, MOSFET nevede proud, při napětí větším MOSFET vede proud. Tento typ MOSFETu se nazývá n-channel, protože je proud veden negativním kanálem. Obdobně při inverzním způsobu dotování je možné vytvořit MOSFET, ve kterém je proud veden skrz pozitivní kanál (p-channel).

MOSFETy s pozitivním a negativním kanálem je možné vhodně kombinovat tak, aby výsledná polovodičová struktura, která tvoří základní logické hradlo v procesoru, měla minimální spotřebu energie v klidovém stavu a maximální rychlost spínání (switching). Toto konstrukční uspořádání se nazývá complementary metal-oxide-semiconductor se zkratkou CMOS. Toto uspořádání je tak výhodné, že se používá jako logické hradlo v naprosté většině všech počítačových čipů. (Banerjee S., 2006)

## 2.3 Teoretické a praktické limity transistorů

Od objevení tranzistoru a počátku jeho používání v integrovaných obvodech sledujeme úžasný pokrok v konstrukci procesorů a dalších digitálních elektronických obvodů. Rychlost, s jakou roste komplexita procesorů, je zhruba exponenciální. V roce 1965 byl tento technologický pokrok formulován jako tzv. Moorův zákon, který říká, že se počet transistorů v integrovaném obvodu zdvojnásobuje každé dva roky. Aby bylo možné umisťovat stále více transistorů do neměničícího se objemu, je samozřejmě potřeba je zmenšovat. V současnosti narážíme při zmenšování na mnoho technologických a fyzikálních limitů, které zabraňují dalšímu následování Moorova zákona.

Existují dva zásadní fundamentální limity, které omezují neomezené zmenšování transistorů. Prvním z nich je kvantové tunelování. V důsledku neustálého zmenšování transistorů jsme se dostali na tak malou šířku hradla, že elektrony s nižší energií, než je energetická bariéra, jsou schopné se protunelovat na druhou stranu, což zvyšuje svodový (unikající) proud (leakage current). Zvýšený svodový proud má dva negativní následky. Za prvé zvyšuje spotřebu energie, a tedy generuje nežádoucí teplo, a za druhé zmenšuje rozdíl mezi zavřeným a otevřeným stavem spínače.

Další veličina, která ovlivňuje výši spotřeby energie, je rychlost přepínání, tedy rychlost, s jakou je možné transistor přepnout z otevřeného do zavřeného stavu a obráceně. Rychlost přepínání dosáhla maxima kolem roku 2005 (kolem 3.2 GHz) a od té doby se radikálně nezvyšuje. Zásadním problémem je (stejně jako v případě kvantového tunelování) generace tepla.

A protože běžné integrované obvody pracují za pokojové teploty a jsou chlazené vzduchem, je možné z obvodu odebrat pouze omezené množství tepla, což limituje jeho možnou spotřebu energie. Ve chvíli, kdy není možné z obvodu odebírat dostatečné množství tepla, dochází k jeho přehřívání, a může dojít k trvalému poškození. Pro superpočítače a podobná výkonově extrémní zařízení je možné používat lepší zdroje chlazení, jako je voda nebo kapalný dusík, ale běžné čipy jsou chlazením pouze pomocí vzduchu zásadně omezené.

Druhým fundamentálním omezením transistorů je takzvaná Boltzmannova tyranie, která vychází ze zákonů termodynamiky a říká, že aby se procházející proud zvedl desetkrát, je potřeba zvednout napětí na hradle o minimálně 60 mV. Z důvodů zmenšení svodového proudu a pro jednoznačné rozlišení mezi zavřeným a otevřeným stavem je normální rozdíl mezi stavy milionkrát ( $10^6$ ) větší. Dle Boltzmannovy tyranie je tedy nutné zvednout napětí na hradle minimálně o 360 mV (0.36 V), a to i v případě, že by kapacita dielektrické vrstvy byla nekonečná, a docházelo by tedy k 100% přenosu napětí z hradla na kanál, a veškeré materiálové konstanty polovodiče, jako je hustota stavů elektronů, byly ideální pro transistor.

Boltzmannova tyranie vychází z Boltzmannova rozdělení, což je v tomto případě rozdělení hustoty pravděpodobnosti kinetické energie elektronů, a tedy jejich schopnost překonat energetickou bariéru tvořenou hradlem. Technicky jde o Fermi-Diracovo rozdělení, ale pro transistory jsou zaměnitelné, a vývojáři transistorů to nazývají výhradně Boltzmannovým rozdělením. (Markov, 2014; Alam et al., 2019)

## 3 Feroelektrika

### 3.1 Struktura feroelektrických látek

V této kapitole budou popsány základy fyziky feroelektrických látek. V následující části budou vlastnosti feroelektrik matematicky popsány Landauovou teorií fázových přechodů.

Feroelektrický stav materiálu je takový stav, který je v určité teplotní oblasti charakterizován přítomností spontánní (permanentní) elektrické polarizace, jejíž orientace může být změněna vlivem externího elektrického pole. Musí tedy existovat alespoň dva různé rovnovážné stavy krystalové mřížky materiálu, které se liší polarizací (tj. prostorovým rozložením iontů v krystalové mříži). (Newnham, 2005)

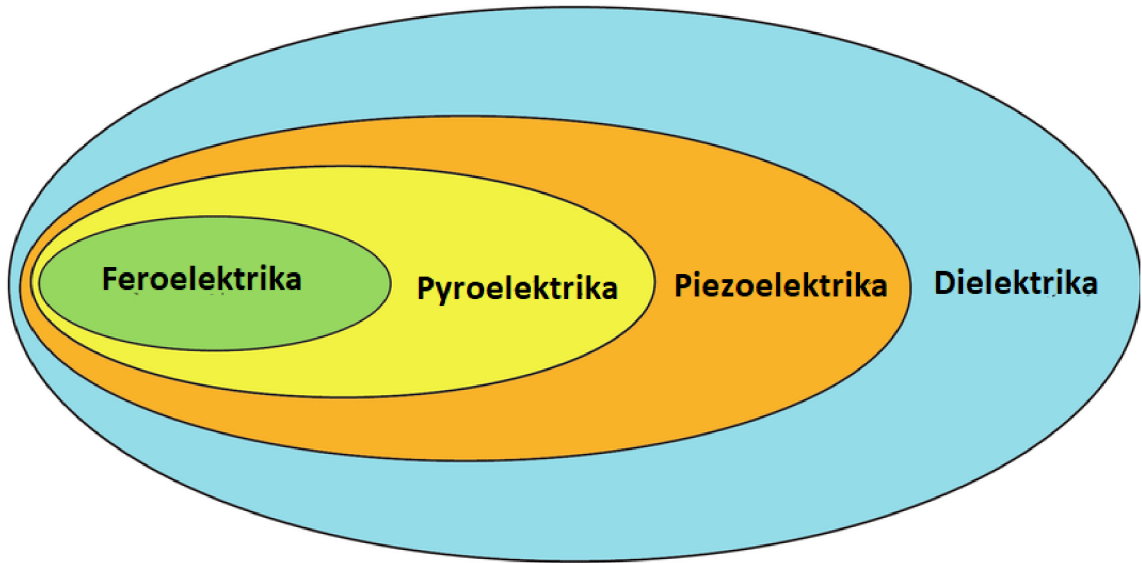
Všechny feroelektrické látky jsou současně také látky dielektrické, piezoelektrické a pyroelektrické. Tento vztah je názorně zobrazen na obrázku 3.1. Dielektrické látky jsou látky, které mohou být polarizované působením elektrického pole.

Piezoelektrické látky vytvářejí elektrické napětí při své deformaci (přímý piezoelektrický jev) anebo se deformují pod vlivem vnějšího elektrického pole (nepřímý piezoelektrický jev). Pouze látky, jejichž krystalová mřížka není středově symetrická (non-centrosymmetric), mohou mít piezoelektrické vlastnosti. Piezoelektrika má široké využití. Jedním z hlavních důvodů studia feroelektrických materiálů jsou jejich silné piezoelektrické vlastnosti.

Pyroelektrické látky vytvářejí elektrický náboj při změně teploty. Je to způsobeno změnou parametrů (rozměrů) krystalové mřížky materiálu při změně teploty, při které dochází ke změně polarizace.

Všechny tyto jevy vycházejí z krystalografických struktur daných látek. Z 32 krystalografických skupin 21 nemá středovou souměrnost. Ve dvaceti z těchto skupin se vyskytuje piezoelektrický jev a deset z piezoelektrických skupin je pyroelektrických. Některé z pyroelektrických skupin jsou feroelektrické.

Feroelektrické látky mají strukturu, která umožňuje minimálně dva různé ustálené stavy polarizace. Dobrým příkladem je titaničnan barnatý ( $\text{BaTiO}_3$ ), rozšířený feroelektrický materiál s perovskitovou krystalickou strukturou (na obrázku 3.2), který má, pod Curieho teplotou, dva různé stabilní stavy polarizace způsobené iontem titanu, který se může nacházet buď „nad“ nebo „pod“ červeně vyznačenou rovinou. (Tagantsev et al., 2010; Newnham, 2005)



Obrázek 3.1: Vztah mezi feroelektriky, piezoelektriky, pyroelektriky a dielektriky. (Zdroj: Převzato a upraveno z (Khanbarez, 2016))

### 3.1.1 Polarizace a hystereze feroelektrik

Polarizace je stavová veličina, která závisí na rozložení iontů, tedy nábojů, v krystalové mřížce. Změní-li se rozložení nábojů, změní se také hodnota polarizace. Polarizace je definována vztahem:

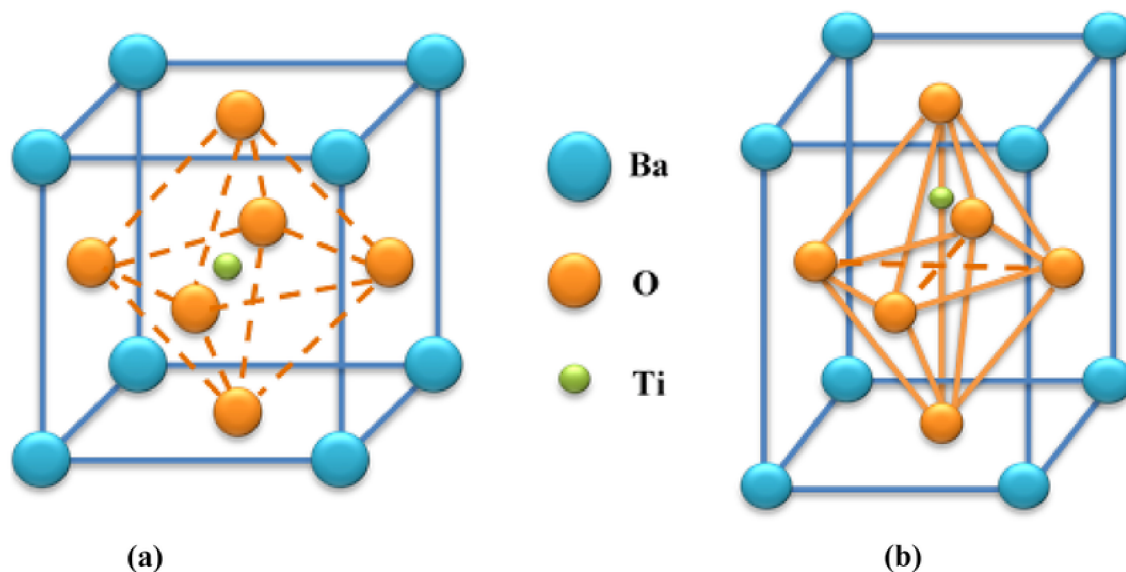
$$\Delta \mathbf{P} = \frac{1}{V} \sum_{n=1}^N q_n \Delta \mathbf{r}_n, \quad (3.1)$$

kde  $\Delta \mathbf{P}$  je změna polarizace,  $V$  je objem elementární krystalové buňky,  $q_n$  je náboj  $n$ -tého iontu a  $\Delta \mathbf{r}_n$  je posunutí nebo rozdíl v poloze  $n$ -tého iontu.

Ve většině materiálů je polarizace  $\mathbf{P}$  přímo úměrná externímu elektrickému poli, takzvaná lineární dielektrická polarizace. Toto platí pro nízké hodnoty elektrického pole. Vysoké hodnoty elektrického pole mohou vyvolat nelineární efekty i v dielektriku. V paraelektrických látkách je polarizace nelineární funkcí externího elektrického pole. U feroelektrik se v určité teplotní oblasti vytvoří nenulová spontánní polarizace, která je přítomna i bez externího pole, a navíc je možné s pomocí dostatečně silného externího pole orientaci vektoru polarizace obrátit. Tento jev se nazývá dielektrická hystereze a znamená, že stav materiálů není závislý pouze na současných (okrajových) podmínkách, ale i na předchozích stavech materiálu.

Pomocí elektrických polí nelze nijak vrátit feroelektrický materiál do původního stavu bez polarizace. Toho lze dosáhnout zvýšením teploty materiálu nad tzv. Curieho teplotu, při které dojde ke změně symetrie krystalové mřížce materiálu, a feroelektrický efekt se vytratí. (Tagantsev et al., 2010; Newnham, 2005)





Obrázek 3.2: Struktura titaničnanu barnatého. a) Kubická mřížka nad Curieho teplotou. b) Tetragonální mřížka pod Curieho teplotou. (Zdroj: Převzato z (Korkmaz a Kariper, 2021))

### 3.1.2 Domény a doménové stěny ve feroelektrikách

Dalším specifickým jevem feroelektrických látek je, že se v nich vytvářejí domény, větší skupiny elementárních buněk, které mají stejnou polarizaci. Ve feroelektrických materiálech se obvyklá velikost jedné domény pohybuje kolem stovek nanometrů. Domény jsou od sebe odděleny doménovými stěnami, ve kterých se velmi rychle mění polarizace. Doménové stěny jsou velmi tenké, jejich šířka je obvykle pouze několik mřížkových konstant (tj. několik Å). Každá doména je charakterizována konstantní hodnotou polarizace.

Po zchlazení materiálu pod Curieho teplotu v nulovém elektrickém poli je orientace vektoru polarizace v jednotlivých doménách makroskopického materiálu náhodná, takže výsledná celková polarizace materiálu je v průměru nulová. Externí elektrické pole způsobí, že pro většinu domén se jedna z polarit stane energeticky výhodnější, a v materiálu se poté vytvoří makroskopická polarizace ve směru určeném elektrickým polem. (Tagantsev et al., 2010)

## 3.2 Landauova teorie fázových přechodů

V této části budou pomocí Landauovy teorie matematicky popsány vlastnosti feroelektrických látek. Získané rovnice budou později v části 7 použity v numerickém modelu feroelektrika.

Předpokládáme materiál za vysoké teploty, ale pod teplotou tání. Materiál má krystalickou strukturu, což znamená, že se ionty/atomy uspořádají do periodické krystalové mřížky. Uzlové polohy v krystalové mřížce představují rovnovážné polohy jednotlivých atomů. Kolem této polohy atomy kmitají tepelným pohybem. Am-

plituda tepelných kmitů ovlivňuje objem elementární buňky, velikost translačních vektorů, úhly mezi translačními vektory a polohu iontů/atomů uvnitř elementární buňky, což znamená, že zásadně ovlivňuje polarizaci  $\mathbf{P}(T)$ .

Polarizace je fyzikální vektorová veličina. V níže uvedené Landauově teorii je popsána zjednodušená situace tzv. jednoosého feroelektrika. V jednoosém feroelektriku je fyzikální veličina, pomocí které je možné popsat "deformaci" krystalové mřížky, tzv. parametr fázového přechodu, skalární. V jednoosém feroelektriku se předpokládá, díky symetrii krystalové mřížky, se středový atom titanu, zobrazený na obrázku 3.2, může pohybovat pouze v jednom směru (nahoru a dolů). Parametrem fázového přechodu je tedy pouze jedna složka vektoru polarizace, a to  $P_3$ . Pro zjednodušení všech následujících vzorců se v nich tento index nepíše.

V praktické části práce (simulacích metodou konečných prvků), počítáme s dopovaným oxidem hafničitým ( $\text{HfO}_2$ ), který má strukturu perovskitu. V perovskitech je za běžného stavu parametrem fázového přechodu tříosý vektor polarizace. Protože je ale možné  $\text{HfO}_2$  nanést na kompresivní substrát, kde se díky elektrostrickému stavu krystalové mřížky s polarizací v rovině substrátu znevýhodní až zcela zakáží, můžeme ve výsledku použít přiblížení jednoosého feroelektrika.

Při změně teploty může dojít k tomu, že se současná konfigurace krystalové mřížky stane nestabilní. Následně dojde k přeuspořádání krystalické mřížky, což je ekvivalentní k spontánní změně symetrie krystalografické struktury. Tento děj, při kterém dojde k přechodu z paraelektrické fáze na feroelektrickou, se nazývá spontánní narušení symetrie.

Lev Davidovič Landau vymyslel následující termodynamickou úvahu. Předpokládáme, že termodynamický potenciál, Helmholtzova energie, závisí na teplotě  $T$  a polarizaci  $P$ :

$$H = H(T, P). \quad (3.2)$$

V okolí fázového přechodu, který nastává při  $T_0$ , můžeme  $H$  rozvinout do Taylorova rozvoje:

$$H = H_0 + A(T)P + \frac{1}{2}B(T)P^2 + \frac{1}{3}C(T)P^3 + \frac{1}{4}D(T)P^4 + \frac{1}{5}E(T)P^5 + \dots \quad (3.3)$$

Pokud na krystalové mřížce v paraelektrickém stavu (tedy nad teplotou  $T_0$ ) provedeme operaci symetrie zrcadlo a dosadíme do Taylorova rozvoje  $H$ , výsledná hodnota  $H$  musí být stejná. Pro zjednodušení určíme základní stav polarizace jako:

$$P_1 = (0, 0, P) \quad (3.4)$$

a po provedení operace zrcadlo je tedy nová polarizace:

$$P_2 = (0, 0, -P), \quad (3.5)$$

přičemž tyto polarizace musí splňovat:

$$H(T, P_1) = H(T, P_2). \quad (3.6)$$

Dosazením do Taylorova rozvoje (jen ve třetím rozměru) vznikne:

$$\begin{aligned} H_0 + A(T)P + \frac{1}{2}B(T)P^2 + \frac{1}{3}C(T)P^3 + \frac{1}{4}D(T)P^4 + \frac{1}{5}E(T)P^5 = H_0 \\ -A(T)P + \frac{1}{2}B(T)P^2 - \frac{1}{3}C(T)P^3 + \frac{1}{4}D(T)P^4 - \frac{1}{5}E(T)P^5, \end{aligned} \quad (3.7)$$

aby tato rovnice vycházela, všechny liché koeficienty ( $A, C, E, \dots$ ) se musí rovnat 0. Tím se podstatně zjednoduší Taylorův rozvoj  $H$  do tohoto tvaru:

$$H = H_0 + \frac{1}{2}\alpha(T)P^2 + \frac{1}{4}\beta(T)P^4 + \frac{1}{6}\gamma(T)P^6 \dots \quad (3.8)$$

Dále uvážíme, že pokud  $P$  je malé (v blízkosti fázového přechodu), můžeme dále rovnici zjednodušit na:

$$H = H_0 + \frac{1}{2}\alpha(T)P^2, \quad (3.9)$$

protože vyšší mocniny  $P$  můžeme zanedbat. V případě, že platí  $T > T_0$ , je vysoko-  
teplotní (paraelektrická) fáze stabilní, z čehož vyplývá, že  $\alpha(T) > 0$ . Pokud platí  
 $T < T_0$ , je paraelektrická fáze nestabilní. K popisu feroelektrické fáze potřebujeme,  
aby  $\alpha$  byla takto teplotně závislá:

$$\alpha(T) = \alpha_0(T - T_0). \quad (3.10)$$

Provedeme další Taylorův rozvoj podle teploty. Tento rozvoj se nazývá Landauova  
volná energie :

$$H(T, P) = H_0 + \frac{1}{2}\alpha_0(T - T_0)P^2 + \frac{1}{4}\beta P^4. \quad (3.11)$$

Polarizace při dané teplotě funguje jako minimum  $H$  vzhledem k  $T$ , takže musí  
platit:

$$\frac{\partial H}{\partial P} = \alpha_0(T - T_0)P + \beta P^3 = 0. \quad (3.12)$$

Po vytknutí  $P$  dostáváme rovnici:

$$P [\alpha_0(T - T_0) + \beta P^2] = 0, \quad (3.13)$$

ze které můžeme určit všechny kořeny kubické rovnice. První kořen rovnice je:

$$P = 0. \quad (3.14)$$

Druhý a třetí kořen rovnice jsou:

$$P = \pm \sqrt{\frac{\alpha_0}{\beta}(T_0 - T)}. \quad (3.15)$$

Nyní je potřeba určit, který kořen dané rovnice realizuje za dané teploty mini-  
mum termodynamického potenciálu. Provedeme tedy druhou derivaci Landauovy  
volné energie:

$$\frac{\partial^2 H}{\partial P^2} = \alpha_0(T - T_0) + 3\beta P^2 > 0. \quad (3.16)$$



Po dosazení  $P = 0$  dostáváme:

$$\alpha_0(T - T_0) > 0, \quad (3.17)$$

z čehož vyplývá, že  $T > T_0$ , a jde tedy o paraelektrickou fázi, ve které je polarizace nulová. V druhém případě dosadíme  $P = \pm \sqrt{\alpha_0(T_0 - T)/\beta}$  a vychází:

$$\alpha_0(T - T_0) + 3\beta \frac{\alpha_0}{\beta} (T_0 - T) > 0 \quad (3.18)$$

$$2\alpha_0(T_0 - T) > 0, \quad (3.19)$$

z čehož vyplývá, že  $T < T_0$ , a jde tedy o feroelektrickou část, ve které je polarizace nenulová. Za těchto teplot má krystalová mříž ve feroelektrickém materiálu dvě lokálně stabilní konfigurace, které mají polarizaci  $+P_0$  a  $-P_0$  (Tagantsev et al., 2010)

### 3.2.1 Vliv elektrického pole na vlastnosti feroelektrik

Landauova volná energie popisuje nestabilitu krystalové mříže v okolí fázového přechodu, ale jako každý termodynamický potenciál platí pouze za určitých okrajových podmínek. Tyto podmínky jsou buď nekonečný krystal nebo, pokud má krystal tvar destičky a nulové vnější elektrické pole.

Pokud se vnější elektrické pole nerovná nule, je nutné přejít k jinému termodynamickému potenciálu. Máme následující systém: na feroelektrickou destičku je z obou stran připevněna elektroda, která je spojena s nekonečným zdrojem elektrických volných nábojů (vnější zdroj napětí). Na elektrody se z vnějších zdrojů napětí přesunou volné náboje, které jsou zdrojem vnějšího elektrického pole mezi elektrodami destičky. Nekonečné rezervoáry volných nábojů zajišťují konstantní napětí na elektrodách, a to zajišťuje konstantní elektrické pole ve feroelektriku. Termodynamický potenciál, který popisuje tento systém, je Gibbsova energie:

$$G = \int_V \left[ H(T, P) + \frac{1}{2} \epsilon_0 \epsilon_b E^2 \right] dV - \sum_i \phi_i q_i, \quad (3.20)$$

kde  $\epsilon_0$  je permitivita vakua,  $\epsilon_b$  je vlastní permitivita materiálu, která se neúčastní feroelektrického fázového přechodu,  $E$  je vnější elektrické pole,  $\phi_i$  je potenciál  $i$ -té elektrody a  $q_i$  jsou volné náboje na  $i$ -té elektrodě. Gibbsovu energii je možné převést do tvaru:

$$G = \int_V \left[ H_0 + \frac{1}{2} \alpha P^2 + \frac{1}{4} \beta P^4 - \frac{1}{2} \epsilon_0 \epsilon_b E^2 - EP \right] dV, \quad (3.21)$$

kde  $E$  je celkové lokální elektrické pole (součet vnějšího a depolarizačního pole). Ve zjednodušeném případě, ve kterém jde o destičku s rovnoběžnými rovinnými elektrodami,  $P$  a  $E$  jsou homogenní v celé destičce a  $E$  je vnější pole, tedy že se v destičce nevyskytuje vnitřní depolarizační pole, platí předchozí rovnice lokálně:

$$G = H_0 + \frac{1}{2} \alpha P^2 + \frac{1}{4} \beta P^4 - \frac{1}{2} \epsilon_0 \epsilon_b E^2 - EP. \quad (3.22)$$

Důsledkem Gibbsovy energie je fakt, že při nenulovém vnějším elektrickém poli dochází k rozšiřování domén, které mají polarizaci orientovanou ve směru vnějšího pole na úkor jinak orientovaných domén, neboť tím dojde ke snížení hodnoty tohoto termodynamického potenciálu. Toto rozšiřování ale může být zablokováno vadami v materiálu, hranicemi zrn a dalšími situacemi, které blokují nebo omezují pohyb doménových stěn.

V případě, že velikost vnějšího elektrického pole dosáhne kritické hodnoty, kterou nazýváme koercitivní pole, přestane být jeden stav polarizace stabilní a dojde k nutnému přechodu do druhého stabilního stavu s odlišnou polarizací. Důvodem nestability je to, že v daném stavu již krystalová mříž nebude mít minimum energie. Derivace Gibbsovy energie podle polarizace je:

$$\frac{\partial G}{\partial P} = \alpha P + \beta P^3 - E = 0, \quad (3.23)$$

právě v místech, kde je polarizace stabilní, tedy v energetických minimech. V této situaci je polarizace implicitně zadanou funkcí elektrického pole:

$$P = P(E), \quad (3.24)$$

což se dá napsat jako:

$$\alpha P(E) + \beta P^3(E) - E = 0. \quad (3.25)$$

Permitivita je definovaná jako:

$$\chi = \frac{\partial P(E)}{\partial E} \quad (3.26)$$

a podle aproximace tvrdého feroelektrika (hard ferroelectric approximation) platí:

$$P = P(0) + \frac{\partial P}{\partial E} E = P(0) + \chi E, \quad (3.27)$$

kde  $P(0)$  získáme z rovnice (3.16), protože  $E$  je nulové.  $P(0)$  tedy nabývá hodnot:

$$P(0) = 0 \quad (3.28)$$

pro teploty nad Curieho teplotou a:

$$P(0) = \sqrt{-\frac{\alpha}{\beta}} \quad (3.29)$$

pro teploty pod Curieho teplotou, tedy ve feroelektrické fázi.

