

半导体所等提出免于退极化效应的光学声子软化新理论

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/30087.html>

本文仅供学习交流之用，版权归原作者所有，请勿用于商业用途！

半导体所等提出免于退极化效应的光学声子软化新理论。

通过晶体管持续小型化以提升集成度的摩尔定律已接近物理极限，但主要问题在于晶体管功耗难以等

比例降低

。有研究提出，进

一步降低功耗有两种途径。一是寻找

拥有比二氧化铪（ HfO_2

）更高介电常数和更大带隙的新型高k氧化物介电材料；二是采用铁电/电介质栅堆叠的负电容晶体管，降低晶体管的工作电压和功耗。氧化物高k介电常数和铁电相变均源于光学声子软化。此前，科学家认为，只有当Born有效电荷足够强以使得长程库伦作用超越短程原子键强度时，才会出现光学声子软化，但强Born有效电荷导致材料的介电常数与带隙成反比，难以同时拥有高介电常数和大带隙，引起界面退极化效应，限制了材料的应用。

中国科学院半导体研究所研究员骆军委团队联合宁波东方理工大学教授魏苏淮，揭示了岩盐矿结构氧化铍（ rsBeO ）反常地同时拥有超高介电常数和超宽带隙的起源，提出了通过拉升原子键降低化学键强度、实现光学声子软化的新理论。10月31日，相关研究成果以《降低原子化学键强度引起免于退极化效应的光学声子软化》（Softening of the optical phonon by reduced interatomic bonding strength without depolarization）为题，发表在《自然》（Nature）上。

研究发现， rs-BeO 反常地拥有10.6 eV的超宽带隙和高达2710的介电常数，超过 HfO_2 的6 eV带隙和25

0介电常数。研究显示， rs-BeO 中的Be原子较小，导致相邻两个氧原子的电子云高度重叠，同时，产生的强烈库伦排斥力拉升了原子间距，降低了原子键的强度和光学声子模频率，致使其介电常数从闪锌矿相的3.20跃升至2710

0。基于这一发现，该团队提出了通过拉升原子键长度来降低原子键强度从而实现光学声子模软化的新理论。

这一光学声子模软化驱动的铁电相变不依赖传统铁电相变所需的强库伦作用，可以避免界面退极化效应。该研究利用上述理论解释了在 Si/SiO_2 衬底上外延生长的 $\text{Hf}_{0.8}\text{Zr}_{0.2}\text{O}_2$ 和 ZrO_2 薄膜在厚度降低到2至3nm时才出现铁电性的“逆尺寸效应”（随着材料尺寸减小，铁电性反而

增强)：当 $\text{Hf}_{0.8}\text{Zr}_{0.2}\text{O}_2$ 或 ZrO_2

薄膜减薄至2至3nm时，衬底晶格失配对外延薄膜施加显著的双轴应变进而降低原子键强度，而软化TO声子模使其振动频率降低至零，导致铁电相变。同时，理论预测的长宽比和面间距两个特征结构因子可以重复实验测量值。

离子半径差异、应变、掺杂和晶格畸变等常规手段均可以拉升原子键长度降低原子键强度。该成果为解决集成电路晶体管高k介电材料、铁电材料应用的难点以及发展兼容CMOS工艺的超高密度铁电、相变存储等新原理器件提供了新思路。

研究工作得到国家自然科学基金国家杰出青年科学基金项目、国家重大科研仪器研制项目和重大项目，中国科学院稳定支持基础研究领域青年团队计划和战略性先导科技专项(B类)等的支持

。

[论文链接](#)

岩盐矿(rs-) BeO的反常现象及起源

研究团队单位：半导体研究所

更多 科学进展 请访问 <https://www.iikx.com/news/progress/>

本文版权归原作者所有，请勿用于商业用途，[爱科学iikx.com](https://www.iikx.com)转发