Pro výpočet permitivity zderivujeme rovnici (3.25) podle elektrického pole  $E$  a získáme:

$$\alpha \frac{\partial P}{\partial E}(E) + 3\beta P^2(E) \frac{\partial P}{\partial E} - 1 = 0, \quad (3.30)$$

což dále upravíme na:

$$\frac{\partial P}{\partial E}(E)[\alpha + 3\beta P^2(E)] = 1 \quad (3.31)$$

a nakonec získáme:

$$\frac{\partial P}{\partial E}(E) = \frac{1}{\alpha + 3\beta P^2(E)}. \quad (3.32)$$

Nyní máme vzorec pro výpočet permitivity ve feroelektriku. K jeho ověření se používá stav, kdy se vnější elektrické pole  $E$  blíží 0. Tedy:

$$\chi = \frac{\partial P}{\partial E}(0) = \frac{1}{\alpha + 3\beta P^2(0)} \quad (3.33)$$

z čehož po dosazení  $P(0) = \sqrt{-\alpha/\beta}$  vychází:

$$\chi = -\frac{1}{2\alpha(T)} \quad (3.34)$$

pro  $T < T_0$  a po dosazení  $P(0) = 0$  získáme:

$$\chi = \frac{1}{\alpha(T)} \quad (3.35)$$

pro  $T > T_0$ . Elektrická permitivita (susceptibilita) feroelektrik se často uvádí ve tvaru:

$$\chi = \frac{1}{2\alpha} = \frac{C}{2(T_0 - T)} \quad (3.36)$$

pro  $T < T_0$  a:

$$\chi = \frac{1}{\alpha(T)} = \frac{C}{T - T_0} = \frac{1}{\alpha_0(T - T_0)}, \quad (3.37)$$

kde  $C$  je Curie-Weissova konstanta. (Tagantsev et al., 2010)

### 3.2.2 Ginzburgův člen a existence domén

Ve feroelektrické fázi může krystalická mřížka existovat ve dvou stavech, které se liší vektorem spontánní polarizace. Podle Landauovy teorie by mělo docházet k tomu, že ve feroelektriku vznikne jedna doména, tedy, že v celém objemu bude mít vektor spontánní polarizace stejný směr. To se reálně neděje, místo toho vznikají domény o šířce  $w$ , které mají polarizaci s opačným směrem. Důvodem je, že když se materiál přibližuje ke Curieho teplotě, stává se krystalická mřížka velice měkkou a dochází k rozporu mezi teoretickou předpovědí hodnot měrného tepla z Landauovy teorie a skutečně naměřenými hodnotami. Experimentální data naznačují, že důvodem k tomuto rozporu je větší počet stupňů volnosti v systému, než který předpokládá Landauova teorie. Vitalij Ginzburg, nositel Nobelovy ceny z roku 2003, tento rozpor vyřešil započítáním tepelné kapacity fluktuací parametrů přechodu. Termodynamicky se fluktuace parametru přechodu zohlední zahrnutím tzv. gradientních členů:

$$G_G = \frac{1}{2}G_{44} \left[ \left( \frac{\partial P}{\partial x} \right)^2 + \left( \frac{\partial P}{\partial y} \right)^2 \right] + \frac{1}{2}G_{33} \left( \frac{\partial P}{\partial x} \right)^2. \quad (3.38)$$

Obecně tvoří koeficienty  $G_{ijkl}$  složky tenzoru čtvrtého řádu. V této práci předpokládáme velmi zjednodušenou situaci jednoosého feroelektrika. V tomto systému má smysl předpokládat pouze následující nenulové koeficienty  $G_{3131}$  a  $G_{3333}$ . V této práci bude pro zjednodušení zápisu používána Voightova konvence:  $G_{3131} = G_{44}$  a  $G_{3333} = G_{33}$ . Doplněním Ginzburgova členu do Gibbsovy energie se dá popsat reálné chování feroelektrik za určitých zjednodušujících podmínek. Výsledná Gibbsova energie vypadá takto:

$$G_{LGD} = H_0 + \frac{1}{2}\alpha(T)P^2 + \frac{1}{4}\beta P^4 - EP + \frac{1}{2}G_{44} \left[ \left( \frac{\partial P}{\partial x} \right)^2 + \left( \frac{\partial P}{\partial y} \right)^2 \right] + \frac{1}{2}G_{33} \left( \frac{\partial P}{\partial x} \right)^2, \quad (3.39)$$

kde  $G_{LGD}$  je Gibbsova energie podle Landau-Ginzburg-Devonshire teorie. Výsledkem je tedy termodynamický model feroelektrika, který je použitelný i pro modelování systémů obsahujících feroelektrické domény. (Tagantsev et al., 2010)

## 4 Analytický model unipolárního tranzistoru s feroelektrickou vrstvou

### 4.1 Záporná kapacita

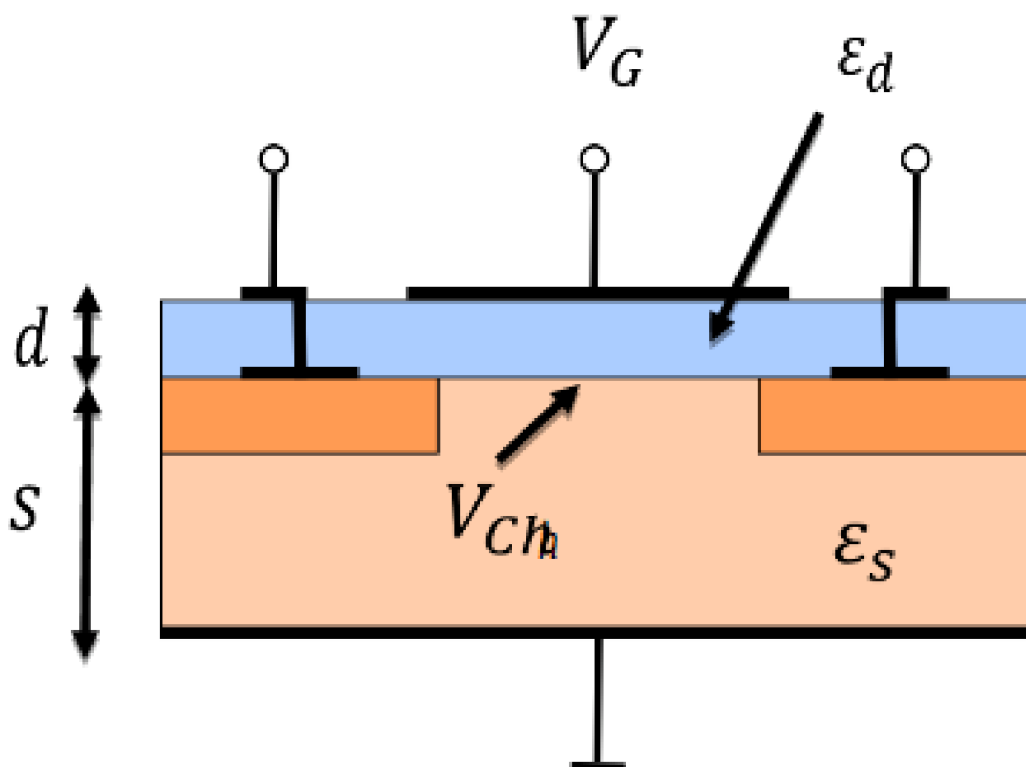
V této části je popsána záporná kapacita a termodynamické vysvětlení možnosti její existence. Kapacita je schopnost uchovávat elektrický náboj a je definována jako podíl náboje na elektrodách kondenzátoru ku elektrickému napětí na elektrodách. Negativní kapacita znamená, že při snížení elektrického napětí dojde ke zvýšení elektrického náboje a obráceně.

Z elektrostatického hlediska není existence záporné hodnoty kapacity samotné dielektrické vrstvy termodynamicky vyloučena, i když naprostá většina elektrostatických systémů, které nás v běžném životě obklopují, nabývá kladných hodnot kapacity. Pokud připustíme, že jsme schopni systém se zápornou kapacitou vytvořit, je možné s jeho pomocí vytvořit elektrostatické systémy s neobvyklými vlastnostmi. Příkladem je sériové spojení dvou kondenzátorů s kladnou a zápornou kapacitou. Pokud jednu elektrodu tohoto systému uzemníme a na druhou elektrodu přivedeme elektrostatický potenciál  $V_g$ , potom elektrostatický potenciál na společném rozhraní  $V_{ch}$  může být v absolutní hodnotě větší než přivedené napětí, tj.  $|V_{ch}| > |V_g|$ . Ačkoli tato situace odporuje zdravému rozumu, termodynamicky je přípustná. V tomto případě dochází k tomu, že náboje na společném rozhraní obou vrstev mají vyšší elektrostatickou potenciální energii, než je potenciální energie nábojů dodaná z vnějších elektrických zdrojů. Důvodem je, že tato potenciální energie je převedena na úkor potenciální energie nestabilní krystalové mříže dielektrické vrstvy se zápornou kapacitou.

Díky tomuto jevu je možné dodávat do tranzistoru menší napětí, a tedy snížit energetickou spotřebu tranzistoru, a tím i celého zařízení. Dalším kladným efektem je skutečnost, že při menší spotřebě prochází tranzistorem méně energie, a díky tomu se generuje méně tepla. Menší generace tepla buď opět sníží spotřebu, protože bude potřeba méně chlazení, nebo umožní rychlejší přepínání tranzistoru.

#### 4.1.1 Analytický model MOSFETu jako soustavy dvou kondenzátorů

V této části je popsán jednoduchý analytický model MOSFETu jako systém dvou kondenzátorů a jsou zde popsány podmínky pro stabilitu takového systému v pří-



Obrázek 4.1: Zjednodušené schéma MOSFETu. (Zdroj: Autor)

padě, že jeden z kondenzátorů má zápornou kapacitu.

Na obrázku 4.1 je zobrazeno zjednodušené schéma MOSFETu, které je zaměřené na vlastnosti související s kapacitou.  $V_g$  je napětí přivedené na elektrodu hradla,  $V_{ch}$  je napětí vzniklé na kanálu,  $\epsilon_d$  je permitivita dielektrika,  $\epsilon_s$  je permitivita křemíku,  $d$  je tloušťka dielektrika a  $s$  je tloušťka polovodičové vrstvy.

Schéma je možné dále zjednodušit na ekvivalentní elektrický obvod kondenzátoru, na obrázku 4.2, kde  $C_d$  je kapacita dielektrické vrstvy,  $C_s$  je kapacita křemíkové vrstvy a  $C_g$  je celková kapacita systému.

Pro celkovou kapacitu systému platí následující vztah:

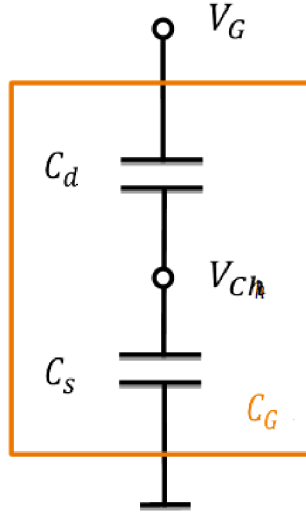
$$\frac{1}{C_g} = \frac{1}{C_s} + \frac{1}{C_d} \quad (4.1)$$

a jednotlivé kapacity lze vyjádřit pomocí:

$$C_g = \frac{Q_g}{V_g} \quad , \quad C_s = \frac{Q_g}{V_{ch}} \quad , \quad C_d = \frac{Q_g}{V_g - V_{ch}}, \quad (4.2)$$

kde  $Q_g$  je elektrický náboj na hradle. Z předchozích rovnic lze napsat tuto rovnici:

$$V_{ch} = \frac{C_d}{C_d + C_s} V_g, \quad (4.3)$$



Obrázek 4.2: Ekvivalentní elektrický obvod struktury MOSFETu jako kondenzátor. (Zdroj: Autor)

kteřá vyjadřuje napětí na kanále, a kterou je možné dále upravit na:

$$V_{ch} = \frac{\epsilon_d s}{\epsilon_d s + \epsilon_s d} V_g \quad (4.4)$$

a z této rovnice je možné vyjádřit zesílení kondenzátoru, tedy poměr mezi napětím na kanále a na hradle:

$$\frac{V_{ch}}{V_g} = \frac{\epsilon_d / \epsilon_s}{\epsilon_d / \epsilon_s + d / s}. \quad (4.5)$$

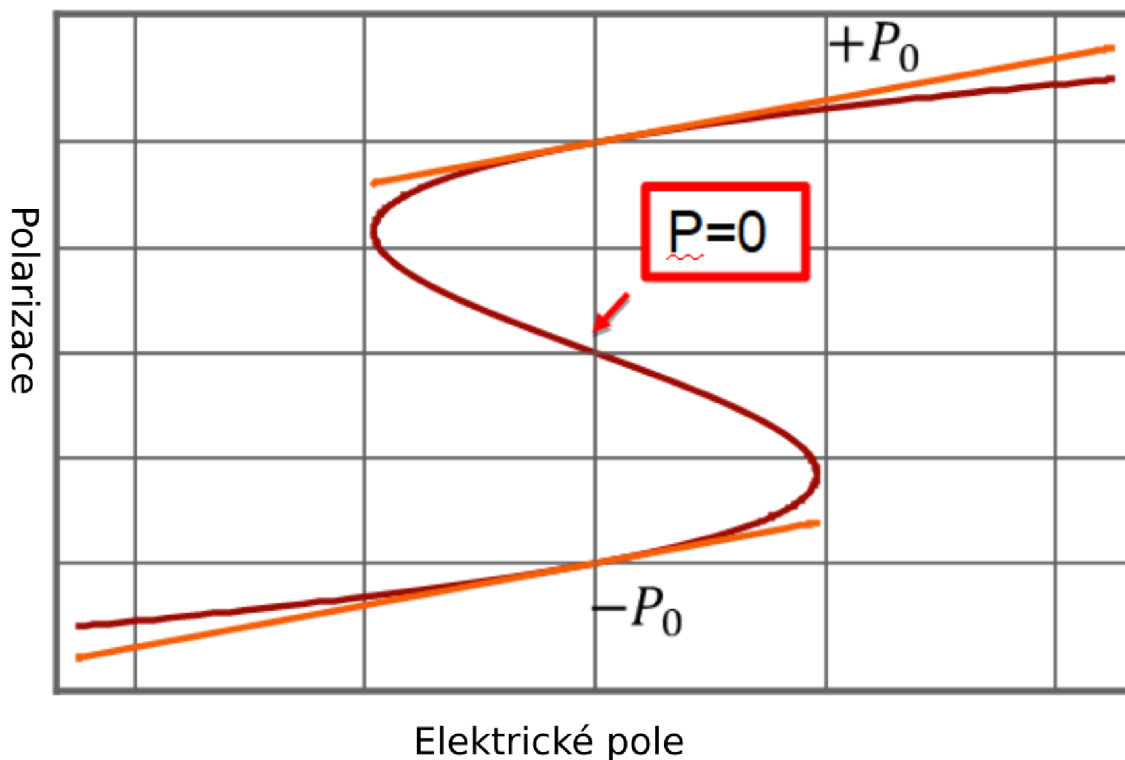
Negativní permitivita dielektrické vrstvy způsobuje při určitých hodnotách tloušťek  $s$  a  $d$  zesílení napětí na kanále v polovodiči.

V předchozí části práce bylo detailně popsáno chování feroelektrika, a to pro tuto chvíli zásadní existence dvou hodnot spontánní polarizace pod Curieho teplotou. Na obrázku 4.3 je zobrazena závislost polarizace na elektrickém poli. Křivka  $P(E)$  představuje množinu stacionárních bodů (bodů, pro které platí  $\partial G(P, E) / \partial P = 0$  pro všechny hodnoty  $E$ ). Tyto stacionární body jsou buď minima nebo maxima. Rozhoduje znaménko  $\partial^2 G(P, E) / \partial P^2$ . Pokud je  $\partial^2 G(P, E) / \partial P^2 > 0$ , jedná se o minimum. Pokud je  $\partial^2 G(P, E) / \partial P^2 < 0$ , jedná se o maximum. Křivku  $P(E)$  lze rozdělit na tři segmenty. Ve dvou segmentech, pro které platí  $P(E) > P_1$  a  $P(E) < P_2$ , nabývá funkce  $G(P, E)$  lokálních minim. Pro třetí segment  $P_1 > P(E) > P_2$ , nabývá funkce  $G(P, E)$  lokálních maxim. Funkce  $P(E)$  má v prostředním segmentu zápornou první derivaci, tj.  $\partial P(E) / \partial E = \chi < 0$  a může tedy sloužit jako záporná kapacita. Platí pro ni:

$$\epsilon_f = -\frac{\alpha}{T_c - T}. \quad (4.6)$$

V následujícím textu bude analyzována situace feroelektricko-dielektrického sendviče, tj. dvojrstva feroelektrika a dielektrika. Budou stanoveny podmínky, za kterých





Obrázek 4.3: Křivka závislosti polarizace na elektrickém poli ve feroelektriku. (Zdroj: Autor)

budou stacionární body tvořit segment, který bude splňovat podmínky: 1) v těchto stacionárních bodech bude funkce  $G(P(E), E)$  nabývat minima a 2) derivace  $\partial P(E)/\partial E = \chi < 0$ , tedy na segmentu bude záporná permitivita.

Tato struktura již byla popsána v předchozí kapitole, ale nyní tuto situaci popíšeme z hlediska kondenzátoru a kapacity. Na obrázku 4.4 je model MOSFETu s feroelektrickou vrstvou, kde  $\epsilon_b$  je vlastní permitivita feroelektrika,  $\epsilon_s$  je permitivita polovodiče,  $P$  je polarizace feroelektrika,  $E_f$  je elektrické pole ve feroelektriku,  $E_s$  je elektrické pole v polovodiči,  $d$  je tloušťka feroelektrika,  $s$  je tloušťka polovodiče,  $V_g$  je napětí na hradle a  $V_{ch}$  je napětí na kanále transistoru.

Za této situace platí podmínka spojitosti elektrostatického potenciálu:

$$sE_s + dE_f = V_g, \quad (4.7)$$

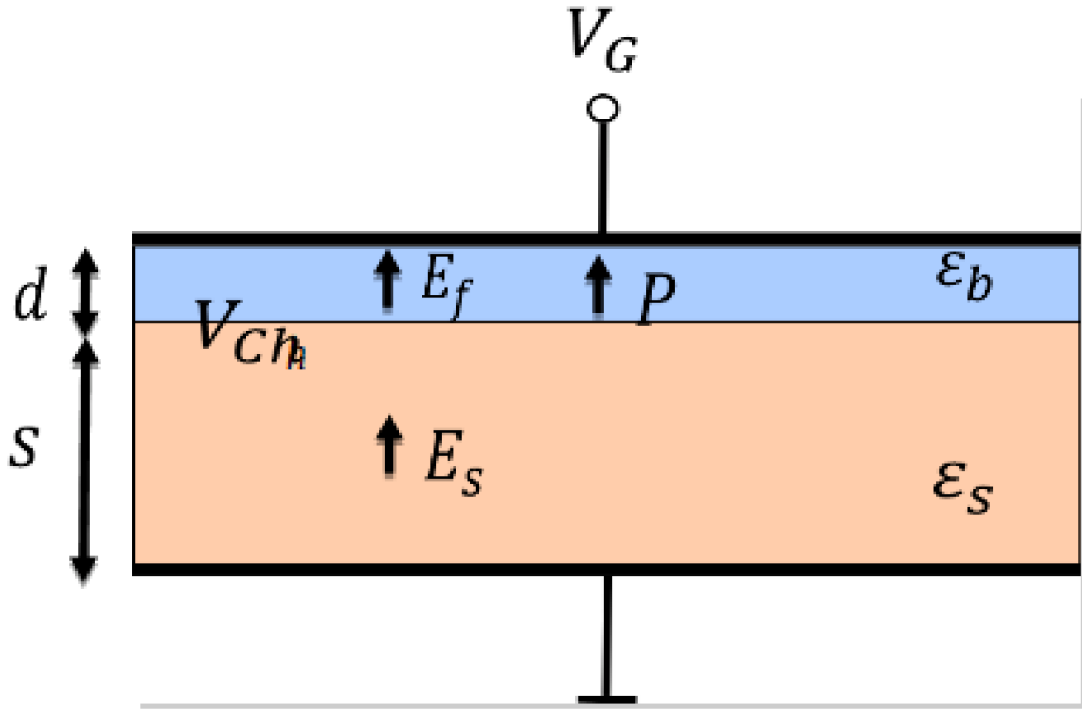
a podmínka spojitosti normálové složky vektoru elektrické indukce  $D$  na rozhraní dielektrika a feroelektrika (na kanálu):

$$\epsilon_0\epsilon_s E_s = \epsilon_0\epsilon_b E_f + P = \frac{Q_E}{A}, \quad (4.8)$$

protože na hranici mezi feroelektrikem a dielektrikem se elektrická pole z obou stran samozřejmě musí rovnat. Další veličiny je možné vyjádřit pomocí těchto rovnic:

$$E_s = \frac{P - C_b V_g}{s(C_b + C_s)}, \quad (4.9)$$





Obrázek 4.4: Zjednodušený model MOSFETu s feroelektrickou vrstvou. (Zdroj: Autor)

$$E_f = -\frac{P + C_d V_g}{d(C_b + C_s)}, \quad (4.10)$$

$$V_{ch} = s E_s = \frac{P - C_b V_g}{C_b + C_s}, \quad (4.11)$$

kde s pomocí již zmiňované aproximace tvrdého feroelektrika dle rovnice (3.27) můžeme napsat, že:

$$C_b = \epsilon_0 \epsilon_b A / d, \quad (4.12)$$

$$C_s = \epsilon_0 \epsilon_s A / s, \quad (4.13)$$

$$C_f = \epsilon_0 \epsilon_f A / d, \quad (4.14)$$

přičemž  $A$  je plocha elektrody,  $C_b$  je vlastní kapacita feroelektrika bez doménových vlastností a polarizace a  $C_f$  je celková kapacita feroelektrika. Všechny předchozí rovnice lze nyní použít k vytvoření Gibbsovy volné energie v systému. Jde o ekvivalent rovnice (3.22):

$$G(E, T, P) = \int_V \left[ H(P, T) + \frac{1}{2} \epsilon_0 \epsilon_b E^2 \right] dV - V_g Q_E, \quad (4.15)$$

kde  $Q_E$  je náboj elektronů na elektrodě. Tuto rovnici je možné dále upravit do tvaru:

$$G(E, T, P) = \frac{1}{2} \left( \frac{1}{C_b + C_s} - \frac{1}{2C_f} \right) P^2 + \frac{1}{8C_f P_0^2} P^4, \quad (4.16)$$

ze kterého lze vytáhnout dvě různá řešení pro polarizaci  $P$  za různých předpokladů. Pokud je  $C_b + C_s > 2C_f$ , získáme řešení:

$$P = P_0 \sqrt{2 - \frac{4C_f}{C_b + C_s}}, \quad (4.17)$$

které se chová normálně a odpovídá křivkám  $-P_0$  a  $+P_0$  na obrázku 4.3. Pokud ovšem platí, že  $C_b + C_s < 2C_f$ , obdržíme řešení ve tvaru:

$$P = 0. \quad (4.18)$$

Za těchto podmínek tvoří stacionární body, ve kterých má funkce  $G(P(E), E)$  minimum, segment, ve kterém je  $\partial P(E)/\partial E < 0$ , a je popsáno křivkou  $P = 0$  na obrázku 4.3. Pokud tyto podmínky splněny nejsou, nastanou minima v krajních segmentech, a ve feroelektrické vrstvě nad kanálem se vytvoří domény. V tomto stavu je  $\partial P(E)/\partial E > 0$ . Znamená to, že abychom přinutíme feroelektrický materiál chovat se jako záporná kapacita, je nutné v něm vyvolat pod Curieho teplotou energeticky nevýhodný stav s nulovou polarizací.

Konkrétní metody, jak pomocí feroelektrického materiálu vytvořit negativní kapacitu, zahrnují feroelektricko-dielektrické super-mřížky, ve kterých se střídají vrstvy z feroelektrického a dielektrického materiálu, aby vytvořily jednu krystalickou mřížku. Další metodou je využití antiparalelních doménových struktur specifickým způsobem. Metoda, která je důležitá pro tuto práci, je využití nanodoménového zárodku.

Zásadní podmínkou pro libovolný systém s kapacitou je kladná celková kapacita. Pokud tato podmínka není splněna, není možné systém reálně vytvořit. V druhé části této práce se simuluje transistor se zápornými permitivitami za mnoha různých podmínek. Podle analytického modelu popsaného v této části je při všech těchto simulacích celková kapacita systému záporná, což by neměla být stabilní situace. Je pravděpodobné, že je to způsobené odlišností reálného MOSFETu od výše popsaného jednoduchého analytického modelu. V MOSFETu jsou totiž různě dopované oblasti, velké množství volných nosičů náboje (elektrony a díry) v různých koncentracích a několik PN přechodů. Na grafech na obrázcích 6.23 a 6.31a jsou zobrazeny rozdíly mezi výsledky předpovězenými z výše popsaného modelu a výsledky ze simulace. Simulované systémy tedy mohou mít celkovou kapacitu systému kladnou, přestože podle rovnic vychází celková kapacita systému záporná. (Luk'yanchuk et al., 2019; Sluka et al., 2017; Yadav et al., 2019; Zubko et al., 2016)

### 4.1.2 Nanodoménový zárodek

Feroelektrické materiály mají tendenci se rozdělovat na domény takovým způsobem, aby jejich celková energie byla co nejmenší. Problémem je, že stav, ve kterém má feroelektrikum zápornou kapacitu, není stav energeticky nejvýhodnější a dochází k jeho rozpadu na pro materiál výhodnější domény. Metoda nanodoménového zárodku tento problém řeší tak, že prostě nedá feroelektriku dostatek prostoru k rozpadu na domény. V případě, že je feroelektrická vrstva dostatečně tenká, dojde ke stavu,

ve kterém se v materiálu vytvoří nanodoménový zárodek, který má tendenci buď růst přes celou tloušťku ferroelektrika nebo se anihilovat v závislosti na elektrickém napětí na stěnách. Tato vytvořená nestabilita vytváří negativní kapacitu. (Sluka et al., 2017)

## 5 Numerický model unipolárního tranzistoru s feroelektrickou vrstvou

### 5.1 Parciální diferenciální rovnice

#### 5.1.1 Základní informace

V této části jsou popsány základy parciálních diferenciálních rovnic a stručně popsány numerické metody, kterými se takové rovnice řeší.

Parciální diferenciální rovnice (PDR) je rovnice, která obsahuje dvě a více nezávislých proměnných, neznámou funkci a parciální derivace neznámé funkce na daných nezávislých proměnných. Řešením takové rovnice je myšleno nalezení neznámé funkce, která řeší danou rovnici. Řádem PDR je nejvyšší řád parciální derivace, kterou obsahuje. Obecná PDR má tento tvar:

$$F(x_1, \dots, x_n, u, \frac{\partial}{\partial x_1}u, \dots, \frac{\partial}{\partial x_n}u, \frac{\partial^2}{\partial x_1^2}u, \frac{\partial^2}{\partial x_1 \partial x_2}u, \dots, \frac{\partial^2}{\partial x_n^2}u, \dots, \frac{\partial^k}{\partial x_1^k}u, \frac{\partial^k}{\partial x_1^{k-1} \partial x_2}u, \dots, \frac{\partial^k}{\partial x_n^k}u) = 0, \quad (5.1)$$

kde  $u(x_1, x_2, \dots, x_n)$  je neznámá funkce  $n$  proměnných a  $k$  je nejvyšší derivace. PDR slouží k popisu všemožných fyzikálních dějů od přesunu tepla, zvuku, mechaniky tekutin až po obecnou relativitu a kvantovou mechaniku. Bohužel je většinou nemožné vytvořit explicitní řešení, a tak je nutné používat numerické metody k získání konkrétních numerických řešení.

K tomuto se používá mnoho různých metod, mezi které patří metoda konečných prvků (MKP), metoda konečných objemů (MKO) a metoda konečných diferencí (MKD). Dále se tato práce bude zabývat pouze metodou konečných prvků. (MÍKA, 1983)

#### 5.1.2 Počáteční a okrajové podmínky pro soustavu PDR

Parciální diferenciální rovnice, které se týkají fyzikálních dějů, se ve většině případů řeší na omezené oblasti. Pro řešení takového problému je tedy nutné znát a také do řešených rovnic zavést podmínky na hranici oblasti. V případě, že se PDR v čase vyvíjí, je nutné znát ještě stav na začátku děje, tedy počáteční stav. Rovnice, které nezávisí na čase, se nazývají stacionární, ty které na čase naopak závisejí, se

nazývají evoluční nebo též nestacionární.

Okrajové podmínky můžeme rozdělit na několik typů. Prvním typem je Dirichletova podmínka, která určuje přímo hledanou funkci, tedy  $y = u$ , kde  $u$  je neznámá funkce a  $y$  je její hodnota. Druhým typem je Neumannova podmínka, která popisuje normálovou derivaci hledané funkce, tedy  $\partial y / \partial n = u$ . Dále existuje kombinovaná podmínka, též zvaná Robinova, která obsahuje jak hodnotu funkce, tak její normálovou derivaci, tedy  $c_1(\partial y / \partial n) + c_2 y = u$ , kde  $c_1$  a  $c_2$  jsou konstanty. (MÍKA, 1983)

### 5.1.3 Slabá formulace PDR

Parciální diferenciální rovnice, které se používají pro fyzikální simulace, jsou odvozeny z fyzikálních zákonů, často ze zákonů zachování hmoty, energie a hybnosti. Tyto zákony lze formulovat jako integrální rovnice přes libovolnou oblast. Objemové integrály popisují vnitřek oblasti a povrchové integrály popisují interakci s okolím. Mezi objemovým a povrchovým integrálem lze přecházet pomocí Gaussovy věty za předpokladu, že jsou dané funkce dostatečně hladké. Tímto postupem získáváme použitelnou PDR.

Problém nastává v případě, kdy funkce nejsou dostatečně hladké, například kvůli vlastnostem materiálů nebo rozhraní mezi jednotlivými materiály. Poté je výsledná PDR příliš omezující, takže neumožňuje všechna možná reálná fyzikální řešení. Řešením je použití slabé formulace, která částečně vrátí zpátky integrální tvar, a tak umožňuje výpočet všech fyzikálně možných řešení.

Formálně lze silné řešení obecně zapsat takto: najdi  $u$  definovanou na  $\Omega$ , které splňuje:

$$R(u) = f \quad (5.2)$$

na každém bodě  $\Omega$ , kde  $R$  je diferenciální operátor,  $f$  je funkce,  $\Omega$  je oblast a  $u$  je hledané řešení.

Slabé řešení lze obecně zapsat tímto způsobem: najdi  $u$  definované na  $\Omega$ , které splňuje:

$$\int_{\Omega} R(u)v = \int_{\Omega} f v \quad (5.3)$$

pro každou funkci  $v$  definovanou na  $\Omega$ .

Přeměna silné formulace na slabou se provede tak, že ji vynásobíme libovolnou funkcí  $v$ , která se nazývá testovací, a následně provedeme integraci přes oblast  $\Omega$ . (Schieche, 2014) (MÍKA, 1983)

### 5.1.4 Metoda konečných prvků

Metoda konečných prvků slouží k získávání numerických řešení parciálních diferenciálních rovnic. Základní myšlenka spočívá v rozdělení oblasti, ve které hledáme řešení, na velké množství malých oblastí se specifickými tvary. Protože jsou tyto oblasti malé, konečné a je jich spočetně mnoho, nazýváme je konečnými prvky. Tohoto

rozdělení je docíleno zesíťováním (mesh) oblasti, tedy jejím převedením na jednoduché geometrické tvary, jako jsou trojúhelníky a čtverce ve dvou dimenzích anebo čtyřstěny a kvádry ve třech dimenzích.

Tyto prvky mají buď společnou stěnu, hranu, vrchol, nebo spolu vůbec nesousedí. Použitím vhodných testovacích funkcí se problém na každém konečném prvku dá převést na algebraickou rovnici, jejíž řešení ovlivňují pouze sousedící konečné prvky. Výsledkem je soustava algebraických rovnic, která popisuje interakci každého konečného prvku se všemi ostatními.

Výhodou tohoto postupu je, že po převedení této soustavy do maticového tvaru je výsledná matice řídká, protože naprostá většina konečných prvků spolu vůbec neinteraguje. Po vyřešení dané matice získáváme přibližné numerické řešení původní PDR. (MÍKA, 1983)

### 5.1.5 Newtonova metoda pro řešení nelineárních PDR

Newtonova metoda, též nazývaná Newton-Raphsonova metoda nebo metoda tečen je iterační numerická metoda sloužící k hledání kořenů rovnic, tedy řešení rovnic ve tvaru:

$$f(x) = 0. \quad (5.4)$$

Metoda tečen je příhodné označení, protože řešení se hledá ve směru tečny funkce  $f(x)$ . Funguje takto: Začneme v bodě  $x_0$ , který odhadneme, a spočítáme jeho hodnotu  $f(x_0) = y$ . Nyní spočítáme derivaci funkce  $f(x)$  v bodě  $x_0$  a tím získáme přímkou. V bodě, kde tato přímka protne osu  $x$ , získáváme nový odhad řešení a proces opakujeme, dokud nejsme dostatečně blízko nule. Postup je naznačen na obrázku 5.1. Výpočet derivace je tedy:

$$df(x_n) = \frac{f(x_n) - 0}{x_n - x_{n+1}} \quad (5.5)$$

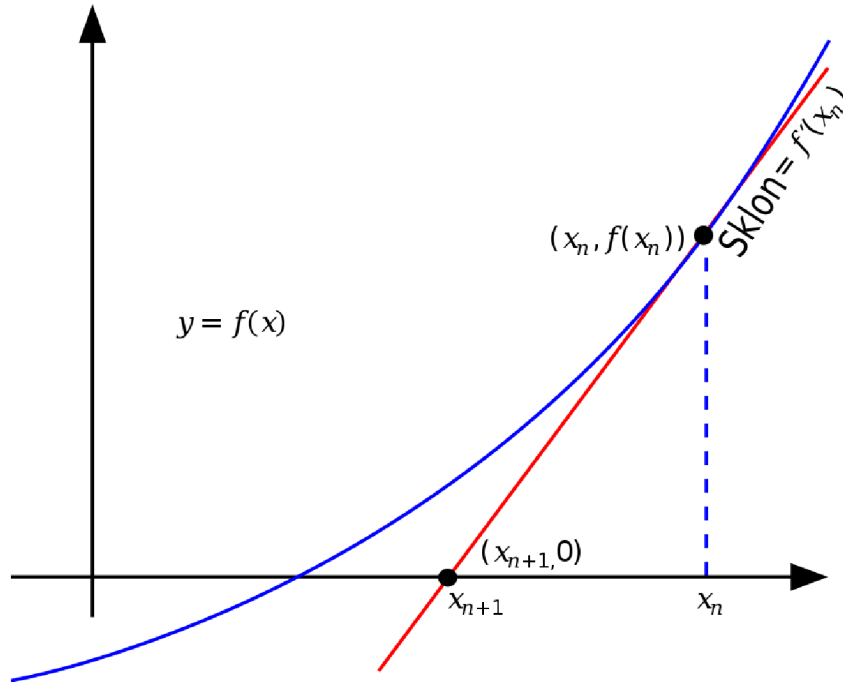
a pro nalezení dalšího průsečíku s osou  $x$  převedeme na:

$$x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{df(x_n)}. \quad (5.6)$$

Toto je algoritmus, který je schopný z počátečního odhadnutého bodu dojít k hledanému řešení. Velkou výhodou Newtonovy metody je, že velice rychle konverguje, pokud je v dostatečné blízkosti řešení, a to kvadraticky. V případě, že neznáme analytickou derivaci funkce  $f(x)$  použijeme její numerickou aproximaci a převedeme algoritmus na následující vztah, který se také nazývá metoda sečen:

$$x_{n+1} = x_n - f(x_n) \frac{x_n - x_{n-1}}{f(x_n) - f(x_{n-1})}. \quad (5.7)$$

Pro řešení parciálních diferenciálních rovnic pomocí MKP se tato metoda používá ve chvíli, kdy po provedení diskretizace získáváme soustavu algebraických nelineárních rovnic. Tuto soustavu nelineárních algebraických rovnic řešíme iteračně Newtonovou metodou.



Obrázek 5.1: Ukázka kroku Newtonovy metody. (Zdroj: Převzato a upraveno z (*Newton iteration*, [b.r.]

Použití Newtonovy metody na nelineární problém pro MKP je obecně popsáno takto:

Máme tento obecný nelineární problém:

$$-\nabla \cdot (a(u)\nabla u) = f(u). \quad (5.8)$$

Slabá formulace tohoto problému je:

$$(a(u)\nabla u, \nabla v) = (f(u), v). \quad (5.9)$$

Nyní na tento problém chceme použít Newtonovu metodu. Substituuje:

$$u = u^0 + \delta, \quad (5.10)$$

kde  $u^0$  je výchozí řešení a  $\delta$  je korekce, kterou chceme spočítat. Dosadíme do problému:

$$(a(u^0 + \delta)\nabla(u^0 + \delta), \nabla v) = (f(u^0 + \delta), v), \quad (5.11)$$

a následně:

$$((a(u^0) + a'_u(u^0)\delta)\nabla(u^0 + \delta), \nabla v) = (f(u^0) + f'_u(u^0)\delta, v). \quad (5.12)$$

Tím získáváme:

$$(a(u^0)\nabla\delta + a'_u(u^0)\delta\nabla u^0, \nabla v) = (f(u^0) + f'_u(u^0)\delta, v) - (a(u^0)\nabla u^0, \nabla v), \quad (5.13)$$



při zanedbání  $(a'_u(u^0)\delta\nabla\delta, \nabla v)$ , protože  $\delta^2$  je velice malé číslo. Následně můžeme tuto rovnici přepsat na lineární problém pro  $\delta$ :

$$(a(u^0)\nabla\delta + a'_u(u^0)\delta\nabla u^0, \nabla v) - (f'_u(u^0)\delta, v) = (f(u^0), v) - (a(u^0)\nabla u^0, \nabla v). \quad (5.14)$$

Pomocí Newtonovy metody jsou řešeny veškeré numerické simulace v této práci. (MÍKA, 1983)

## 5.2 Rovnice popisující MOSFET

V této části jsou popsány rovnice, které jsou použity v numerickém modelu MOSFETu.

K popisu fyziky transistorů je možné použít rovnice řídicí drift-difuzi elektronů a děr. Jde o aproximaci. Pro získání přesného fyzikálního řešení by bylo nutné použít Schrödingerovu rovnici pro mnoho objektů, a to není možné. Zásadním zjednodušením je, pokud uvažujeme pouze pohyb elektronů přes statickou krystalickou mřížku.

### 5.2.1 Drift-difuzní rovnice

Základní rovnice pro popis chování transistoru jsou Poissonova rovnice pro elektrický potenciál:

$$\nabla \cdot (-\varepsilon_r \nabla V) = q(p - n + N_d - N_a), \quad (5.15)$$

ve které je  $\varepsilon_r$  relativní permitivita materiálu,  $V$  elektrický potenciál (napětí),  $q$  náboj elektronu,  $p$  hustota děr,  $n$  hustota elektronů,  $N_d$  koncentrace donorů a  $N_a$  koncentrace akceptorů, a dvě rovnice řídicí kontinuitu hustoty toku elektrického proudu:

$$\frac{\partial n}{\partial t} = \frac{1}{q}(\nabla \cdot J_n) - U_n, \quad (5.16)$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} = -\frac{1}{q}(\nabla \cdot J_p) - U_p, \quad (5.17)$$

ve kterých je  $J_n$  hustota proudu elektronů,  $J_p$  hustota proudu děr,  $U_n$  rekombinační rychlost elektronů a  $U_p$  rekombinační rychlost děr.

### 5.2.2 Stabilizované drift-difuzní rovnice

Tyto základní rovnice se bohužel ukázaly jako příliš nestabilní pro simulovaný model, a tak byly použity další aproximace ke zvýšení stability numerického řešení. Základní rovnice byly přepsány do tvaru pro stabilizované drift-difuzní rovnice, které obecně vypadají takto:

$$\nabla \cdot (-c\nabla\varphi + \alpha\varphi) + \beta \cdot \nabla\varphi + a\varphi = f, \quad (5.18)$$

kde  $\varphi$  je závislá veličina a ostatní parametry se liší v závislosti na konkrétní rovnici. Tato forma PDR umožňuje použít numerické metody stabilizace řešení, které jsou



implementovány v COMSOL Multiphysics. Podrobnosti numerického řešení stabilizace jdou nad rámec této diplomové práce.

Pro výpočet elektrického potenciálu jsou parametry:

$$c = \varepsilon_0 \varepsilon_r, \quad (5.19)$$

$$\beta = 0, \quad (5.20)$$

$$\alpha = 0, \quad (5.21)$$

$$a = 0, \quad (5.22)$$

kde  $a$  je parametr nekonzistentní stabilizace, která může vylepšovat stabilitu, ale počítá se nepatrně odlišná rovnice. Pro stabilizaci nakonec nebylo nutné tuto stabilizaci používat.  $f$  je prostorová hustota náboje, která se spočítá jako:

$$f = q(p - n + N_d - N_a). \quad (5.23)$$

Výsledná rovnice v křemíkové vrstvě je tedy:

$$\nabla \cdot (-\varepsilon_0 \varepsilon_r \nabla \varphi) = q(p - n + N_d - N_a). \quad (5.24)$$

V dielektrické vrstvě má výsledná rovnice tvar:

$$\nabla \cdot (-\varepsilon_0 \varepsilon_r \nabla \varphi) = 0. \quad (5.25)$$

Pro výpočet hustoty elektronového toku je závislá veličina  $n$ ,  $c$  se rovná:

$$c = -\mu_n k_B T, \quad (5.26)$$

kde  $\mu_n$  je pohyblivost elektronů (electron mobility),  $k_B$  je Boltzmannova konstanta a  $T$  je termodynamická teplota. Ve všech simulacích je za  $T$  dosazeno 300 K.  $\alpha$  je:

$$\alpha_x = -\mu_n q \frac{\partial \varphi}{\partial x}, \quad (5.27)$$

$$\alpha_y = -\mu_n q \frac{\partial \varphi}{\partial y}. \quad (5.28)$$

$\beta$  a  $a$  jsou 0 a  $f = -qR_{srh}$ , kde  $R_{srh}$  je Shockley-Read-Hallová aproximace rekombinace elektronů v křemíku:

$$R_{srh} = \frac{np - N_i^2}{\tau_n(n + N_i) + \tau_p(p + N_i)}, \quad (5.29)$$

kde  $N_i$  je vlastní (intrinsic) koncentrace nosičů náboje,  $\tau_n$  je průměrná doba života elektronu (electron lifetime), tedy doba než rekombinuje s dírou, a  $\tau_p$  je průměrná doba života díry.

Výsledná rovnice pro výpočet elektronového toku je tedy:

$$\nabla \cdot (\mu_n k_B T \nabla n - \mu_n q \frac{\partial \varphi}{\partial x} n) = \frac{-q(np - N_i^2)}{\tau_n(n + N_i) + \tau_p(p + N_i)}. \quad (5.30)$$

Rovnice popisující tok děr je obdobná, má tvar:

$$\nabla \cdot \left( -\mu_p k_B T \nabla p - \mu_p q \frac{\partial \varphi}{\partial x} p \right) = \frac{q(np - N_i^2)}{\tau_n(n + N_i) + \tau_p(p + N_i)}, \quad (5.31)$$

kde je závislá veličina  $p$ ,  $\mu_p$  je pohyblivost děr, a vzhledem k opačnému náboji se změnila znaménka.

S pomocí stabilizovaných drift-difuzních rovnic se podařilo zprovoznit simulace PN přechodu a bipolární transistor. Ale na simulace transistoru řízeného polem (FET) jsou tyto rovnice pořád příliš nestabilní, a to i přes snahu použít nekonzistentní stabilizaci.

### 5.2.3 Aproximace pomocí kvazi-Fermiho hladin

Základní myšlenkou této aproximace je zjednodušení výpočtu hustoty elektronového ( $n$ ) a děrového ( $p$ ) toku. Myšlenka tohoto zjednodušení byla převzata z (Blue a Wilson, 1983). Elektronový tok  $n$  je vypočítán podle rovnice:

$$n = N_i e^{q(\varphi - \varphi_n)/(k_B T)}, \quad (5.32)$$

kde  $\varphi_n$  je elektronová kvazi-Fermiho hladina (quasi-Fermi level) a  $\varphi$  je elektrický potenciál. Děrový tok  $p$  je definován obdobnou rovnicí:

$$p = N_i e^{q(\varphi_p - \varphi)/(k_B T)}, \quad (5.33)$$

kde  $\varphi_p$  je děrová kvazi-Fermiho hladina. Výpočet elektrického potenciálu  $\varphi$  zůstává nezměněn stále podle rovnic (5.24) a (5.25), ale je nutné spočítat potřebné kvazi-Fermiho hladiny. Rovnice pro výpočet elektronové kvazi-Fermiho hladiny  $\varphi_n$  je pozměněná rovnice pro výpočet elektronového toku, stále ve stabilizované drift-difuzní podobě, kde se  $c = q\mu_n n$ ,  $f = qR_{srh}$  a ostatní parametry jsou 0. V této aproximaci není nutné používat nekonzistentní aproximaci pomocí parametru  $a$ .

Výsledná rovnice pro výpočet  $\varphi_n$  je tedy:

$$\nabla \cdot (-q\mu_n n \nabla \varphi_n) = qR_{srh} \quad (5.34)$$

a rovnice popisující  $\varphi_p$  je:

$$\nabla \cdot (-q\mu_p p \nabla \varphi_p) = -qR_{srh}. \quad (5.35)$$

## 5.3 Popis modelu MOSFETu

### 5.3.1 Geometrie a materiálové parametry

V této části jsou popsány geometrie, materiálové parametry a okrajové podmínky numerického modelu.

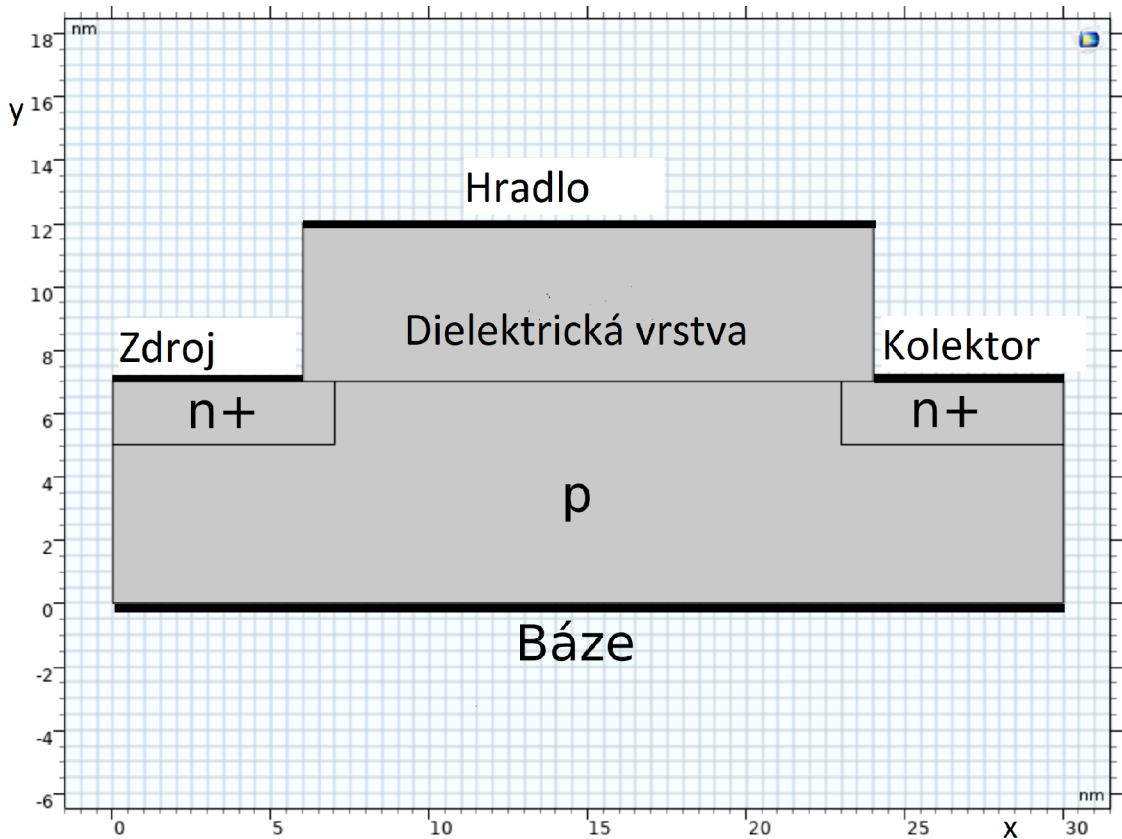
Geometrie simulovaného modelu je na obrázku 5.2. Použité geometrické parametry jsou zapsány v tabulce 5.1 a použité materiálové parametry jsou v tabulce

Tabulka 5.1: Geometrické parametry použité pro simulace

konstanta	hodnota	jednotka
šířka báze	30	nm
výška polovodičové vrstvy	7	nm
výška dielektrické vrstvy	5	nm
šířka hradla	18	nm
šířka kanálu	16	nm
šířka zdroje	6	nm
šířka kolektoru	6	nm
šířka n+ vrstvy (obou)	7	nm
výška n+ vrstvy (obou)	2	nm

Tabulka 5.2: Materiálové parametry použité pro simulace

konstanta	značení	hodnota	jednotka
teplota	T	300	K
délka života elektronů	$\tau_n$	$1,0 \times 10^{-6}$	s
délka života děr	$\tau_p$	$1,0 \times 10^{-6}$	s
náboj elektronu	q	$1,6022 \times 10^{-19}$	C
hustota stavů ve valenčním pásu křemíku	$N_v$	$3,1952 \times 10^{25}$	$1/\text{m}^3$
hustota stavů ve vodivostním pásu křemíku	$N_c$	$3,1952 \times 10^{25}$	$1/\text{m}^3$
vlastní koncentrace nosičů náboje	$N_i$	$1,25 \times 10^{16}$	$1/\text{m}^3$
koncentrace donorů	$N_d$	$1,0 \times 10^{26}$	$1/\text{m}^3$
koncentrace akceptorů	$N_a$	$1,0 \times 10^{23}$	$1/\text{m}^3$
pohyblivost elektronů	$\mu_n$	0,05	$\text{m}^2/(\text{V} \cdot \text{s})$
pohyblivost děr	$\mu_p$	0,05	$\text{m}^2/(\text{V} \cdot \text{s})$
permitivita vakua	$\varepsilon_0$	$8,8542 \times 10^{-12}$	F/m
relativní permitivita křemíku	$\varepsilon_r$	11,8	1
šířka zakázaného pásu křemíku	$Eg_0$	1,12	V
elektronová afinita	$\chi_0$	4,05	V



Obrázek 5.2: Geometrie modelu MOSFETu.

5.2. Oblasti n+ jsou velmi silně dopované donory  $N_d$  a oblast p je dopovaná akceptory  $N_a$ . V dielektrické vrstvě se elektrony a díry nemohou pohybovat, proto tam nevede žádný proud. Dielektrická vrstva má jediný materiálový parametr  $\varepsilon_d$ . Změna tohoto parametru zásadně mění vlastnosti transistoru a výsledky simulací s různými nastaveními  $\varepsilon_d$  jsou popsány v následující části.

### 5.3.2 Okrajové podmínky

Rovnice elektrického napětí (5.24) je doplněna následujícími okrajovými podmínkami. Napětí na bázi  $V_{base}$  je 0 V. Napětí na kolektoru  $V_d$  je 0 V. Napětí na zdroji  $V_s$  a hradle  $V_g$  jsou měnící se parametry pro danou simulaci. Na ostatních okrajích platí Neumannova podmínka:

$$-\mathbf{n} \cdot (-c\nabla\varphi) = 0, \quad (5.36)$$

tedy podmínka nulového toku.

Rovnice pro výpočet elektronové a děrové kvazi-Fermiho hladiny se počítá pouze v polovodičovém materiálu, tedy v křemíku. V dielektriku není vůbec definovaná. Okrajové podmínky pro elektronovou hladinu mají následující tvar:

$$\varphi_n = V_s + \frac{k_B T}{q} \log\left(\frac{|N_d - N_a|}{N_i}\right), \quad (5.37)$$

kde se pouze zaměňuje  $V_s$ ,  $V_d$  a  $V_{base}$ . Na všech ostatních okrajích platí Neumannova podmínka pro nulový tok. Hranice polovodiče s dielektrikem je pro tuto rovnici také okraj, a také na této hranici platí podmínka nulového toku.

Okrajové podmínky pro děrovou hladinu jsou obdobné. Platí pro ně vše co pro elektronové rovnice a jejich základní tvar je:

$$\varphi_p = V_s - \frac{k_B T}{q} \log \left( \frac{|N_d - N_a|}{N_i} \right). \quad (5.38)$$

Všechny tři rovnice jsou navzájem provázané (coupled) a řeší se najednou.

## 6 Výsledky modelování MOSFETu s dielektrickou vrstvou

V této části práce budou popsány výsledky numerického modelu MOSFETu s dielektrickou vrstvou pro kladné a záporné hodnoty permitivity a následné porovnávání jejich dopadů na vlastnosti transistoru. Záporná hodnota permitivity způsobuje, že kladné napětí přivedené na hradlo způsobí záporné napětí pod ním a naopak. Tento jev není možné vyvolat v dielektriku, ale pro demonstraci vlastností a zvláštností záporné kapacity je v této části práce bráno, že dielektrikum je hypotetický materiál, který je popsán jediným dielektrickým parametrem permitivitou, která může nabývat záporných hodnot. Simulací MOSFETu s reálným ferroelektrikem se zabývá část 7.

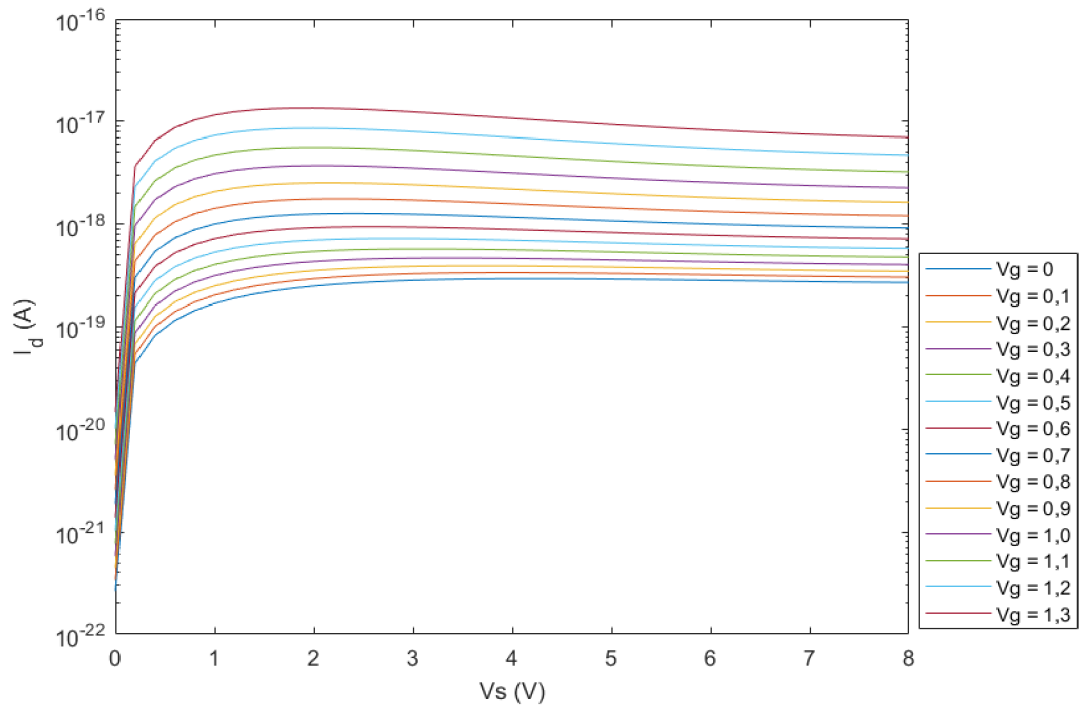
Numerický model je řešený pomocí metody konečných prvků v SW Comsol Multiphysics. Veškeré obrázky a grafy vyskytující se v této části práce byly vytvořeny autorem této práce s použitím programů COMSOL a Matlab.

### 6.1 Chování MOSFETu při kladných permitivitách na dielektriku

Relativní permitivita dielektrika má extrémní dopad na funkčnost transistoru. Simulace byly provedeny pro hodnoty  $\varepsilon_d$  4, 2, -2 a -4 a následně je pro každou variantu vyhodnocena volt-ampérová charakteristika, tedy závislost elektrického proudu mezi zdrojem a kolektorem  $I_d$  a napětím na zdroji  $V_s$ .

Pro  $\varepsilon_d = 2$  je výsledek na obrázku 6.2. V grafu je patrné, že se zvyšujícím se napětím na zdroji  $V_s$  nejprve proud  $I_d$  prudce narůstá, poté se stabilizuje na určité úrovni a dál nenarůstá. Ve skutečnosti, jak je vidět na obrázku 6.1, na kterém není použita logaritmická škála pro osu  $y$ , dokonce proud mírně klesá při vyšších napětích na zdroji. To je způsobené jevem, který se nazývá zaškrčení (pinch-off), při kterém dojde v důsledku velkého napětí na zdroji k přerušení kanálu a tím k oslabení možnosti vedení proudu. Tento jev je možné vidět při porovnání obrázků 6.3 a 6.4. Z obrázku 6.3 je patrné, že elektrony jsou přitaženy k celé ploše kanálu víceméně stejně, a na obrázku 6.4 jsou koncentrovány jen v pravé části kanálu.

Naproti tomu koncentrace a hustota děr je zobrazena na obrázku 6.5, kde je vidět, že díry jsou koncentrovány u báze a mírně více ve středu transistoru. Toto platí při nulovém napětí na zdroji a na hradle. Koncentrace děr se lehce změní, když přivedeme na hradlo a na zdroj napětí, viz obrázek 6.6, kde jsou díry ještě více



Obrázek 6.1: VA charakteristika pro  $\varepsilon = 2$  logaritmická škála.

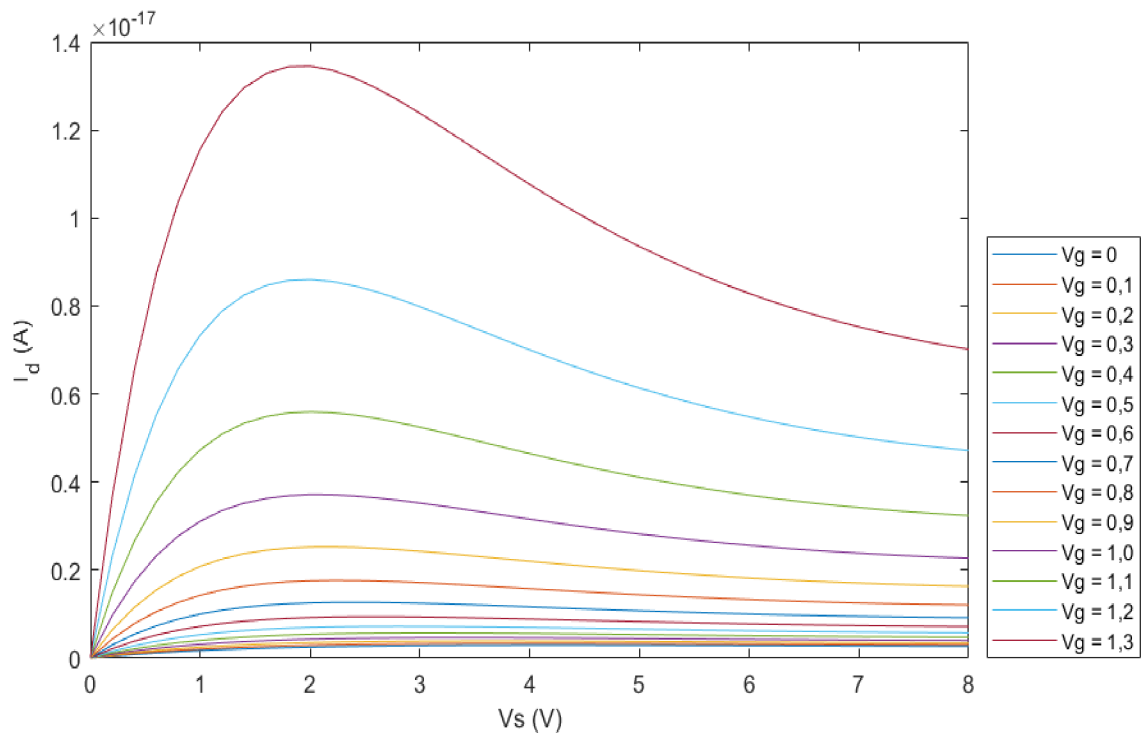
přimáčknuté k bázi a jsou lehce vypuzeny z prostoru pod zdrojem.

Na obrázku 6.7 je zobrazen elektrický potenciál v případě, že napětí přivedené na zdroj i na hradlo je nulové. Je vidět, že elektrický potenciál je způsobován pouze vysokou koncentrací elektronů ve vysoce dopovaných oblastech n+. Dále je na obrázku 6.8 zobrazeno elektrické pole způsobené dodáním napětí na hradlo, které přebije pole způsobovaná koncentracemi elektronů. A na obrázku 6.9 je zobrazen stav, kdy je na hradlo přivedeno napětí, ale na zdroji je přivedeno mnohem větší napětí. Tato situace způsobuje jev zaškrvení.

Voltampérová charakteristika pro  $\varepsilon_d = 4$  je zobrazena na obrázku 6.10. Oproti charakteristice  $\varepsilon_d = 2$ , která je zobrazena na obrázku 6.2, dosahuje proud mnohem vyšších hodnot, a to až o dva řády pro nejvyšší nastavení  $V_g$ . Kvůli nestabilitě simulace nebylo možné prozkoumat charakteristiku při vyšších hodnotách napětí na zdroji  $V_s$ . Vzhledem k relativně nízkým hodnotám  $V_s$  také nedochází k zaškrvení kanálu. Na obrázku 6.11 je zobrazen vytvořený kanál při 0,6 V na hradle a 0 V na zdroji.

Na obrázku 6.12 je pro porovnání zobrazen kanál při napětí na hradle 1,2 V. Je zřejmé, že větší napětí způsobí větší koncentraci elektronů těsně na hranici křemíku s dielektrikem a z toho plynoucí možnost přenosu většího elektrického proudu přes kanál. Pro porovnání je na obrázku 6.13 zobrazen stav, kdy na hradlo není přivedeno žádné napětí a transistor je tedy úplně uzavřený a nevede proud. Zde se elektrony koncentrují ve vysoce dopovaných oblastech, protože na ně nepůsobí žádná síla, která by je přesouvala do jiné oblasti.





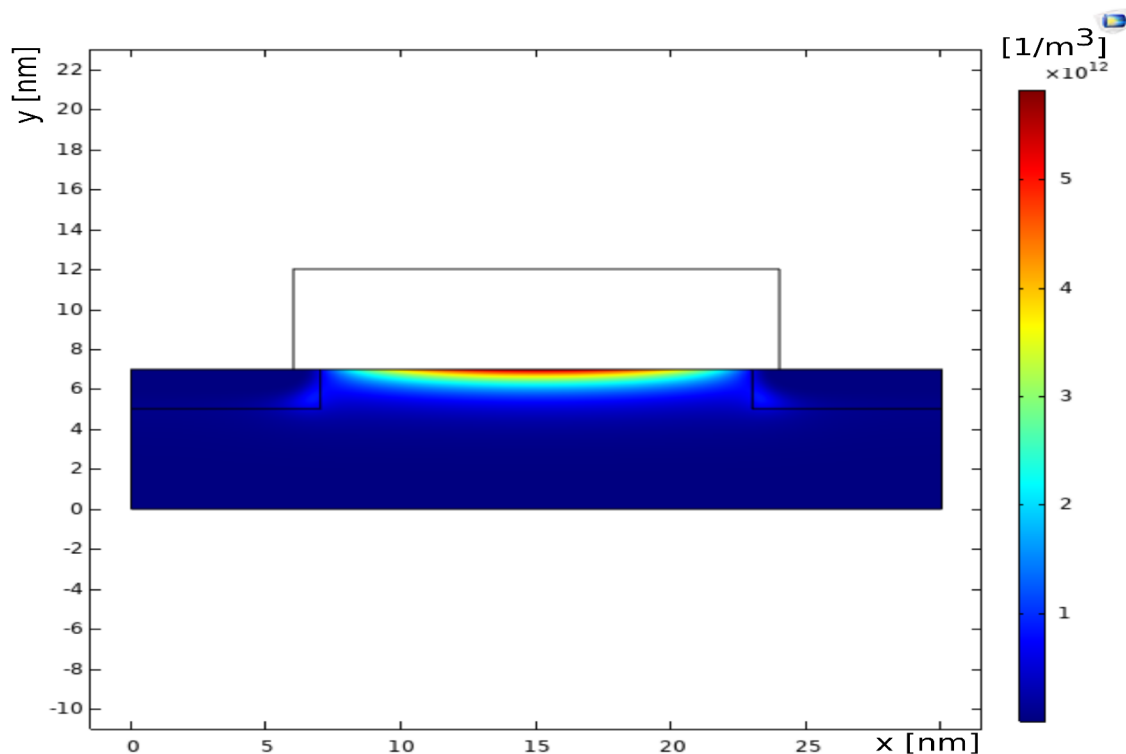
Obrázek 6.2: VA charakteristika pro  $\epsilon = 2$  nelogaritmická škála.

## 6.2 Chování MOSFETu při záporných permitivitách na dielektriku

Voltampérová charakteristika pro  $\epsilon = -2$  je zobrazena na obrázku 6.14 a bez logaritmické škály na obrázku 6.15. Tyto grafy můžeme porovnat s grafy pro kladnou permitivitu na obrázcích 6.2 a 6.1. Záporná permitivita dosahuje při stejné absolutní hodnotě a stejném absolutním napětí na hradle mnohem vyšších hodnot elektrického proudu, a to až o 3 řády, tedy 1000x větší hodnoty. Také je důležité všimnout si, že křivky při záporné permitivitě mají opačný tvar než při kladné, jsou konvexní a rostou do nekonečna, nemají hranici, při které by se stabilizovaly.

Simulace se zápornou permitivitou jsou z tohoto důvodu extrémně numericky nestabilní a bylo nutné značně upravovat nastavení jednotlivých numerických parametrů simulací, aby byla zajištěna konvergence Newtonovy metody. To je hlavní důvod, proč je voltampérová charakteristika pro  $\epsilon = -4$  spočítaná pouze pro velice malé hodnoty napětí na hradle i na zdroji. Tato charakteristika je zobrazena na obrázku 6.16 a na obrázku 6.17, a i přes méně než poloviční hodnoty na hradle dosahuje stejných hodnot jako charakteristika pro  $\epsilon = -2$ .

Na obrázku 6.18 je zobrazen elektrický potenciál při záporné permitivitě dielektrika a napětí přivedeném na hradlo. Na obrázku je vidět, že díky záporné hodnotě permitivity a podmínce pro spojitost normálové složky vektoru elektrické indukce (viz rovnice (4.8)), elektrostatický potenciál z původně záporné hodnoty



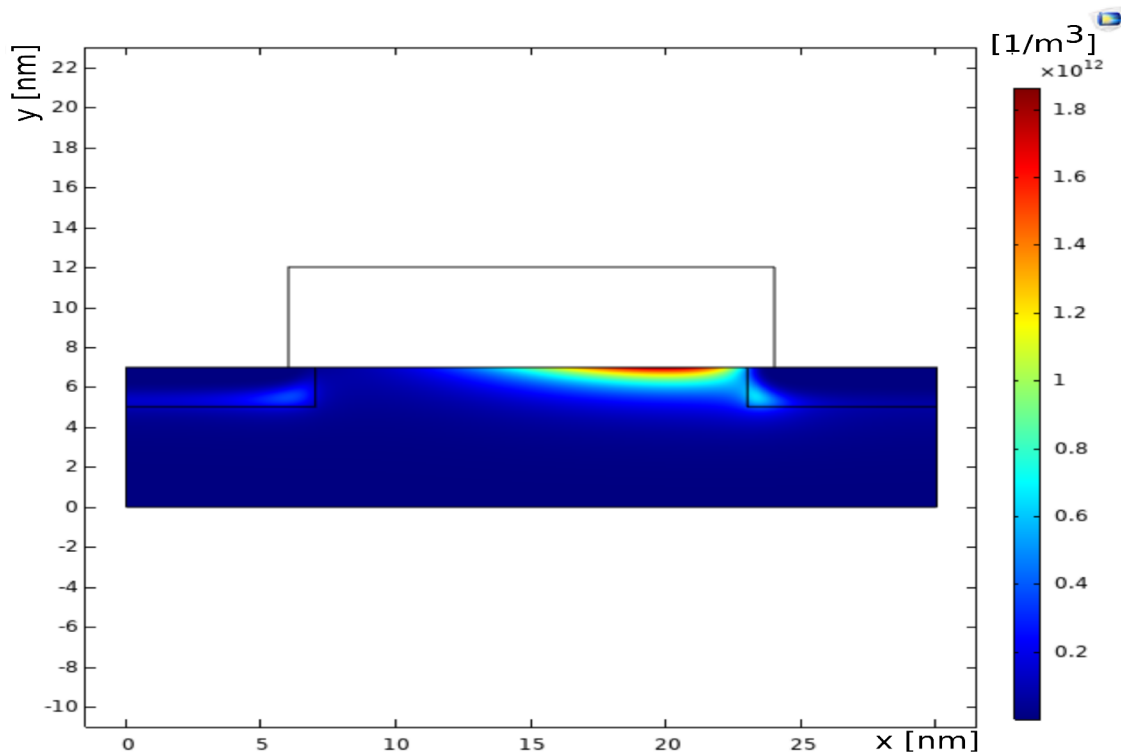
Obrázek 6.3: Hustota elektronů v transistoru při  $V_g = 1,2$  V a  $V_s = 0$  V.

$V_g = -1,2$  V lineárně stoupá a dosahuje kladné hodnoty na kanálu, která následně ovlivňuje elektrony a díry v polovodiči. Na obrázku 6.19 je zobrazena elektronová hustota při záporném napětí na hradle a nulovém napětí na zdroji. Je vidět nádherně vytvořený rovnoměrný pás elektronů přes celou šířku kanálu. Na obrázku 6.20 je vidět elektronová hustota při záporném napětí na hradle a kladném napětí na zdroji. Zde dochází k vysoké koncentraci elektronů na levé části kanálu. V podobné situaci při kladné permitivitě dochází ke koncentraci elektronů na pravé části kanálu.

### 6.3 Změny chování MOSFETu v závislosti na permitivitě dielektrika

Na grafu na obrázku 6.21 je zachycena závislost proudu procházející skrz kanál do kolektoru v závislosti na napětí na hradle při různých permitivitách. Napětí na zdroji bylo nastaveno na  $V_s = 1$  V. Z grafu vyplývá, že záporné permitivity jsou schopné otevřít transistor s použitím menšího absolutního napětí na hradle, a že vyšší absolutní hodnoty permitivity jsou také schopné otevřít transistor při nižším absolutním napětí. Otevření transistoru je definováno jako rozdíl v proudu o 5 až 6 řádů, tedy stotisíckrát až milionkrát.

Průsečík křivek je místem, kde se pomocí elektrického pole vytvořeného napětím na hradle vyruší elektrické pole způsobené vnitřním (build in) elektrickým polem v polovodiči. Toto vnitřní elektrické pole vzniká kvůli proměnlivé hustotě nosičů

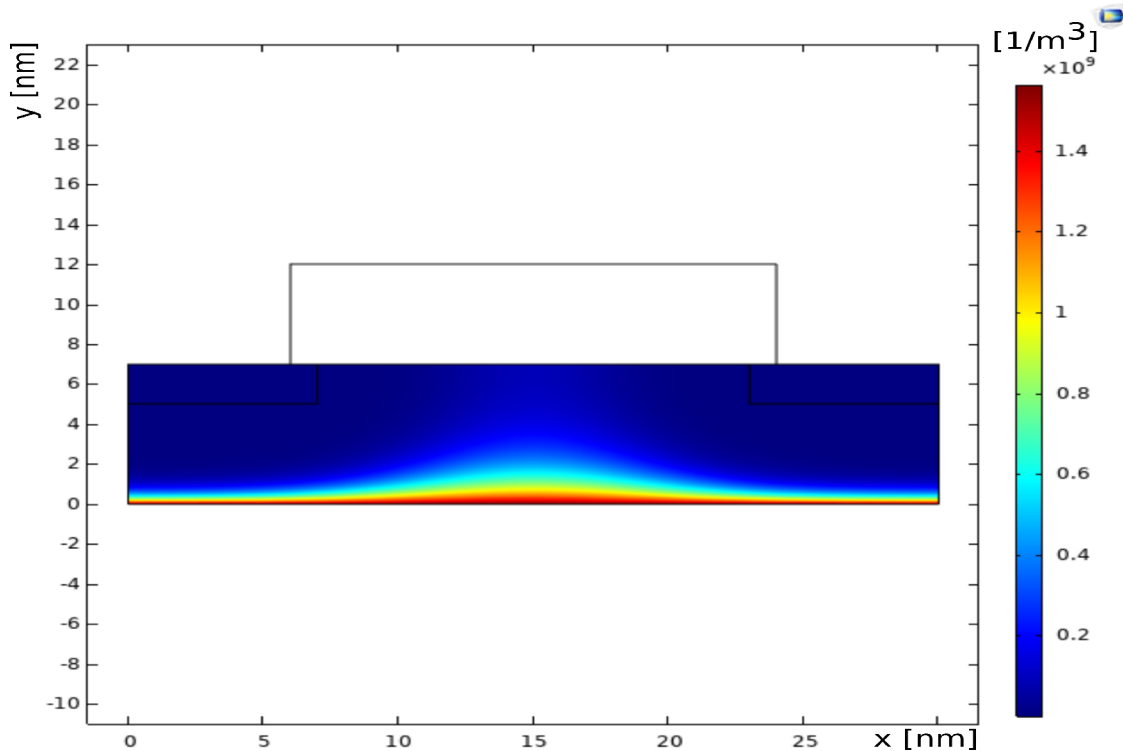


Obrázek 6.4: Hustota elektronů v transistoru při  $V_g = 1,2$  V a  $V_s = 4$  V.

náboje a existencí PN přechodů uvnitř objemu polovodiče. Jde tedy o posunutý nulový bod a dochází k němu při napětí na hradle o hodnotě 0,27 V.

Na grafu na obrázku 6.22 je zobrazena závislost napětí na kanále v závislosti na napětí na hradle při různých permitivitách. Napětí na zdroji bylo opět nastaveno na  $V_s = 1$  V. Z grafu vyplývá, že tyto závislosti jsou podle očekávání lineární. Dále, že vyšší absolutní hodnoty permitivity mají křivky s prudším sklonem, a že záporné permitivity mají prudší křivky oproti srovnatelným kladným permitivitám. Také je zde vidět posunutý průsečík křivek, opět na stejné hodnotě napětí na hradle. Na grafu na obrázku 6.23 jsou zobrazeny křivky získané z numerického modelu, stejné jako v předchozím grafu, porovnané s křivkami vypočítanými podle analytického modelu z rovnice (4.4). Křivky získané pro stejnou permitivitu mají stejnou barvu, křivky předpovězené numerickou simulací jsou tenké a křivky předpovězené analytickým modelem jsou tlusté. Je vidět, že výsledky se od sebe odlišují. Zásadním rozdílem mezi analytickým a numerickým modelem je pozice bodu, v němž se křivky různých permitivit protínají. Zatímco v analytickém modelu je poloha průsečíků křivek 0 V. Z numerického modelu vyplývá, že je průsečík křivek posunut o 0,27 V. Tento posun je způsoben vnitřním elektrickým polem, které je v polovodiči způsobené proměnlivou hustotou nosičů náboje a PN přechody v objemu polovodiče. Jedná se o jev, který není možné v jednoduchém analytickém modelu zohlednit. S tím jsou spojené i rozdíly mezi sklony odpovídajících si křivek permitivit.

Rozdíl mezi kladnou a zápornou permitivitou je vidět při porovnání obrázku 6.13, kde je zobrazen stav při  $V_g = 0$  V a  $V_s = 0$  V při kladné permitivitě, a obrázku 6.24,



Obrázek 6.5: Hustota děr v transistoru při  $V_g = 0$  V a  $V_s = 0$  V.

kde je zobrazen stejný stav při záporné permutivitě. Je vidět, že při záporné permutivitě jsou elektrony přitahovány k dielektrické vrstvě a do prostoru kanálu, zatímco při kladné se drží v dopovaných oblastech.

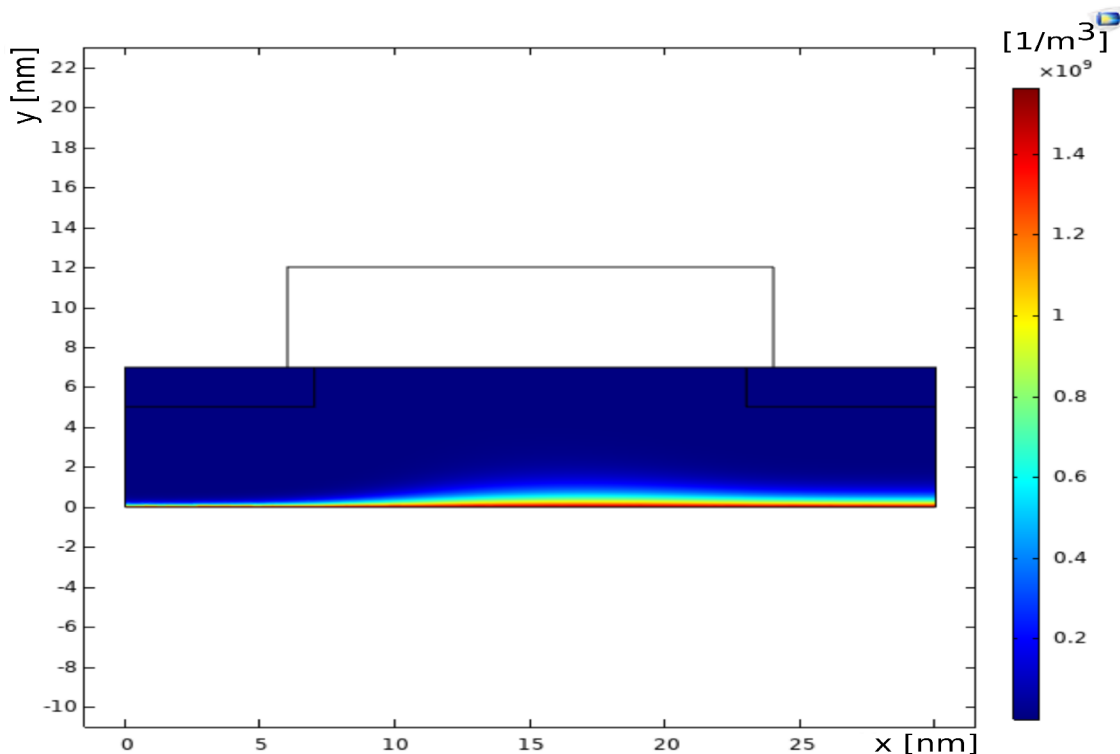
Na grafu na obrázku 6.25 je zobrazena práce na kanále v závislosti na napětí na hradle pro vybrané permutivity. Práce na kanále je množství dodané energie skrz hradlo, které slouží k otevření kanálu, a umožnění proudění volných nosičů náboje skrz transistor. Vzorec pro výpočet práce je  $W = QV_{Ch}$ , kde  $W$  je práce,  $V_{Ch}$  je průměrné napětí na kanále a  $Q$  je elektrický náboj na hradle. Náboj  $Q$  se určí podle vztahu:

$$Q = \int_a^b \left( -\frac{\partial \phi}{\partial y} \varepsilon_0 \varepsilon_d \right) L dx, \quad (6.1)$$

kde  $(b - a)L$  je plocha elektrody a  $L = 1/(b - a) \text{ m}^2$ .

Z grafu je očividné, že změna permutivity má velký vliv na množství vykonané práce. V tomto případě platí, že čím větší je vykonaná práce, tím lepší, protože to znamená, že je snazší transistor otevřít a zavřít.

Na grafu na obrázku 6.26 je zobrazena závislost práce na kanále na napětí na hradle při dvou různých tloušťkách dielektrika při záporné permutivitě  $\varepsilon = -2$ . Tloušťka dielektrika má velký vliv na funkčnost transistoru. Z grafu je patrné, že užší dielektrikum s tloušťkou 3 nm vykoná větší práci na kanále při stejném napětí na hradle, což znamená, že k otevření či zavření transistoru je potřeba menšího množství dodané energie. Křivka pro tloušťku 3 nm je kratší než křivka pro tloušťku 5 nm, protože se při vyšších hodnotách  $V_g$  stává simulace nestabilní.

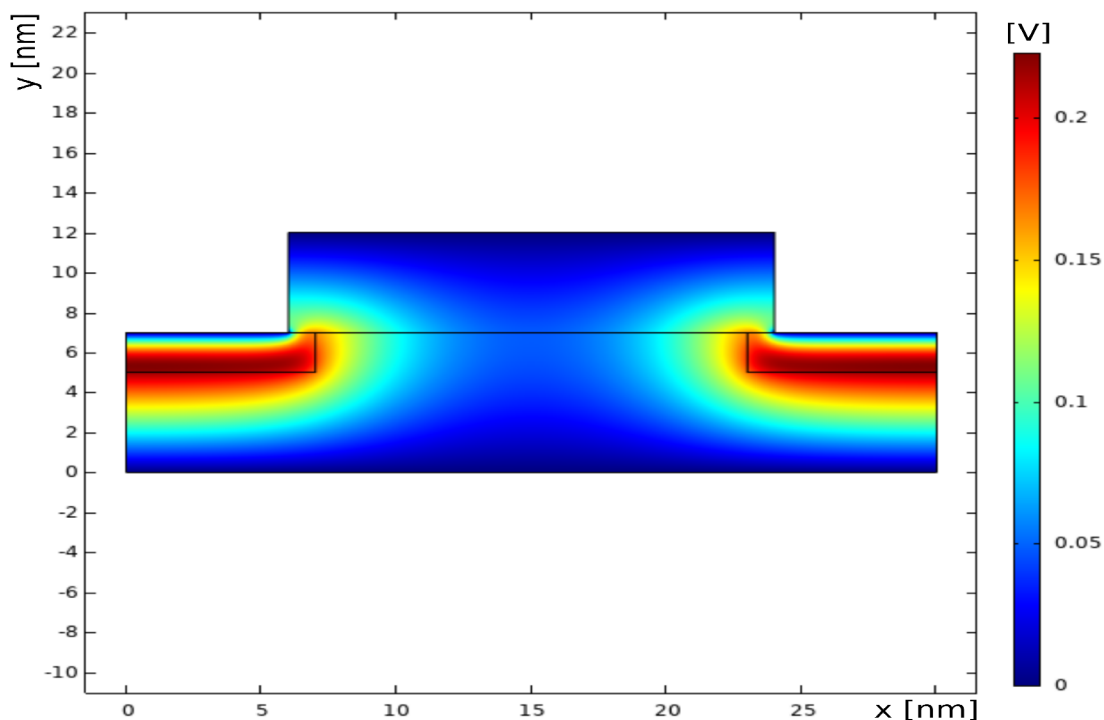


Obrázek 6.6: Hustota děr v transistoru při  $V_g = 1,2$  V a  $V_s = 8$  V.

Naprostou zásadní vlastností transistoru je poměr napětí mezi hradlem a kanálem. V případě kladných permitivit se poměr  $V_{ch}/V_g$  může pohybovat v rozmezí od 0 do 1. Tento poměr závisí na podílu permitivit  $\varepsilon_d/\varepsilon_s$  a na geometrických rozměrech transistoru podle vzorce 4.5. K 1 se poměr blíží, pokud jde tloušťka dielektrika limitně k nule nebo jde permitivita dielektrika limitně do nekonečna. Za každý dodaný volt na hradlo získáme méně než volt na kanále. Na grafu na obrázku 6.27 je zobrazen podíl napětí na kanále a na hradle v závislosti na podílu relativní permitivity dielektrika a křemíku při třech různých tloušťkách dielektrika pro kladné hodnoty permitivity. Tento graf ukazuje poměr napětí na kanále a na hradle. Při měření bylo napětí na hradle fixované na 1 V, napětí na zdroji na 1 V, permitivita křemíku na 11,8 a měnila se permitivita dielektrika od 1 do 4. Opět je vidět, že užší dielektrikum je výhodnější, ale i při tloušťce 3 nm je poměr převedeného napětí menší než 0,5. Vyšší permitivita také zlepšuje schopnost přenosu.

Na obrázku 6.28 je obdobný graf, jen pro záporné permitivity, a na první pohled je očividné, že podíl napětí na kanále a na hradle je větší než u kladných permitivit. Dielektrikum o tloušťce 7 nm se zápornou permitivitou má větší poměr  $V_{ch}/V_g$  než dielektrikum o tloušťce 3 nm s kladnou permitivitou. Dielektrikum o tloušťce 3 nm se zápornou permitivitou dosahuje poměru  $V_{ch}/V_g$  přes 85 %. Kvůli numerické nestabilitě simulace při vysokých hodnotách byly pro měření použity nižší hodnoty napětí a také pouze záporné permitivity v rozmezí mezi -1 až -2. Napětí na hradle bylo -0,5 V a na zdroji 0,5 V.

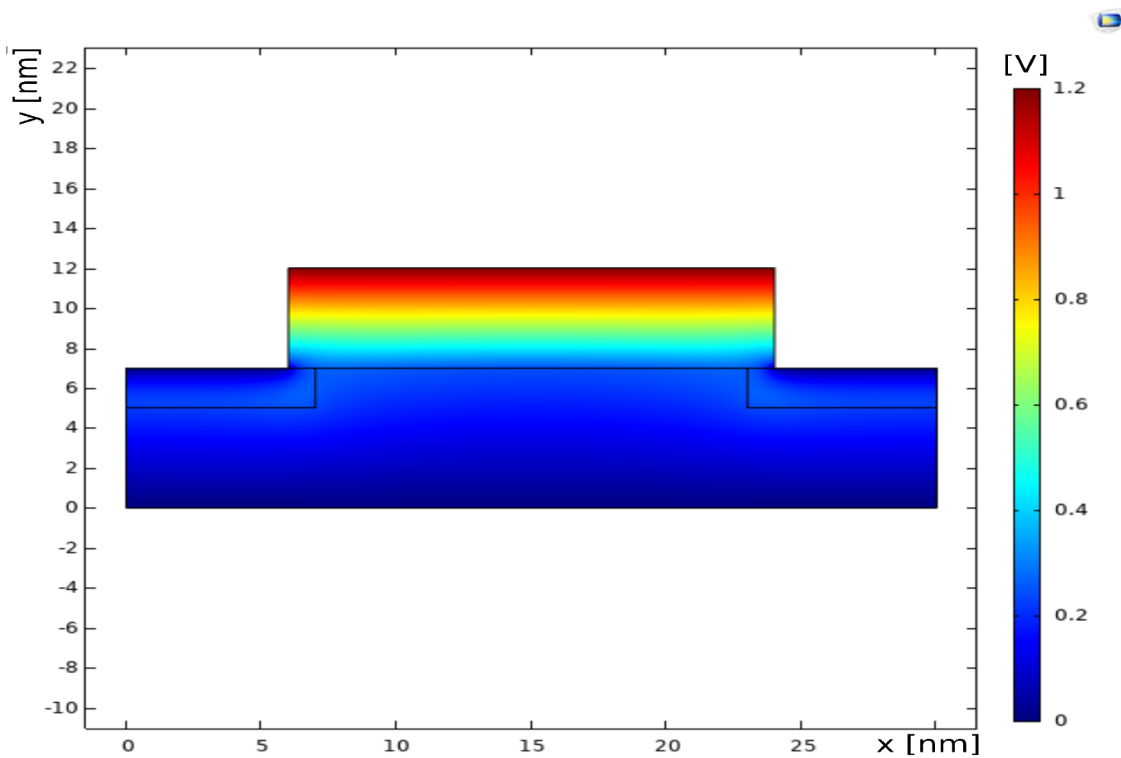
Nejzajímavější výsledky vznikly v případě, když se napětí dodávané na hradlo



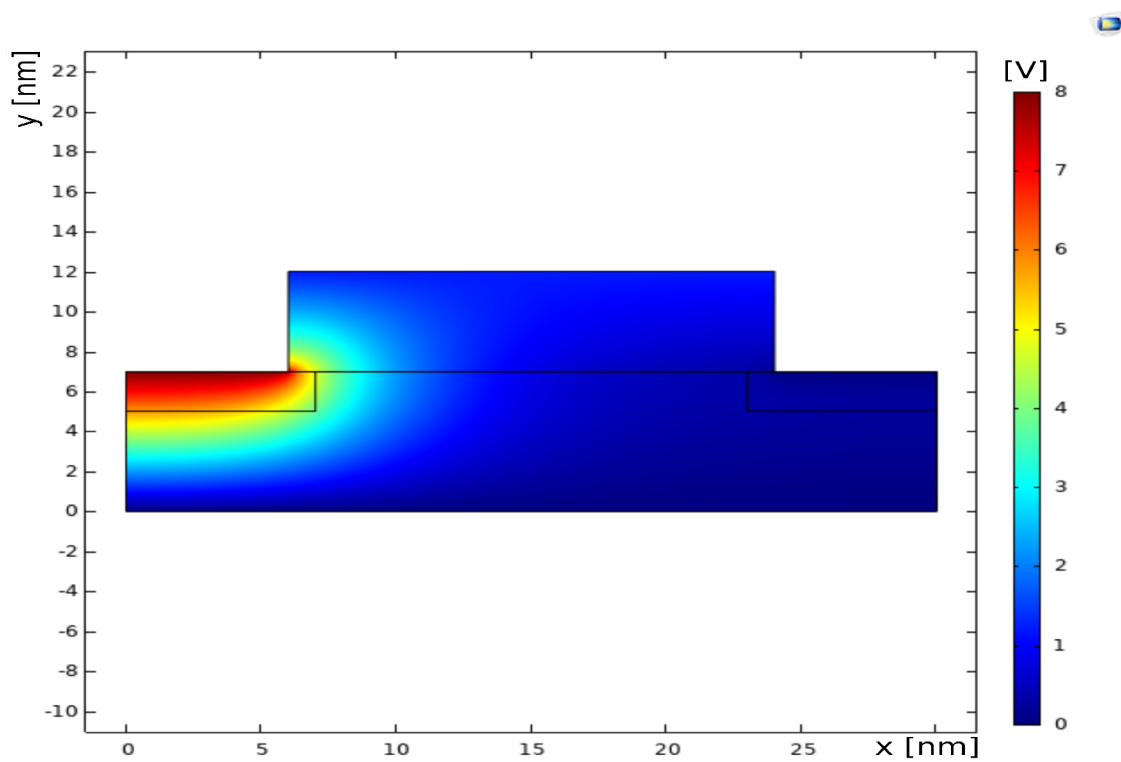
Obrázek 6.7: Elektrický potenciál v transistoru při  $V_g = 0$  V a  $V_s = 0$  V.

snížilo na  $-0,2$  V, viz obrázek 6.29. V tomto případě bylo možné simulovat záporné permitivity až do  $-3$ . Na grafu je ve všech případech vidět zesilování napětí. V nejlepším případě pro tloušťku dielektrika 3 nm jde o účinnost přenosu kolem 220 %. Na kanál jde podobné množství energie, jako kdyby bylo napětí na hradle mnohem větší, což znamená, že je možné otevírat a zavírat transistor s použitím menšího množství dodané energie a s menší generací tepla. Na obrázku 6.30 jsou zobrazeny všechny výsledky pro předchozí případy najednou, aby je bylo možné přehledně porovnat. Na obrázku 6.31d je voltampérová charakteristika transistoru při nízkých hodnotách  $V_g$ , na kterém dochází k zesilování napětí. Je zřejmé, že se tato charakteristika nijak výrazně neliší od charakteristik na obrázcích 6.16 a 6.14, takže i v tomto případě zařízení pořád funguje jako transistor.

Na grafech na obrázku 6.31 je zobrazeno porovnání výsledků simulací s výsledky získanými z analytického modelu pomocí rovnice (4.4). Ve všech případech jsou pozorovatelné velké rozdíly mezi numerickým a analytickým modelem, největší rozdíly jsou v případě záporných permitivit a nízkých napětí na hradle, kde v simulaci dochází k zesílení napětí na kanále pro všechny tloušťky dielektrika. Podle výsledků z rovnic k zesílení dochází jen pro tloušťku 3 nm a je mnohem menší. Jde opět o důsledek toho, že jednoduchý analytický model nepočítá s elektrickými poli, která jsou v transistoru způsobená přítomností volných elektronů a děr v objemu transistoru.

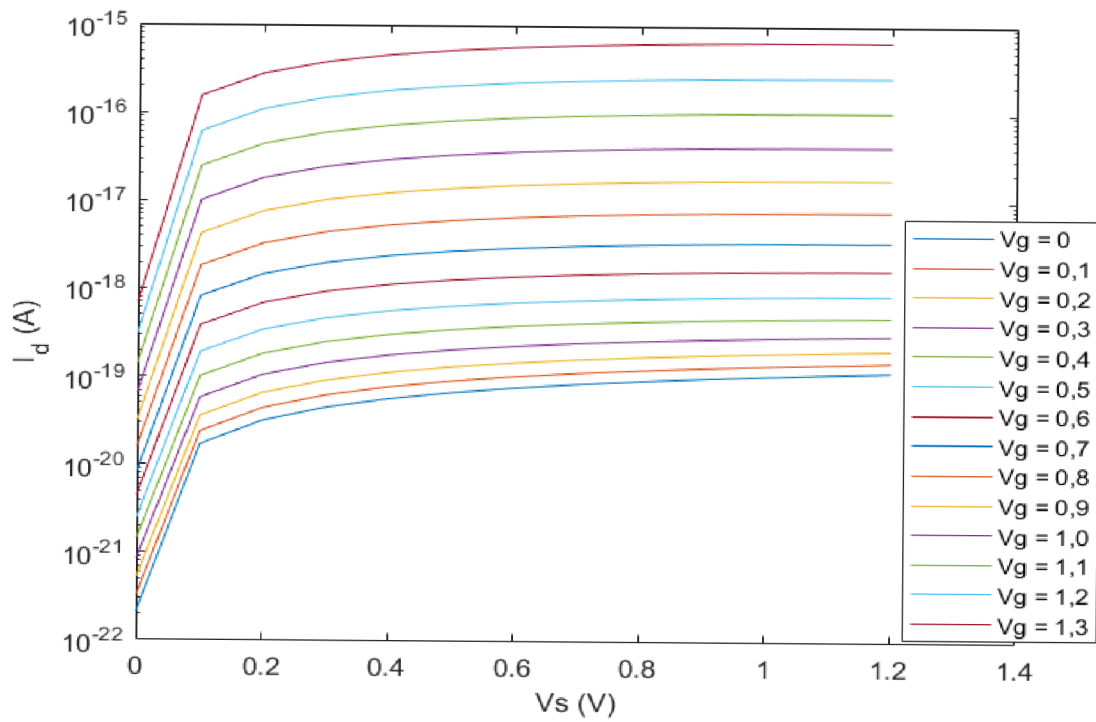


Obrázek 6.8: Elektrický potenciál v transistoru při  $V_g = 1,2$  V a  $V_s = 0$  V.

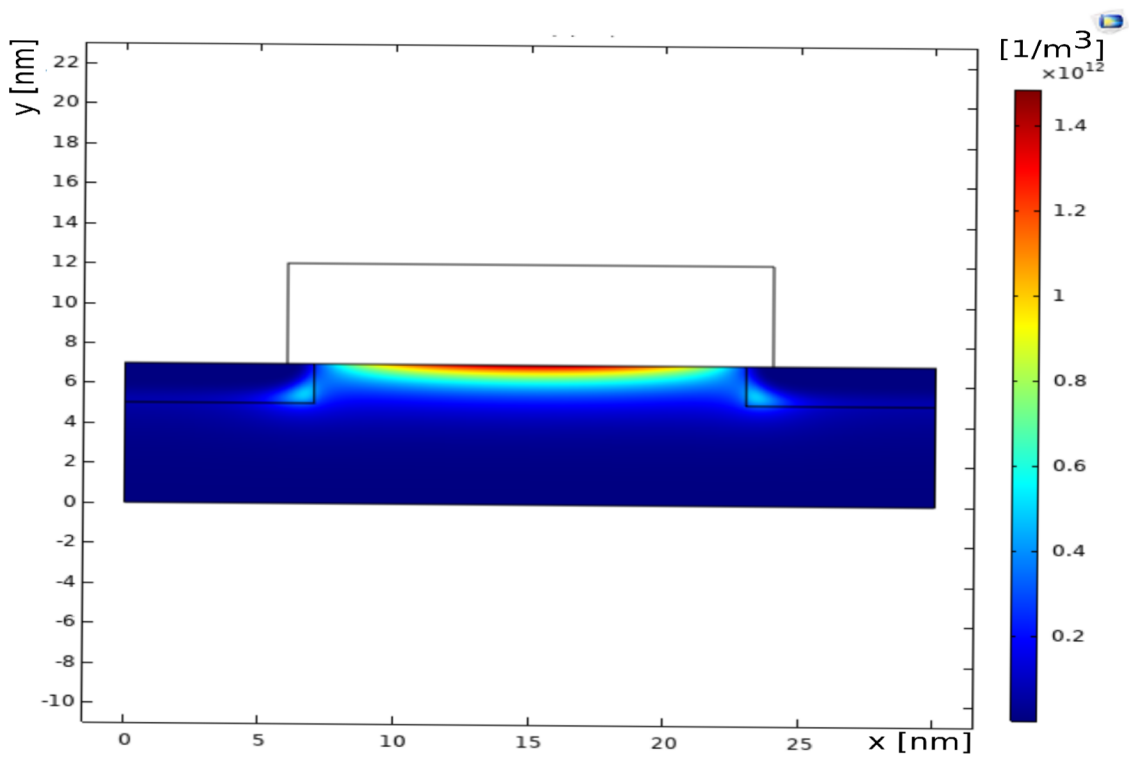


Obrázek 6.9: Elektrický potenciál v transistoru při  $V_g = 1,2$  V a  $V_s = 8$  V.

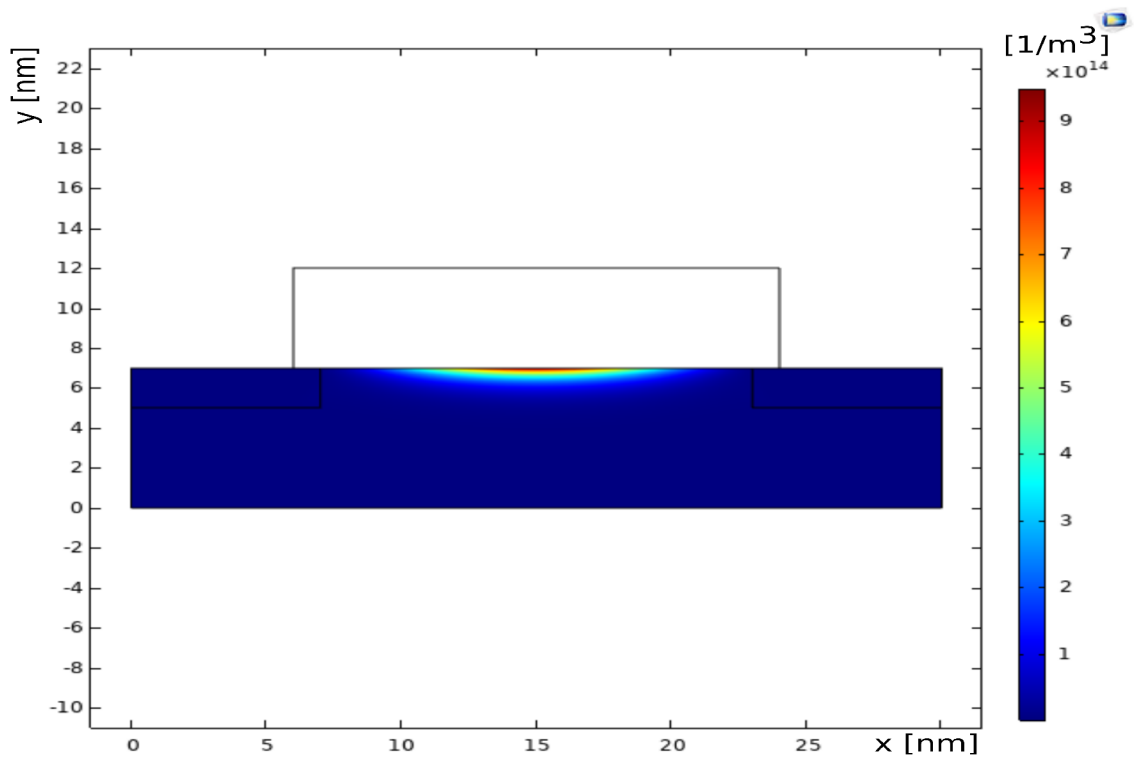




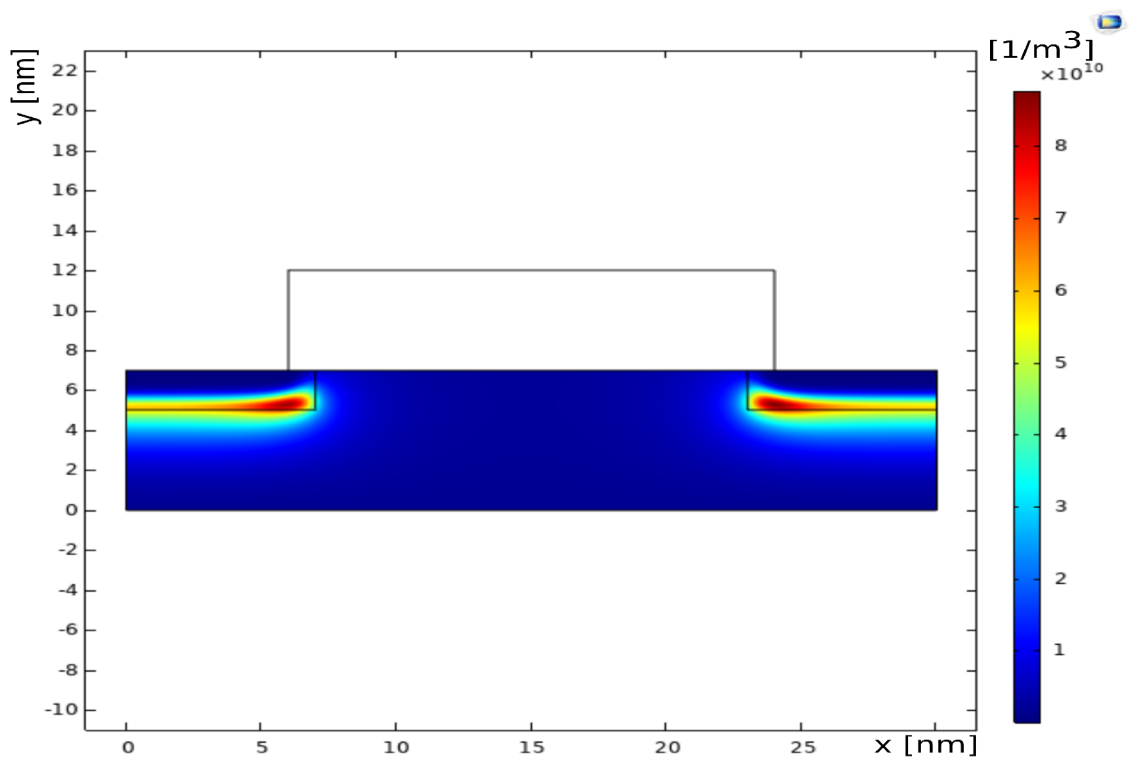
Obrázek 6.10: VA charakteristika pro  $\varepsilon = 4$  logaritmická škála.



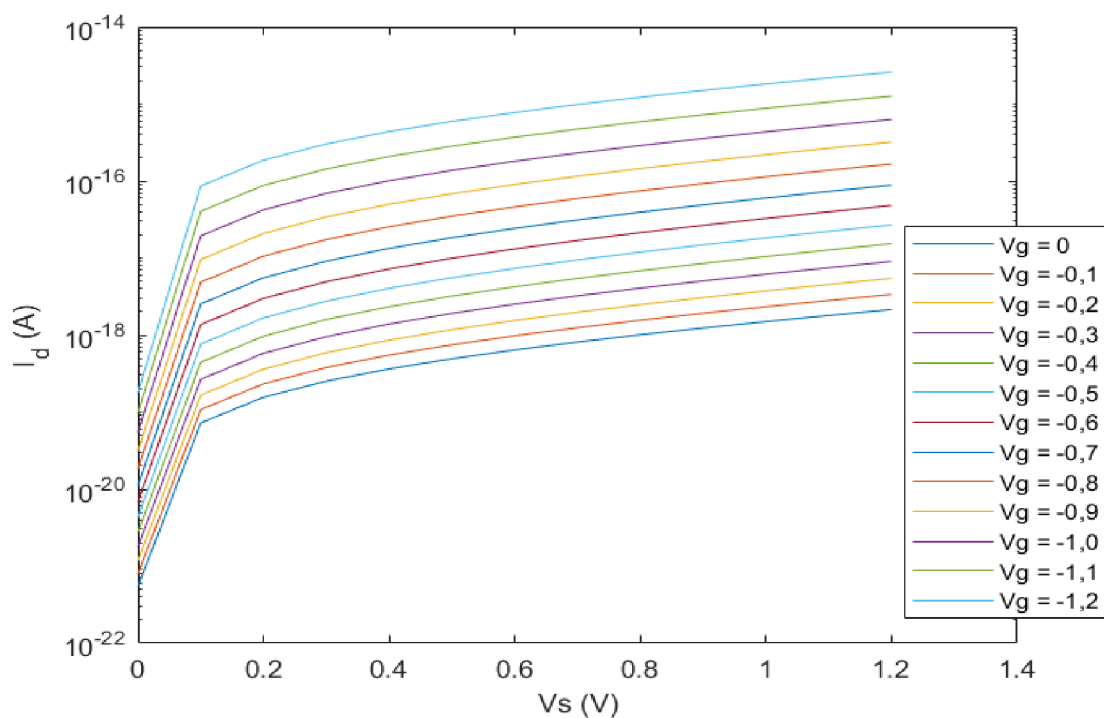
Obrázek 6.11: Elektronová hustota v transistoru při  $V_g = 0,6$  V a  $V_s = 0$  V.



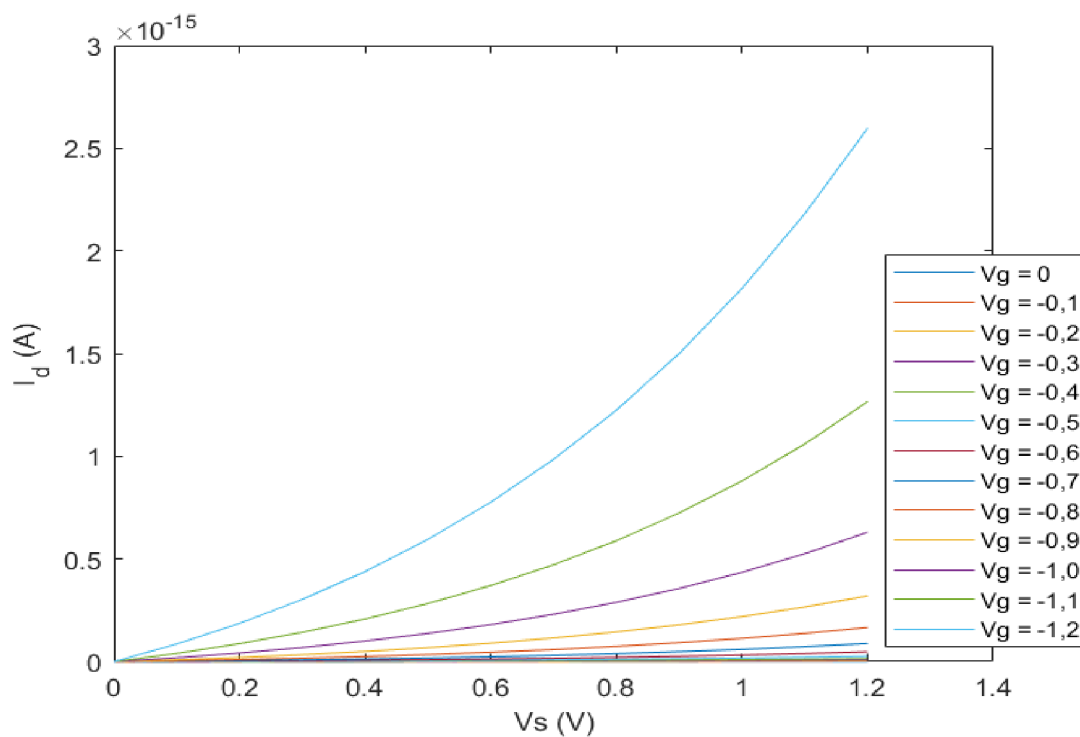
Obrázek 6.12: Elektronová hustota v transistoru při  $V_g = 1,2 \text{ V}$  a  $V_s = 0 \text{ V}$ .



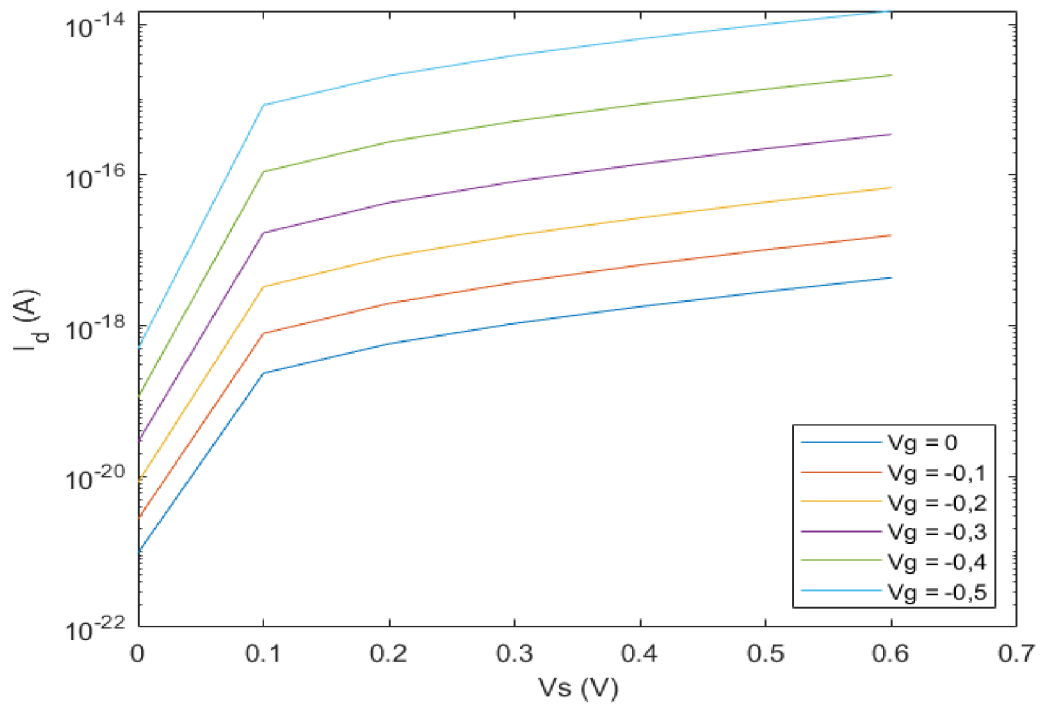
Obrázek 6.13: Elektronová hustota v transistoru při  $V_g = 0 \text{ V}$  a  $V_s = 0 \text{ V}$  při kladné permitivitě  $\varepsilon = 4$ .



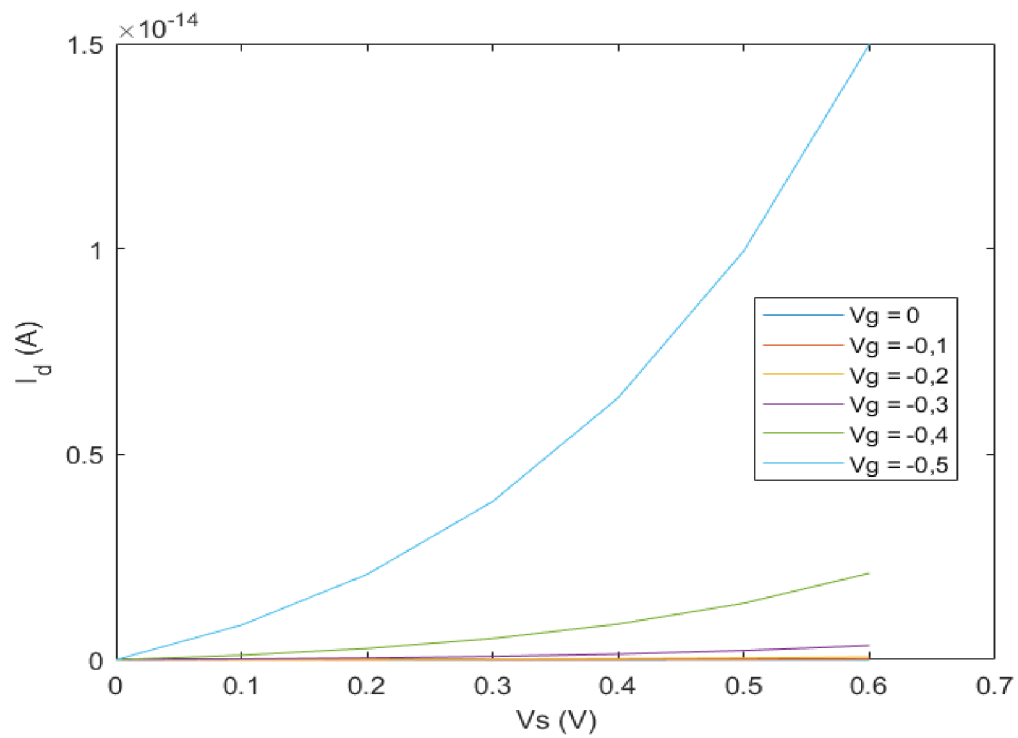
Obrázek 6.14: VA charakteristika pro  $\varepsilon = -2$  logaritmická škála.



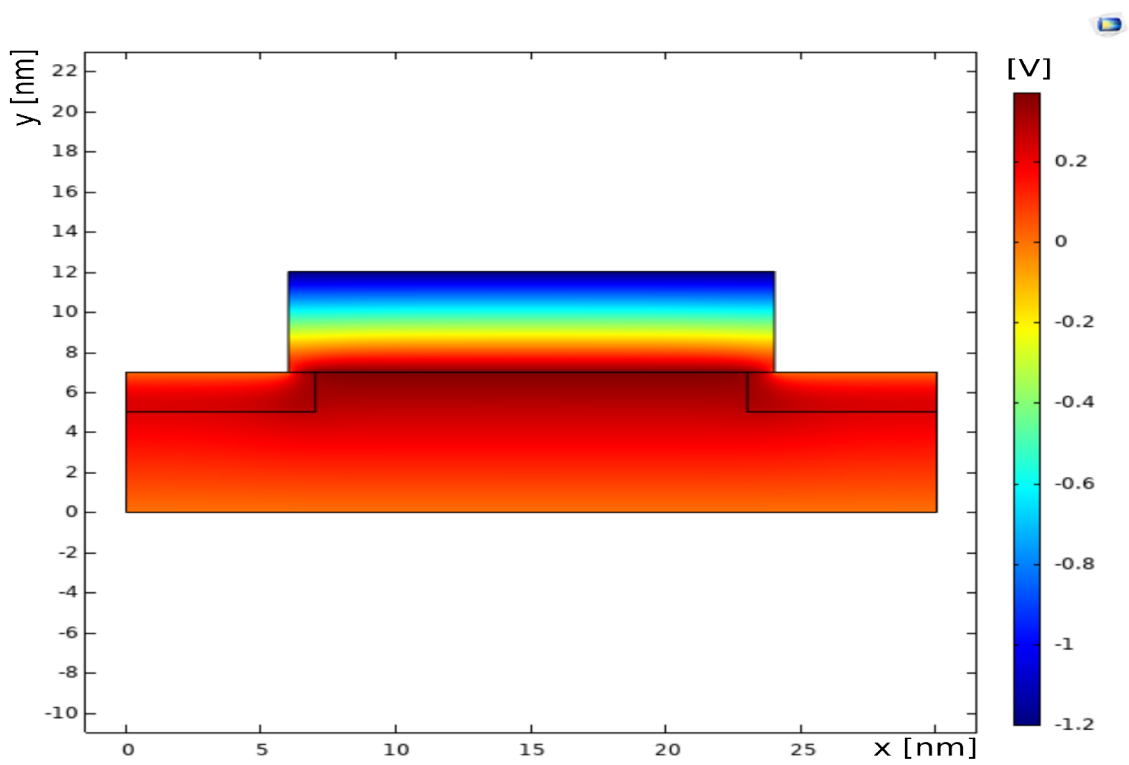
Obrázek 6.15: VA charakteristika pro  $\varepsilon = -2$  nelogaritmická škála.



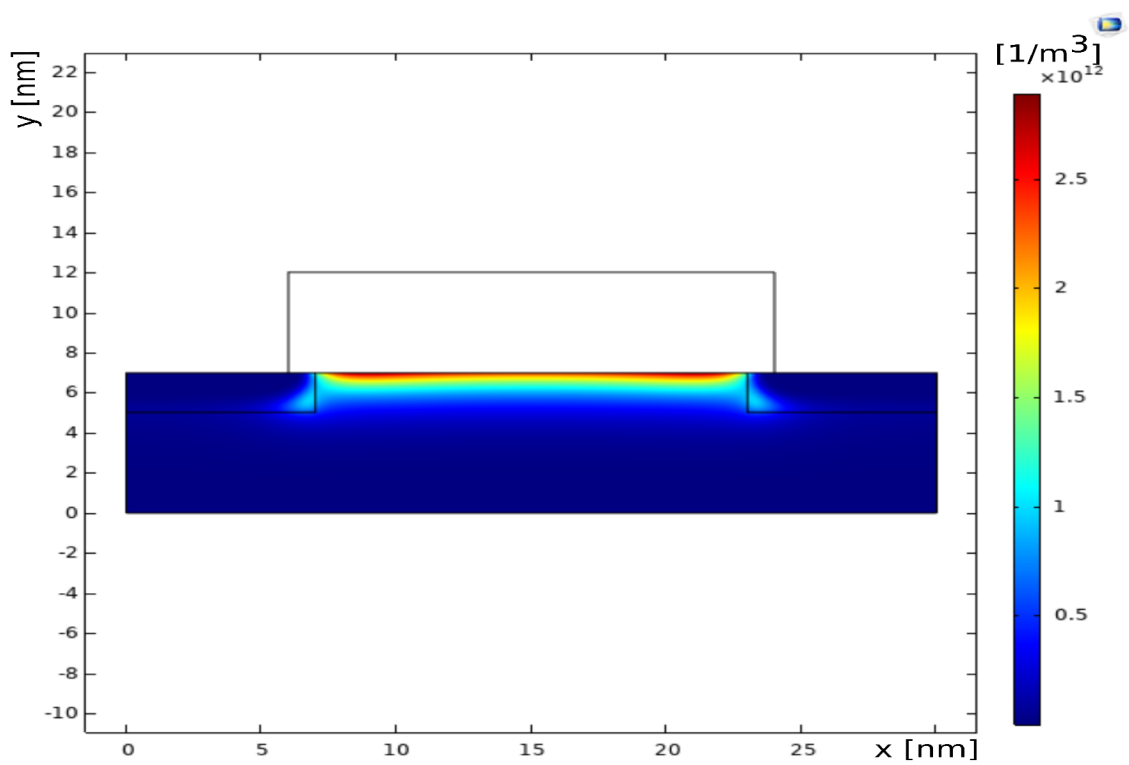
Obrázek 6.16: VA charakteristika pro  $\varepsilon = -4$  logaritmická škála.



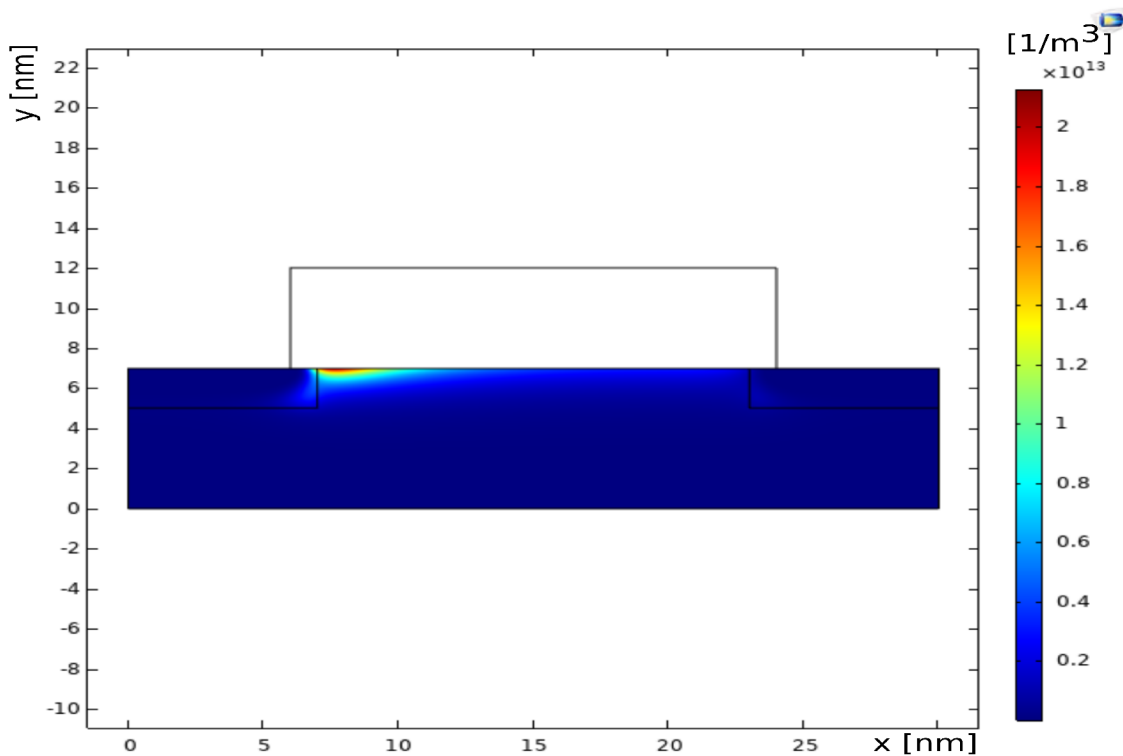
Obrázek 6.17: VA charakteristika pro  $\varepsilon = -4$  nelogaritmická škála.



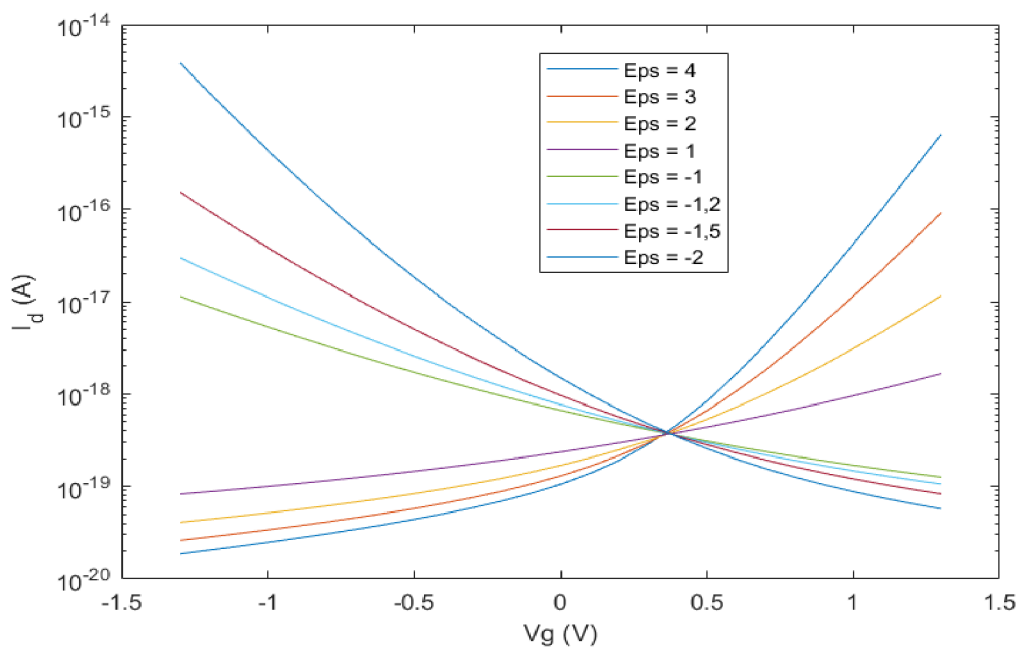
Obrázek 6.18: Elektrický potenciál při  $V_g = -1,2$  V a  $V_s = 0$  V pro zápornou permitivitu  $\epsilon = -2$ .



Obrázek 6.19: Elektronová hustota při  $V_g = -0,6$  V a  $V_s = 0$  V pro zápornou permitivitu  $\varepsilon = -2$ .

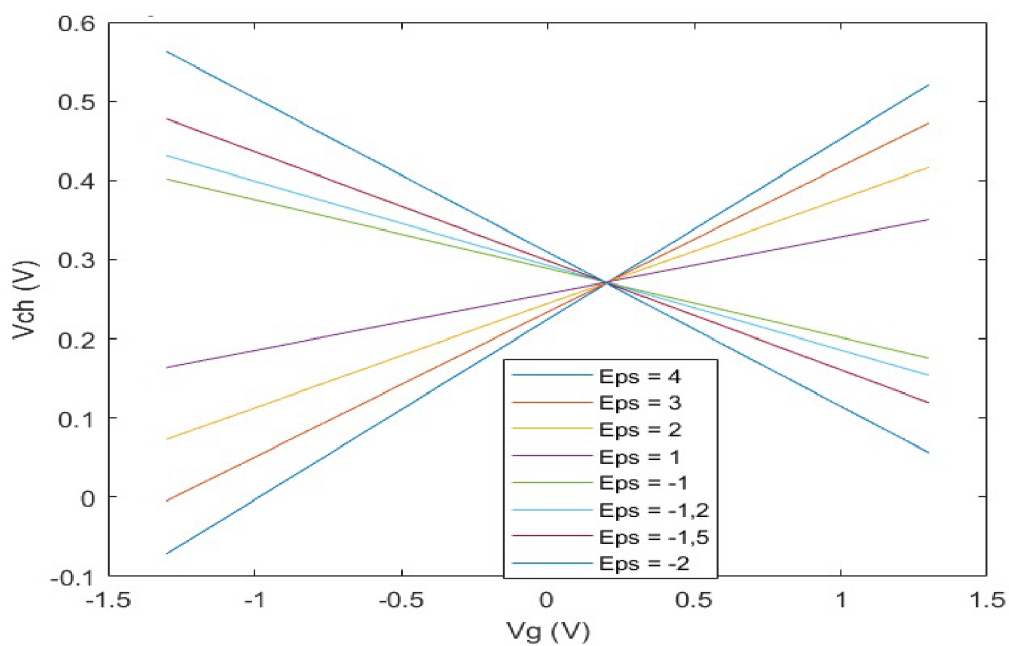


Obrázek 6.20: Elektronová hustota při  $V_g = -0,6$  V a  $V_s = 1,2$  V pro zápornou permitivitu  $\epsilon = -2$ .

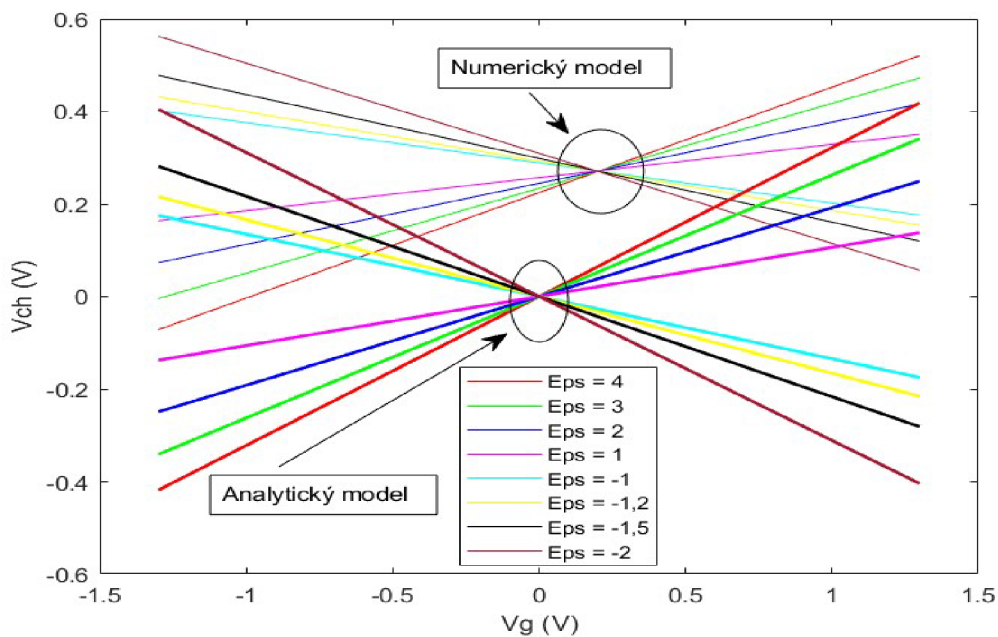


Obrázek 6.21: Závislost proudu do kolektoru v závislosti na napětí na hradle při různých permitivitách dielektrika na při  $V_s = 1$  V.

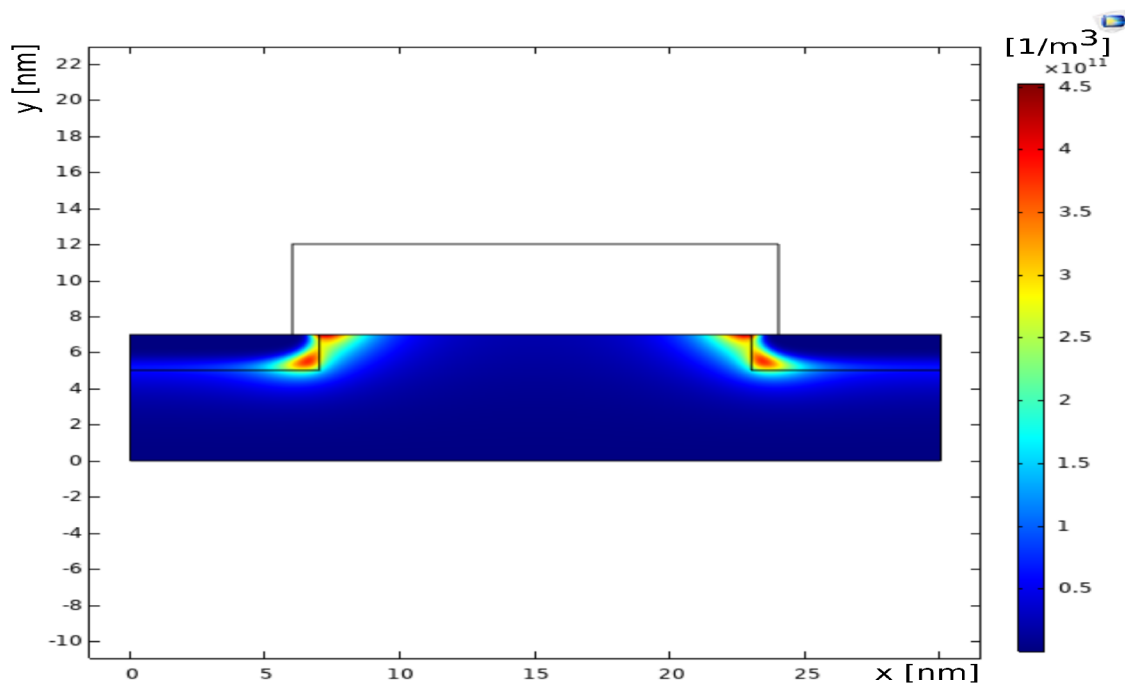




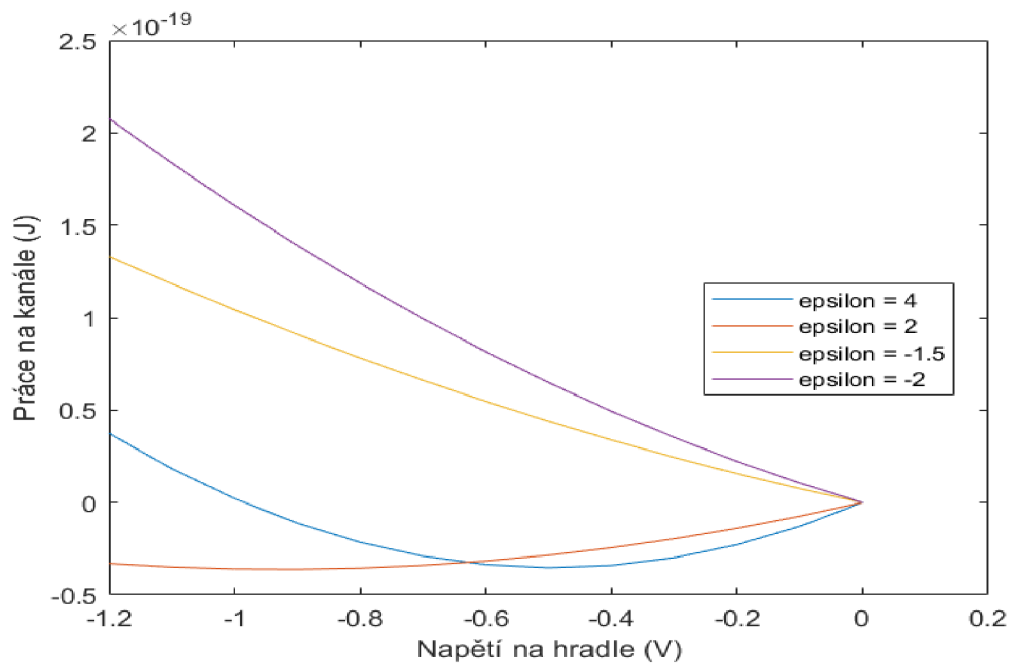
Obrázek 6.22: Závislost napětí na kanále v závislosti na napětí na hradle při různých permitivitách dielektrika.



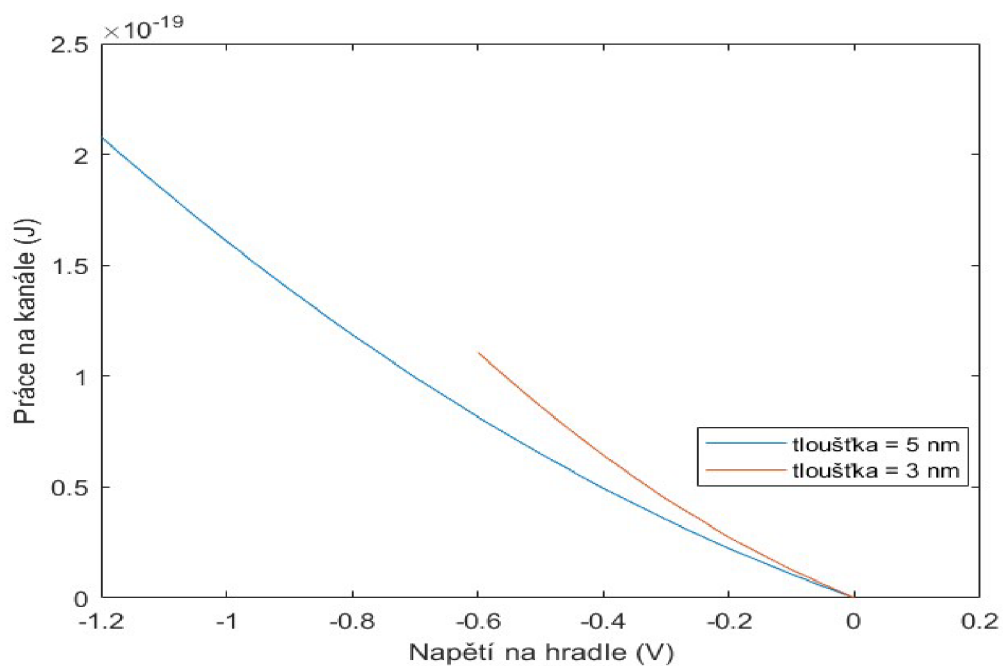
Obrázek 6.23: Porovnání závislostí napětí na kanále v závislosti na napětí na hradle při různých permitivitách dielektrika mezi výpočty z rovnic a výsledky ze simulace.



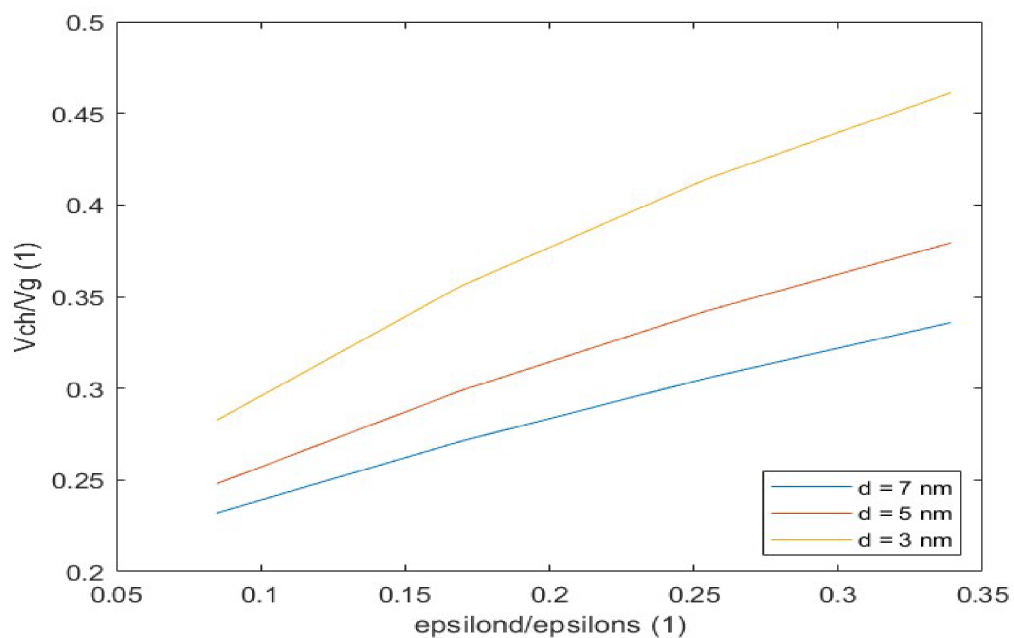
Obrázek 6.24: Elektronová hustota v transistoru při  $V_g = 0$  V a  $V_s = 0$  V při záporné permitivitě  $\epsilon = -4$ .



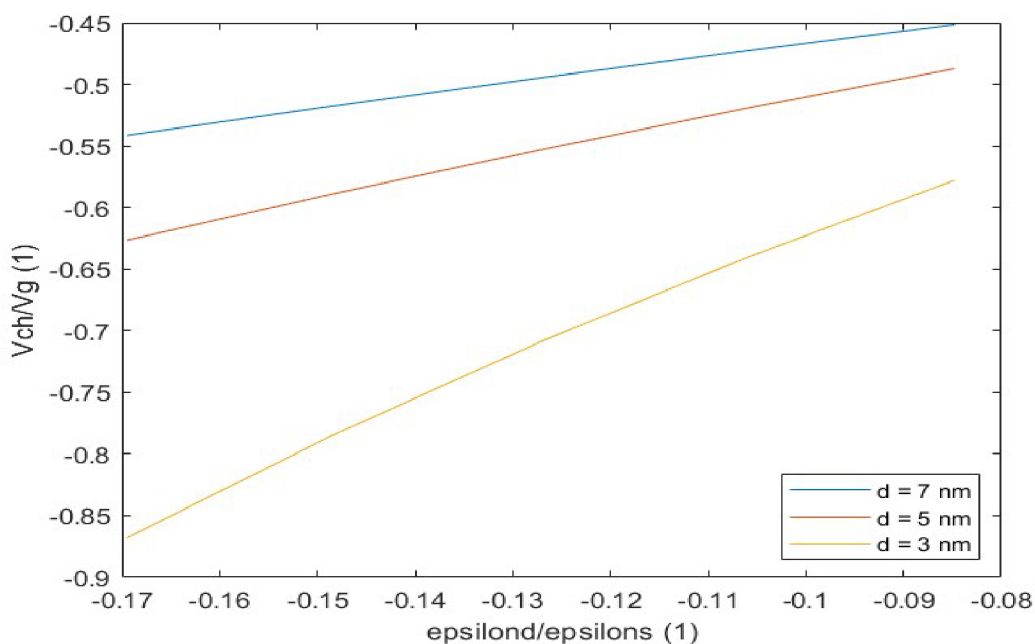
Obrázek 6.25: Závislost práce na kanále na napětí na hradle při různých permitivitách dielektrika.



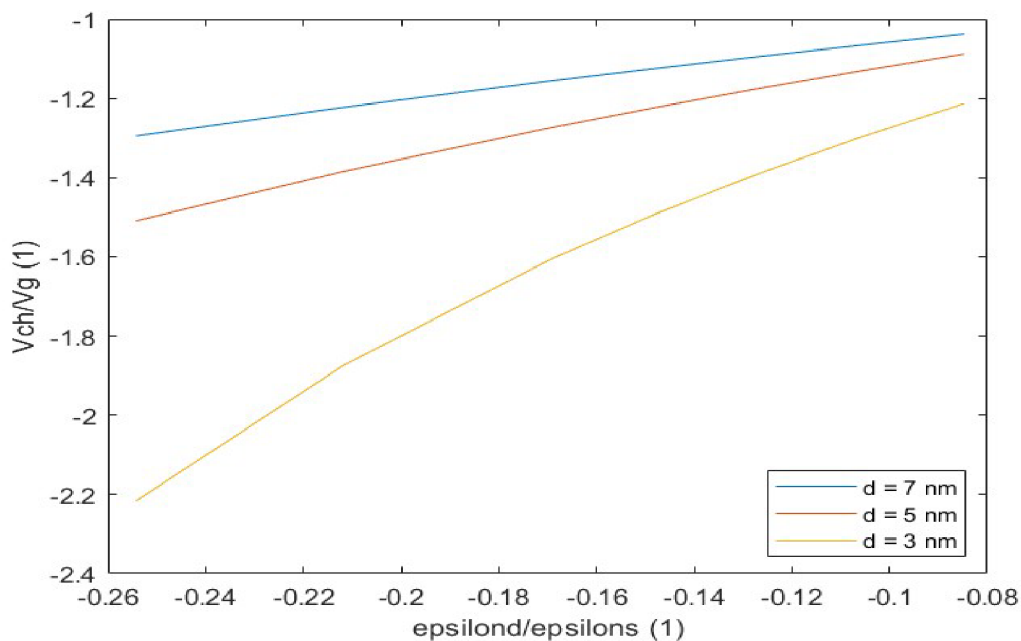
Obrázek 6.26: Závislost práce na kanále na napětí na hradle při různých tloušťkách dielektrika při  $\varepsilon = -2$ .



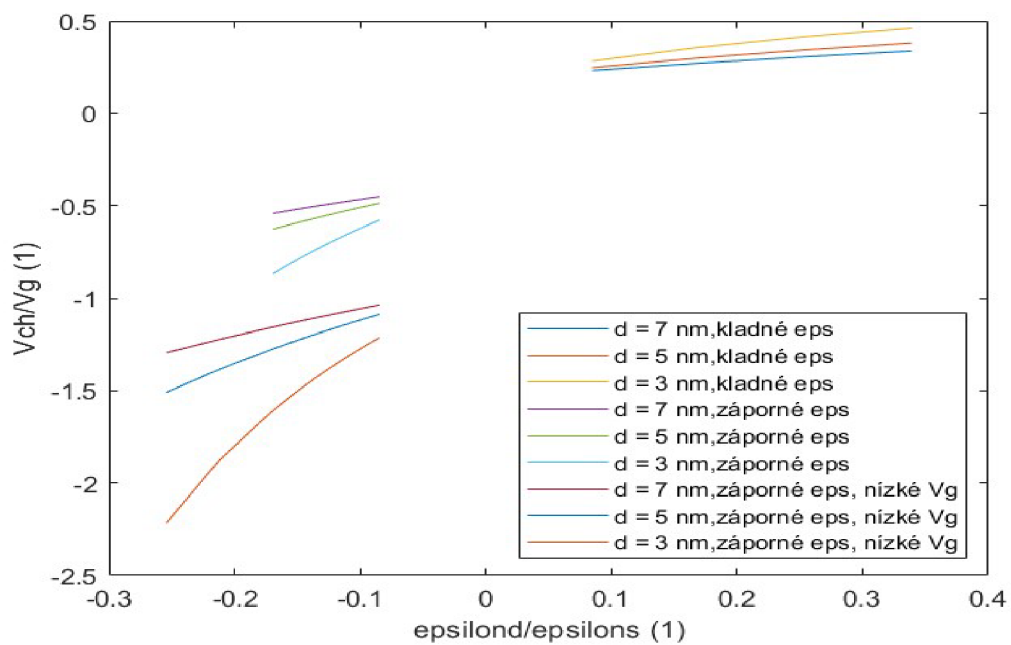
Obrázek 6.27: Podíl napětí na kanálu a na hradle v závislosti na podílu relativní permitivity dielektrika a křemíku při různých tloušťkách dielektrika při kladných permitivitách. Graf jsou spočítány pro  $s = 7$  nm.



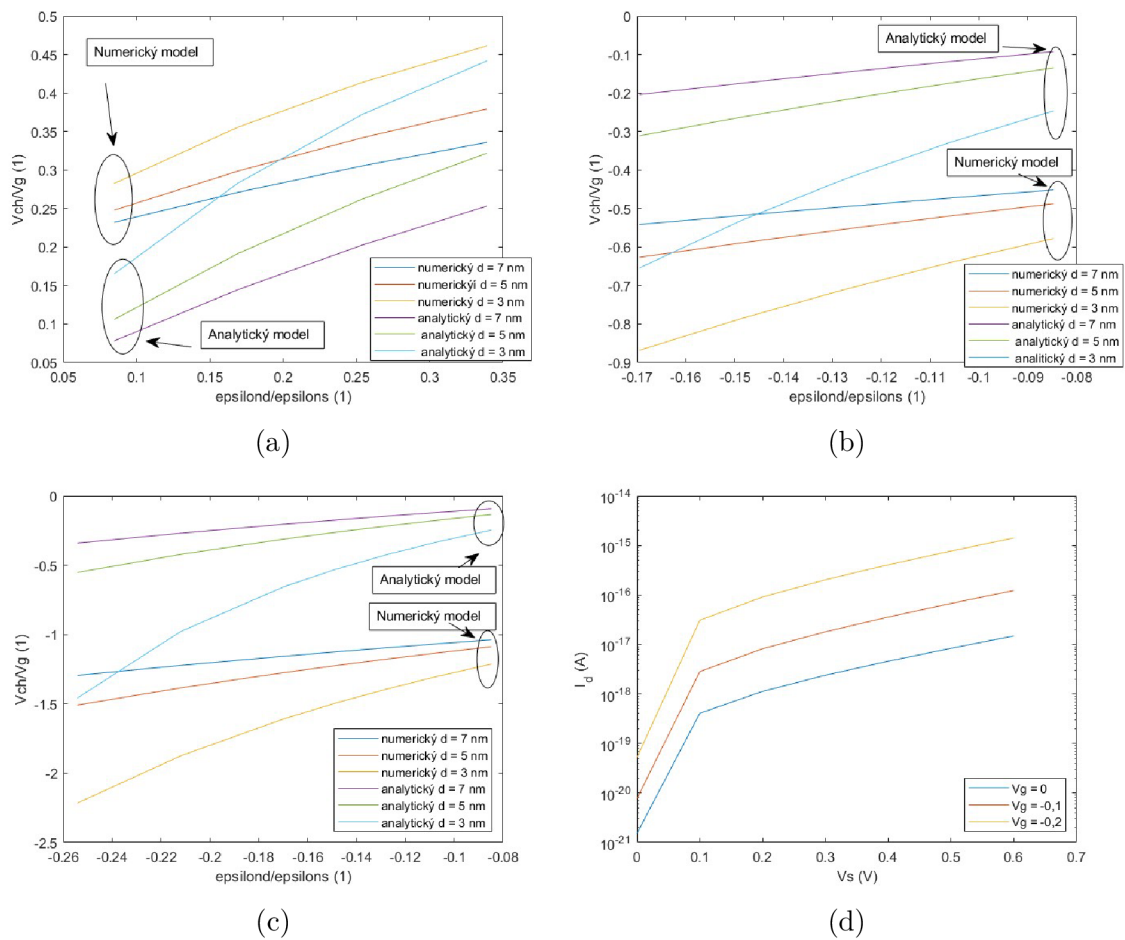
Obrázek 6.28: Podíl napětí na kanálu a na hradle v závislosti na podílu relativní permittivity dielektrika a křemíku při různých tlouškách dielektrika při záporných permittivitách. Graf jsou spočítány pro  $s = 7$  nm



Obrázek 6.29: Podíl napětí na kanálu a na hradle v závislosti na podílu relativní permittivity dielektrika a křemíku při různých tlouškách dielektrika při záporných permittivitách a nízké  $V_g$ . Graf jsou spočítány pro  $s = 7$  nm.



Obrázek 6.30: Podíl napětí na kanálu a na hradle v závislosti na podílu relativní permittivity dielektrika a křemíku při různých tloušťkách dielektrika ve všech předchozích případech. Graf jsou spočítány pro  $s = 7$  nm.



Obrázek 6.31: Porovnání výsledků z numerického a analytického modelu a) Porovnání výsledků zesílení pro kladné permitivity. b) Porovnání výsledků zesílení pro záporné permitivity. c) Porovnání výsledků zesílení pro záporné permitivity a nízké napětí  $V_g$ . d) Voltampérová charakteristika transistoru při nízkých hodnotách  $V_g$  a velkém zesilování. Grafy jsou spočítány pro  $s = 7$  nm.

## 7 Výsledky modelování MOSFETu s feroelektrickou vrstvou

### 7.1 Model nanodoménového feroelektrika

Tato kapitola se zabývá numerickým modelem feroelektrika. Nejprve jsou popsány rovnice, které model využívá, a poté jsou ukázány výsledky, kterých bylo dosaženo s využitím popsaného modelu.

Feroelektrický model sdílí geometrické uspořádání s dielektrickým modelem na obrázku 5.2. Dielektrická vrstva je nahrazena vrstvou feroelektrickou a elektroda hradla zabírá pouze část vrchní vrstvy feroelektrika. Upravený model je na obrázku 7.1. Zásadní změna je v rovnici pro výpočet elektrostatické síly. Rovnice pro dielektrikum je popsána rovnicí (5.25), ale ve feroelektriku nabývá tvaru:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left( -\varepsilon_0 \varepsilon_B \frac{\partial \varphi}{\partial x} - \frac{\partial \varphi}{\partial x} \alpha_{11} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( -\varepsilon_0 \varepsilon_B \frac{\partial \varphi}{\partial y} + P_3 \right) = 0, \quad (7.1)$$

kde  $\varepsilon_B$  je vlastní permitivita materiálu feroelektrika bez feroelektrických vlastností a  $\alpha_{11}$  je Landauův koeficient popisující feroelektrické vlastnosti ve směru  $x$  a  $P_3$  je polarizace feroelektrika ve směru  $y$ . Časová závislost  $P_3$  se vypočítá pomocí Landau-Khalatnikovovy (LK) rovnice:

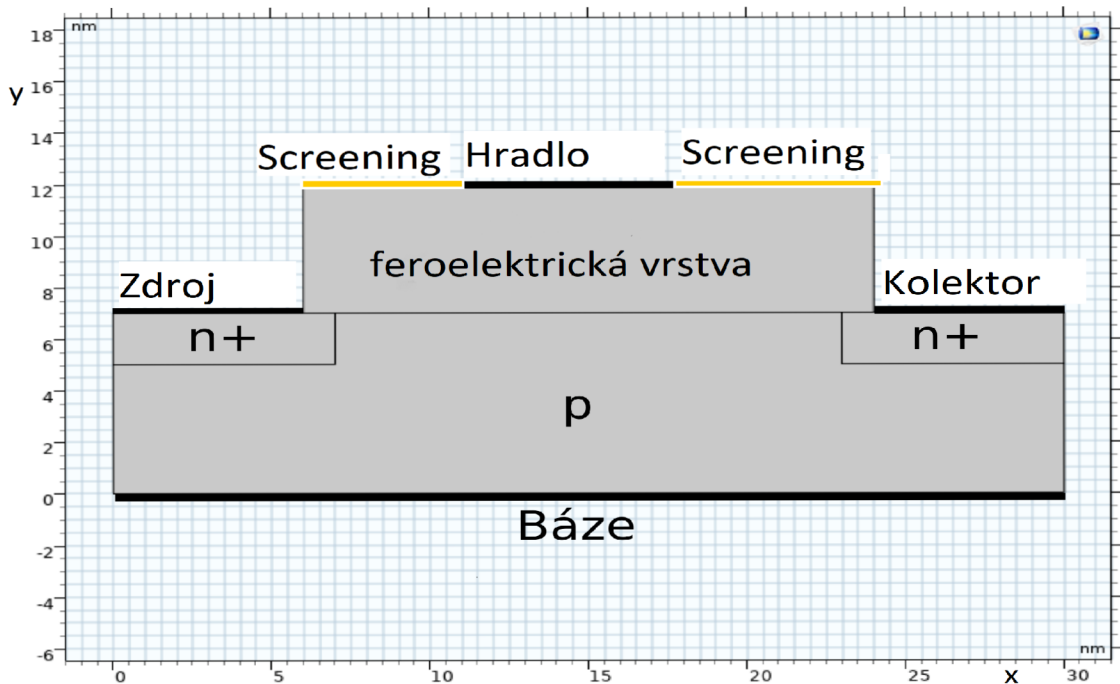
$$\frac{1}{\Lambda} \frac{\partial P_3}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \left( -G_{44} \frac{\partial P_3}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( -G_{33} \frac{\partial P_3}{\partial y} \right) = -\alpha_{3333} P_3^3 - \alpha_{33c} (T - T_c) P_3 - \frac{\partial P_3}{\partial y}, \quad (7.2)$$

kde  $\Lambda$ ,  $G_{44}$ ,  $G_{33}$ ,  $\alpha_{3333}$ ,  $\alpha_{33c}$  jsou experimentálně zjištěné LK parametry pro oxid hafničitý,  $T_c$  je Curieho teplota a  $T$  je teplota krystalické mřížky. Počáteční podmínka pro tuto rovnici je  $0,8 P_{30}$ , kde  $P_{30}$  je hodnota spontánní polarizace. Okrajové podmínky pro rovnici LK jsou na všech okrajích feroelektrika stejné, platí na nich Neumannova podmínka nulového toku. Okrajové podmínky pro elektrické napětí jsou shodné s dielektrickým modelem, ale navíc je zde podmínka screeningu. Na horním okraji feroelektrika, kde není elektroda, je okrajová podmínka screeningu, která působí proti polarizaci ve feroelektriku a brání vytvoření vnitřního depolarizačního elektrického pole, které by působilo proti účinkům polarizace. Má tvar:

$$-n \cdot (-c \nabla \varphi) = -P_{30}. \quad (7.3)$$

Hodnoty použitých parametrů jsou v tabulce 7.1. Parametry byly převzaty z (Eliseev et al., 2022).





Obrázek 7.1: Geometrie modelu MOSFETu s feroelektrickou vrstvou.

Tabulka 7.1: Materiálové parametry feroelektrika oxidu hafničitého

konstanta	značení	hodnota	jednotka
Curieho teplota	$T_c$	334	K
teplota mřížky	$T$	300	K
spontánní polarizace	$P_{30}$	0,07598	C/m <sup>2</sup>
Landauův parametr $\Lambda$	$\Lambda$	40000	S/m
Ginzburgův parametr $G_{33}$	$G_{33}$	$2,5 \times 10^{-10}$	kg · m / (s · A <sup>2</sup> )
Ginzburgův parametr $G_{44}$	$G_{44}$	$2,5 \times 10^{-10}$	kg · m / (s · A <sup>2</sup> )
vlastní permitivita feroelektrika	$\varepsilon_B$	7,5	1
Landauův parametr $\alpha_{33c}$	$\alpha_{33c}$	$1,72 \times 10^6$	kg · m <sup>3</sup> / (s · A <sup>2</sup> · K)
Landauův parametr $\alpha_{3333}$	$\alpha_{3333}$	$1,013 \times 10^{10}$	kg · m / (s · A)
Landauův parametr $\alpha_{11}$	$\alpha_{11}$	$1,1696 \times 10^8$	kg · m <sup>3</sup> / (s · A <sup>2</sup> )

Výpočet LK rovnice probíhá pouze ve feroelektriku. Nepodařilo se vytvořit stabilní numerický model tranzistoru zahrnující časový vývoj doménové struktury feroelektrika a volných nosičů náboje v polovodiči.

## 7.2 Vytvořené doménové struktury

Simulace s feroelektrikem byly prováděny v mnoha různých geometrických konfiguracích. Tloušťka feroelektrika se pohybovala mezi 1 a 10 nm a délka elektrody přivádějící napětí na hradlo byla simulována v rozmezí 1 až 6 nm. Při všech následujících simulacích dosahovalo maximální napětí hodnoty 0,7 V. Při vyšších napětích dochází k zániku nanojaderné struktury a celé feroelektrikum přejde na stejnou polarizaci, vytvoří tedy jedinou doménu v celé oblasti, takže se ztratí jakékoli zesílení napětí na kanále.

Na obrázku 7.2a je zobrazena vzniklá doménová struktura při tloušťce feroelektrika 5 nm a délce elektrody 3 nm. Světle modrá barva značí hodnoty kolem 0, to znamená, že tam dochází ke změně polarizace, a to znamená, že jde o doménovou stěnu. Jak je vidět, doménová stěna zabírá podstatnou část celého feroelektrika. Na obrázku 7.2b je zobrazena struktura, která vznikne, když je elektroda dlouhá 6 nm za tloušťky dielektrika 5 nm. Doménový zárodek vytvořený elektrodou za této situace prorůstá skrze celou tloušťku feroelektrika.

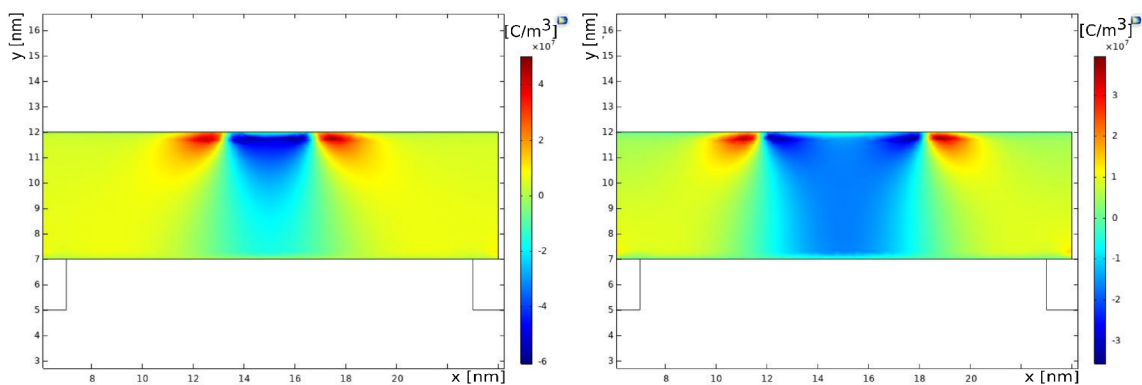
Na obrázku 7.2c je zobrazena struktura při tloušťce feroelektrika 10 nm a je na ní pozorovatelné, že doména vytvořená elektrodou dosahuje i na tuto vzdálenost, ale čím je dále od svého zdroje (elektrody), tím větší část zabírá doménová stěna. Při velice krátké elektrodě, zobrazené na obrázku 7.2d, dochází ke vzniku velmi malé domény, která nepronikne až k druhému okraji feroelektrika a zabalí se do kruhové doménové stěny.

## 7.3 Numerické simulace tranzistoru s feroelektrikem

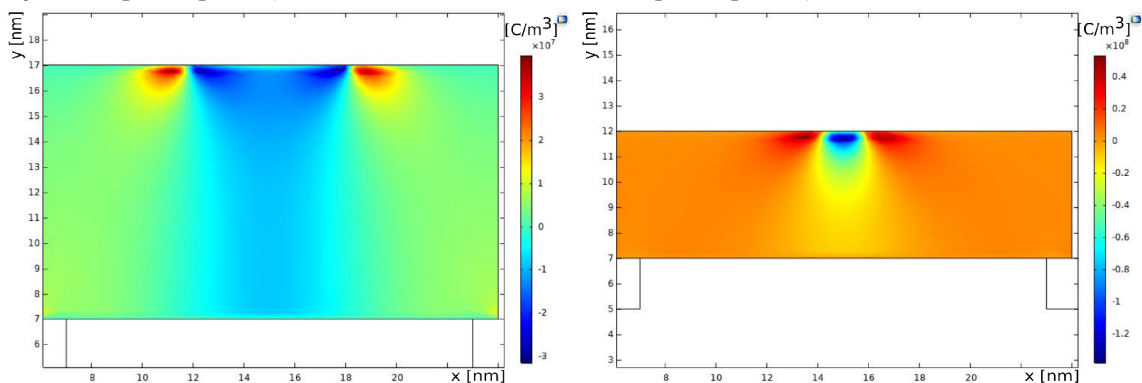
Z numerických důvodů se řeší pouze elektrostatický potenciál a polarizace feroelektrika  $P_3$ . Nasimulované proudy nejsou porovnatelné s dielektrickým modelem. Na obrázku 7.3, je zaznamenána závislost napětí na kanále na napětí na hradle pro tloušťky feroelektrické vrstvy 2 až 15 nm s délkami elektrod v rozmezí 1 až 6 nm. Křivka má stejný průběh pro všechny zmíněné geometrické konfigurace. V žádném z těchto případů nedochází k vytvoření záporné kapacity. Poměr napětí  $V_{ch}/V_g$  je ve všech případech přes 0,85.

### 7.3.1 Diferenciální zesílení ve feroelektriku s tloušťkou přes 50 nm

Ve feroelektriku s tloušťkou mezi 2 až 15 nm se pro oxid hafničitý nepodařilo dosáhnout požadovaného zvýšení poměru  $V_{ch}/V_g$ . Ale při simulaci s tloušťkou feroelektrické vrstvy přes 50 nm se podařilo vytvořit zápornou kapacitu. Všechny následující

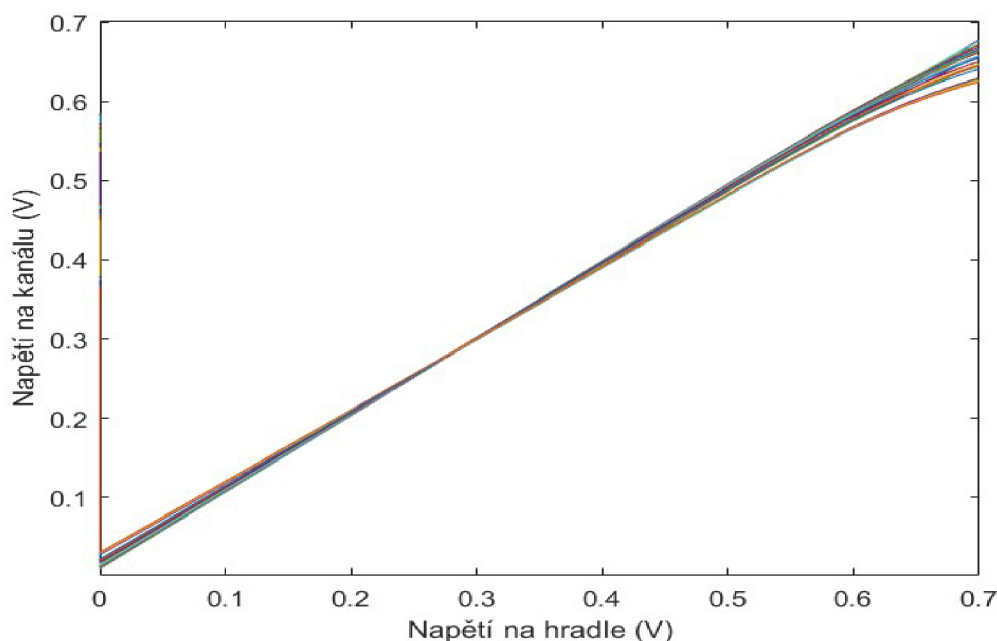


(a) Nanodoménová struktura vzniklá při tloušťce ferroelektrika 5 nm a délce elektrody 3 nm při napětí 0,7 V na elektrodě. (b) Nanodoménová struktura vzniklá při tloušťce ferroelektrika 5 nm a délce elektrody 6 nm při napětí 0,7 V na elektrodě.



(c) Nanodoménová struktura vzniklá při tloušťce ferroelektrika 10 nm a délce elektrody 6 nm při napětí 0,7 V na elektrodě. (d) Nanodoménová struktura vzniklá při tloušťce ferroelektrika 5 nm a délce elektrody 1 nm při napětí 0,7 V na elektrodě.

Obrázek 7.2: Nanodoménové struktury při různých tloušťkách dielektrika a různých rozměrech elektrody.



Obrázek 7.3: Napětí na kanále v závislosti na napětí na hradle pro různé geometrické konfigurace.

grafy a popisy se týkají simulace, při které mělo feroelektrikum tloušťku 100 nm, protože na něm je tento jev velice dobře viditelný. Na grafu na obrázku 7.4a je zobrazena závislost napětí na kanále na napětí na hradle a na něm jasně patrné místo, kde došlo k zesílení napětí na kanále. Toto místo je zvětšeno na obrázku 7.4b. Zatímco napětí na hradle vzroste o 0,001 V z 0,831 V na 0,832 V, napětí na kanálu vzroste o 0,07 V z 0,66 V na 0,73 V, což znamená, že tomto bodě dochází k diferencnímu zesílení napětí na kanále. V tomto bodě dochází k 70krát větší změně v napětí na kanále oproti napětí na hradle.

Na obrázku 7.4c je zobrazen proud na kanále v závislosti na napětí na hradle a je na něm vidět, že v místě zesílení dochází k obrovskému kmitu elektrického proudu, kdy na malý moment teče elektrický proud dokonce opačným směrem. A na obrázku 7.4d je zobrazena závislost práce na kanále a opět je vidět podstatná změna přesně ve stejném místě jako na předchozích grafech. Práce se ve feroelektriku počítá jako  $W = QV_{Ch}$ , kde  $V_{Ch}$  je napětí na kanále a  $Q$  je elektrický náboj na elektrodě hradla.  $Q$  se rovná:

$$Q = \int_a^b \left( \frac{\partial \phi}{\partial y} \left( -\varepsilon_0 \varepsilon_b + \frac{1}{\alpha_{11}} \right) \right) L dx, \quad (7.4)$$

kde  $(b - a)L$  je plocha elektrody a  $L = 1/(b - a) \text{ m}^2$ .

Na obrázku 7.5a je zobrazena doménová struktura před bodem zesílení a na obrázku 7.5b je zobrazena doménová struktura za bodem zesílení. Mezi těmito zaznamenanými body došlo ke kolapsu domény a její hroucení zafungovalo jako negativní kapacita, která byla příčinou značného nárůstu napětí na kanále.

Pomocí rovnice:

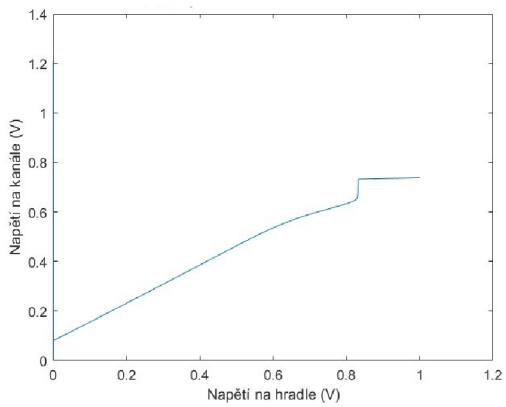
$$C_f = \frac{Q_g}{V_g - V_{ch}}, \quad (7.5)$$

se dá spočítat kapacita feroelektrika, k výpočtu diferenční kapacity je potřeba rovnici převést do tvaru:

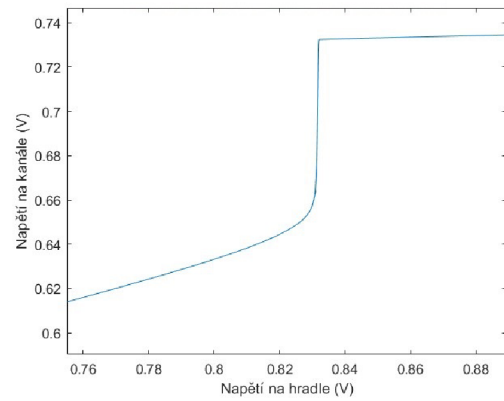
$$C_f = \frac{\Delta Q}{\Delta(V_g - V_d)}. \quad (7.6)$$

Na obrázku 7.6a je zobrazena diferenční kapacita feroelektrika a na obrázku 7.6b je v detailu zobrazeno místo, ve kterém dochází k negativní kapacitě. Toto místo přesně odpovídá bodu, kde dochází k zesílení. V důsledku zhroucení domény dochází podle simulace ke kmitnutí kapacity, nejprve se prudce zvýší a poté klesne do záporných hodnot a následně se vytvoří nová rovnovážná situace, nyní již bez feroelektrické domény.

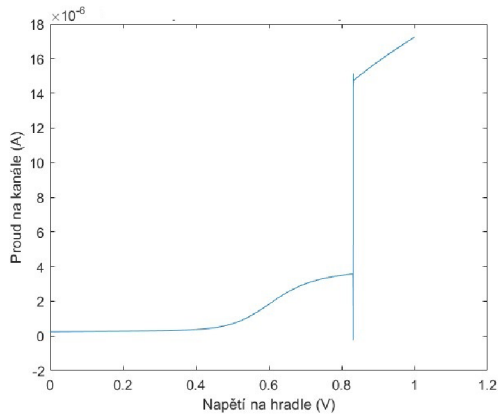
Na obrázku 7.7 je zobrazena závislost náboje na hradle na rozdílu napětí mezi hradlem a kanálem, tedy napětí přes feroelektrickou vrstvu. V místě, kde se křivka vrací zpět, dochází k záporné kapacitě ve feroelektriku.



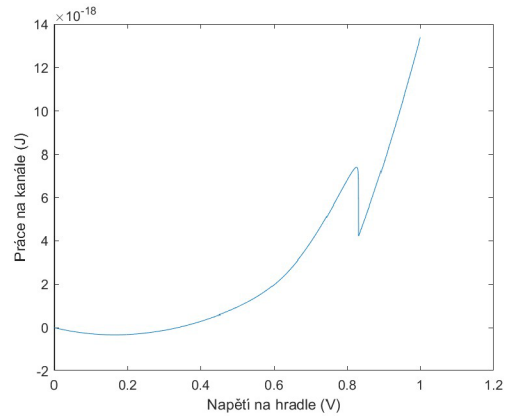
(a) Závislost napětí na kanále na napětí na hradle s diferenciálním zesílením.



(b) Oblast diferenciálního zesílení v detailu.

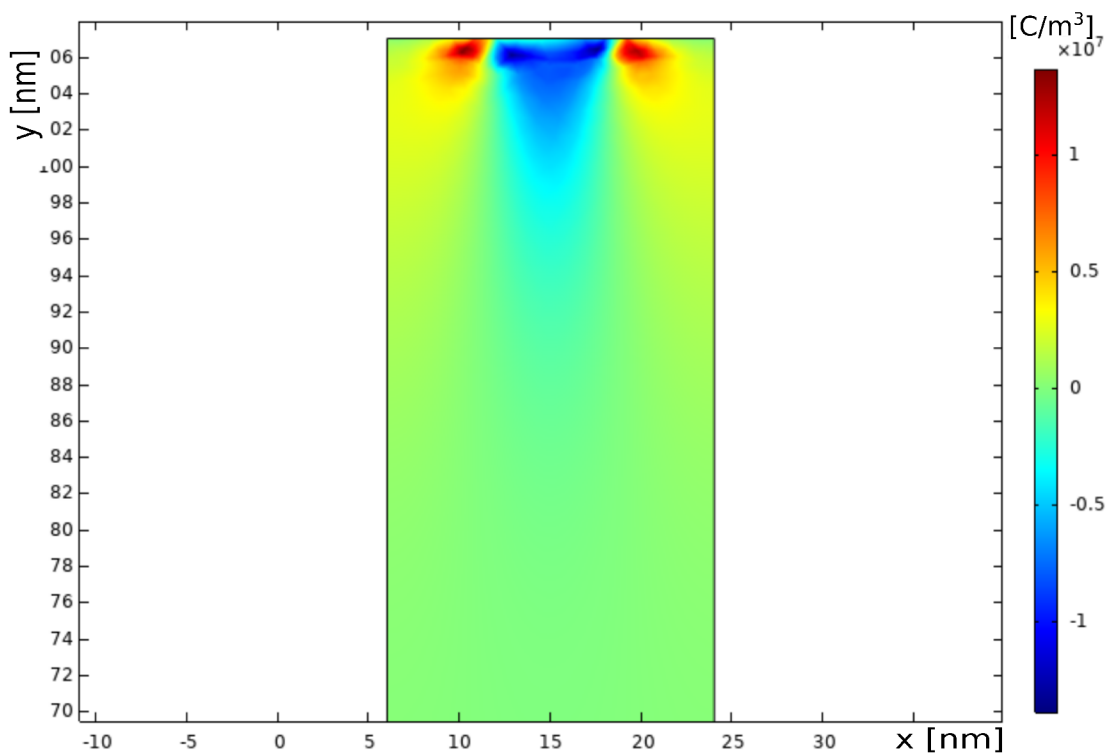


(c) Závislost proudu na kanále na napětí na hradle se zesílením.

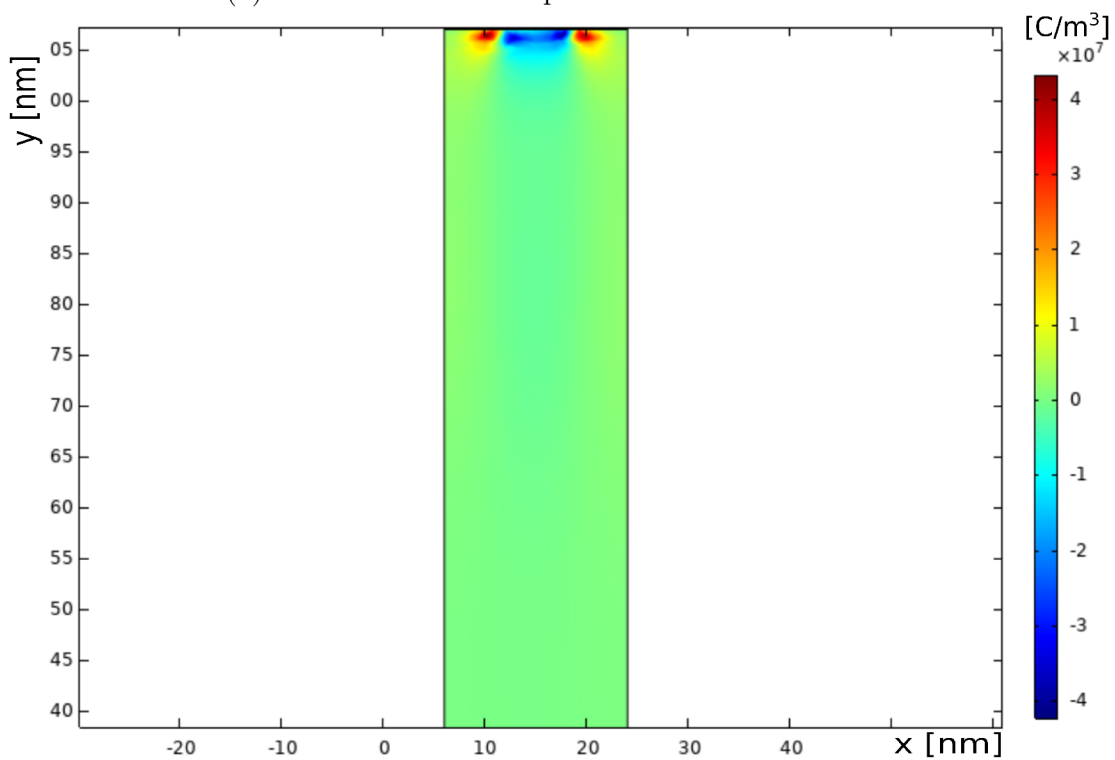


(d) Závislost práce na kanále na napětí na hradle se zesílením.

Obrázek 7.4: Vlastnosti transistoru s ferroelektrikem o tloušťce 100 nm.

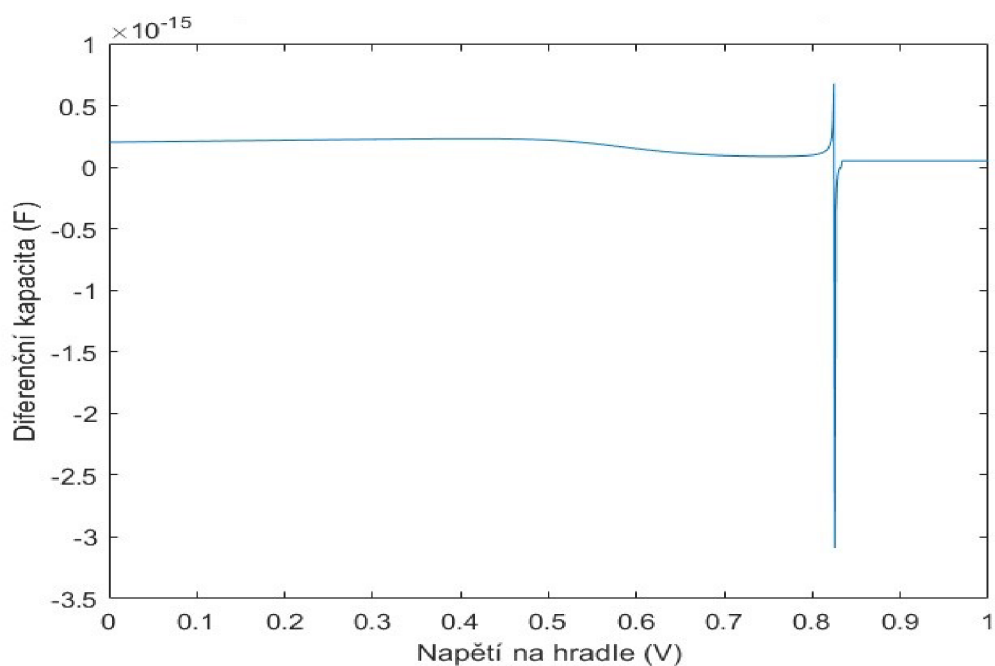


(a) Doménová struktura před diferenciálním zesílením.

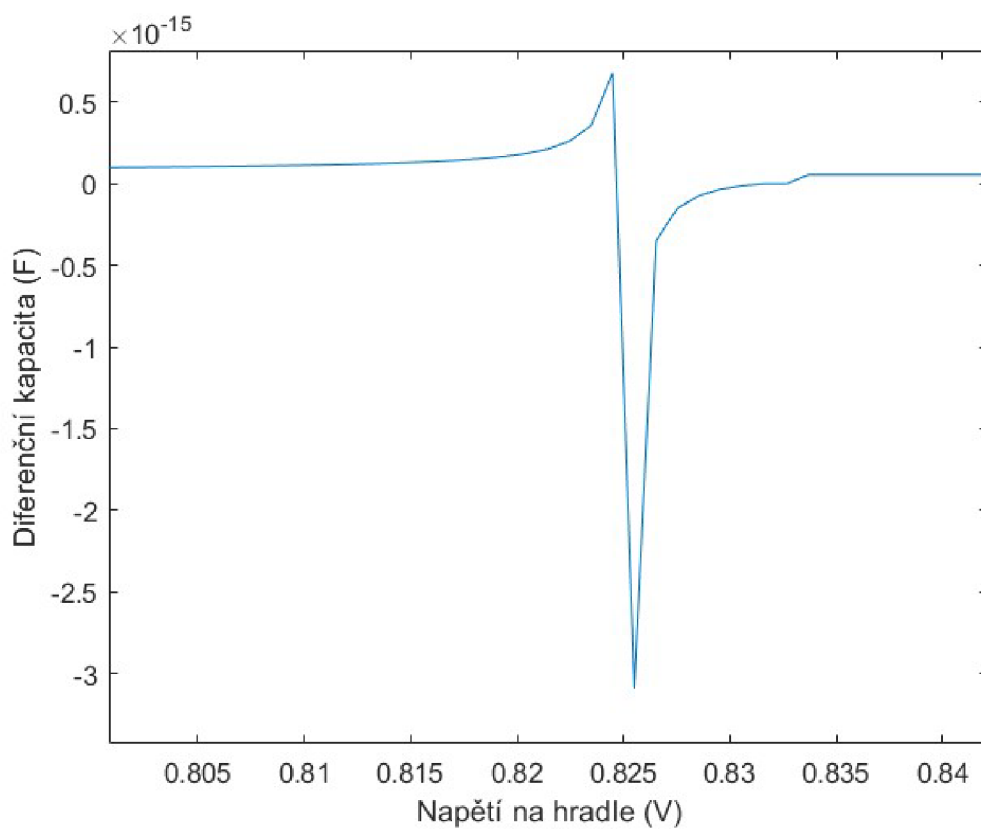


(b) Doménová struktura při diferenciálním zesílení.

Obrázek 7.5: Doménové struktury před a po zesílení.



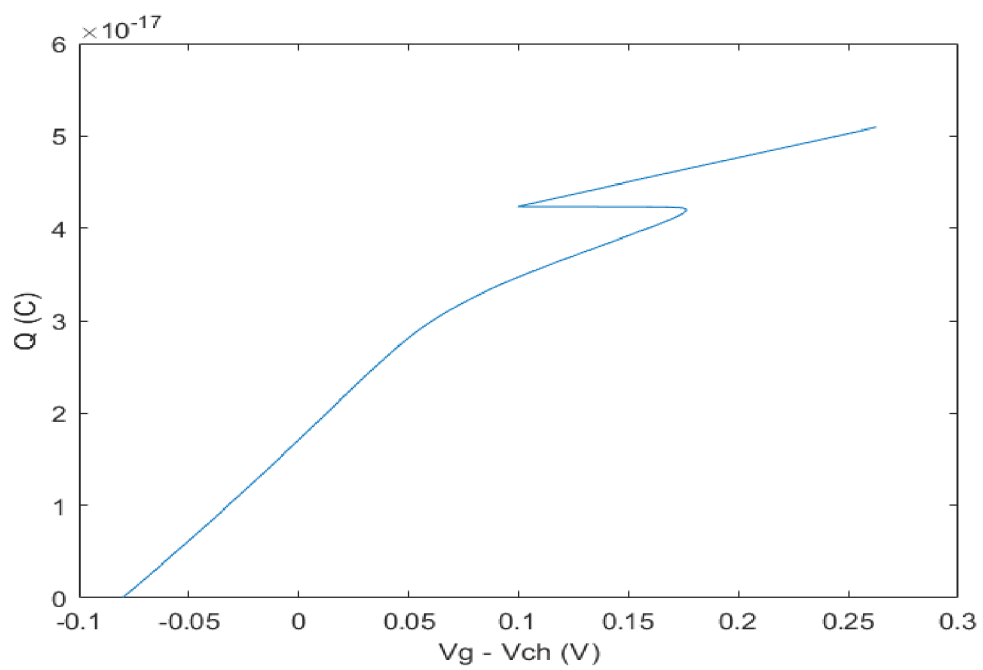
(a) Diferenční kapacita feroelektrika v závislosti na napětí na hradle.



(b) Detail diferenční kapacity v bodě se zápornou kapacitou.

Obrázek 7.6: Graf diferenční kapacity pro feroelektrikum s tloušťkou 100 nm.





Obrázek 7.7: Závislost náboje na hradle na rozdílů napětí mezi hradlem a kanálem.

## 8 Závěr

V teoretické části byly popsány základy polovodičů, transistorů, feroelektrik a principy záporné kapacity. Dále je v této části popsán analytický model, který předpovídá zesílení napětí na kanále transistoru pomocí modelu dvou sériově zapojených kondenzátorů. S pomocí tohoto modelu jsou zde popsány podmínky pro stabilitu záporné permitivity ve feroelektrické vrstvě v dvojvrstvě feroelektrikum-dielektrikum.

V praktické části je popsán numerický model transistoru, jehož výsledky pro dielektrika s kladnou permitivitou odpovídají chování reálných transistorů podobné velikosti a konstrukce a to včetně vytváření vyprázdněné oblasti u dielektrické vrstvy a následného vzniku vodivého kanálu mezi nadopovanými oblastmi u zdroje a u kolektoru.

Na numerickém modelu byly provedeny simulace pro transistor s hypotetickou dielektrickou vrstvou se zápornou permitivitou. V těchto simulacích byly prozkoumány vlastnosti a chování záporné kapacity a hlavně její vliv na funkčnost celého transistoru. Ukázalo se, že obecně při větší absolutní hodnotě permitivity dochází k většímu poměru napětí na kanále ku napětí na hradle a také, že menší tloušťka dielektrické vrstvy má podobný účinek. Podařilo se vytvořit simulaci, ve které dochází k reálnému zesílení mezi napětím na hradle a na kanále, tedy, že napětí na kanále je větší než napětí na hradle.

Při porovnávání předpovědí z analytického modelu a výsledků z numerického modelu se ukázalo, že přítomnost volných nosičů nábojů ovlivňuje elektrická pole v transistoru a že jednoduchý analytický model sériového zapojení dvou kondenzátorů, které se často ve vědecké literatuře používá, je pro přesný návrh tranzistoru nepoužitelný.

Nepodařilo se zatím vytvořit numericky stabilní model transistoru s feroelektrickou vrstvou, který by současně řešil časový vývoj doménové struktury a pohyb volných nosičů náboje. Na vytvoření takového modelu se dále pracuje. V simulacích s feroelektrickou vrstvou se řeší pouze elektrostatika a doménová struktura feroelektrika. Proto také nebylo možné přímo porovnat výsledky mezi simulacemi s dielektrickou vrstvou a simulacemi s feroelektrickou vrstvou.

Na numerickém modelu byly prováděny simulace dielektrického modelu tranzistoru s feroelektrickou vrstvou, ve které je nanodoménový zárodek. V tenkých (2-15 nm) feroelektrických vrstvách nedochází ke vzniku záporné kapacity. Ale v simulacích s tloušťkou feroelektrika přes 50 nm se podařilo prokázat přítomnost negativní diferenciální kapacity a nasimulovat prudké změny doménové struktury v oblasti se zápornou kapacitou.

## Použitá literatura

- ALAM, Muhammad A., Mengwei SI a Peide D. YE, 2019. A critical review of recent progress on negative capacitance field-effect transistors. *Applied Physics Letters*. Roč. 114, č. 9. ISSN 0003-6951. Dostupné z DOI: [10.1063/1.5092684](https://doi.org/10.1063/1.5092684). 090401.
- Band gap comparison*, [b.r.] [online]. [cit. 2023-05-11]. Dostupné z: [https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Band\\_gap\\_comparison.svg](https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Band_gap_comparison.svg).
- BANERJEE S., Streetman B., 2006. *Solid State Electronic Devices 6Th Ed*. Prentice-Hall Of India Pvt. Limited. Prentice-Hall series in solid state physical electronics. ISBN 9788120330207. Dostupné také z: <https://books.google.cz/books?id=YD27jwEACAAJ>.
- BLUE, J.L. a C.L. WILSON, 1983. Two-dimensional analysis of semiconductor devices using general-purpose interactive PDE software. *IEEE Transactions on Electron Devices*. Roč. 30, č. 9, s. 1056–1070. Dostupné z DOI: [10.1109/T-ED.1983.21260](https://doi.org/10.1109/T-ED.1983.21260).
- Construction Of MOSFET*, [b.r.] [online]. [cit. 2023-05-11]. Dostupné z: <https://components101.com/articles/mosfet-symbol-working-operation-types-and-applications>.
- DAMJANOVIC, Dragan, 2020. *Introductory Course on Piezoelectric Materials, Properties, and Devices*. Youtube. Dostupné také z: [https://www.youtube.com/watch?v=gBYg2l3cm\\_I&list=PL02l257Y5pIDx4wDCEtNRjleGlb3nwOK8&index=7&t=5s&ab\\_channel=IEEE-UFFC](https://www.youtube.com/watch?v=gBYg2l3cm_I&list=PL02l257Y5pIDx4wDCEtNRjleGlb3nwOK8&index=7&t=5s&ab_channel=IEEE-UFFC).
- ELISEEV, Eugene A. et al., 2022. *Could the negative capacitance effect be used in field-effect transistors with a ferroelectric gate?* Dostupné z arXiv: [2208.13187](https://arxiv.org/abs/2208.13187) [physics.app-ph].
- KHANBAREH, Hamideh, 2016. *Expanding the Functionality of Piezo-Particulate Composites* [online]. [cit. 2023-05-11]. Dostupné z DOI: [10.4233/uuid:aab2497d-6eec-4956-8c15-8f5fdedc94f3](https://doi.org/10.4233/uuid:aab2497d-6eec-4956-8c15-8f5fdedc94f3).
- KORKMAZ, Satiye a afşin KARIPER, 2021. *BaTiO3-Based Nanogenerators: Fundamentals and Current Status*. Dostupné z DOI: [10.1007/s10832-021-00266-3](https://doi.org/10.1007/s10832-021-00266-3).
- LUK'YANCHUK, I et al., 2019. Harnessing ferroelectric domains for negative capacitance. *COMMUNICATIONS PHYSICS*. Roč. 2. ISSN 2399-3650. Dostupné z DOI: [10.1038/s42005-019-0121-0](https://doi.org/10.1038/s42005-019-0121-0).

- MARKOV, Igor L., 2014. Limits on fundamental limits to computation. *NATURE*. Roč. 512, č. 7513, s. 147–154. ISSN 0028-0836. Dostupné z DOI: [10.1038/nature13570](https://doi.org/10.1038/nature13570).
- MÍKA, Stanislav a Alois KUFNER, 1983. *Okrajové úlohy pro obyčejné diferenciální rovnice*. Státní nakladatelství technické literatury. Matematika pro vysoké školy technické.
- NEWNHAM, R.E., 2005. *Properties of Materials: Anisotropy, Symmetry, Structure*. OUP Oxford. ISBN 9780198520757.
- Newton iteration*, [b.r.] [online]. [cit. 2023-05-11]. Dostupné z: [https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Newton\\_iteration.svg](https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Newton_iteration.svg).
- PN Junction Bias*, [b.r.] [online]. [cit. 2023-05-11]. Dostupné z: <https://www.allaboutcircuits.com/textbook/semiconductors/chpt-2/the-p-n-junction/>.
- SALAHUDDIN, Sayeef a Supriyo DATTA, 2008. Use of Negative Capacitance to Provide Voltage Amplification for Low Power Nanoscale Devices. *Nano letters*. Roč. 8, s. 405–10. Dostupné z DOI: [10.1021/nl071804g](https://doi.org/10.1021/nl071804g).
- SCHIECCE, Bettina, 2014. *The strength of the weak form*. Dostupné také z: <https://www.comsol.com/blogs/strength-weak-form/>.
- SLUKA, Tomas, Pavel MOKRY a Nava SETTER, 2017. Static negative capacitance of a ferroelectric nano-domain nucleus. *APPLIED PHYSICS LETTERS*. Roč. 111, č. 15. ISSN 0003-6951. Dostupné z DOI: [10.1063/1.4989391](https://doi.org/10.1063/1.4989391).
- TAGANTSEV, Alexander, Jan FOUSEK a L. CROSS, 2010. *Domains in Ferroic Crystals and Thin Films*. Springer. ISBN 978-1-4419-1416-3. Dostupné z DOI: [10.1007/978-1-4419-1417-0](https://doi.org/10.1007/978-1-4419-1417-0).
- YADAV, Ajay K. et al., 2019. Spatially resolved steady-state negative capacitance. *NATURE*. Roč. 565, č. 7740, s. 468+. ISSN 0028-0836. Dostupné z DOI: [10.1038/s41586-018-0855-y](https://doi.org/10.1038/s41586-018-0855-y).
- ZUBKO, Pavlo et al., 2016. Negative capacitance in multidomain ferroelectric superlattices. *NATURE*. Roč. 534, č. 7608, s. 524+. ISSN 0028-0836. Dostupné z DOI: [10.1038/nature17659](https://doi.org/10.1038/nature17659).