

工作气压对 AlScN 薄膜结构和电学性能的影响

隋金洋¹, 周大雨¹, 赵文瑾¹, 童 祎², 王新朋²

(1. 大连理工大学 材料科学与工程学院, 大连 116024; 2. 苏州实验室, 苏州 215123)

摘 要: 自 2019 年 $\text{Al}_{1-x}\text{Sc}_x\text{N}$ 薄膜的铁电性能被实验报道以来, 纤锌矿结构铁电材料在全球范围内受到广泛关注。然而, 其铁电性能对制备工艺的强烈依赖性仍然是一个重大挑战, 限制了其在实际器件应用中的集成。本研究旨在系统探究溅射工作气压对 $\text{Al}_{1-x}\text{Sc}_x\text{N}$ 薄膜微观结构及相应铁电特性的影响。核心目标在于确定优异铁电性能的最佳工作气压窗口, 并揭示其背后结构与性能的关联机制。本研究在纯氮气气氛下, 采用反应磁控溅射技术在硅衬底上制备 $\text{Al}_{0.71}\text{Sc}_{0.29}\text{N}$ 薄膜, 工作气压范围为 0.27~1.33 Pa。通过 X 射线衍射、扫描电子显微镜和铁电测试仪等表征手段, 系统分析了薄膜的晶体结构、表面形貌与铁电性能之间的关联机制。结果表明, 工作气压显著影响 $\text{Al}_{0.71}\text{Sc}_{0.29}\text{N}$ 薄膜的结晶质量, 在 0.52 Pa 条件下制备的薄膜具有最佳结晶质量和最优铁电性能。随着工作气压增加, 薄膜表面开始出现棱锥状结构并逐渐增多, 静态漏电流逐渐减小。本研究证实工作气压是调控 $\text{Al}_{1-x}\text{Sc}_x\text{N}$ 薄膜结构与铁电性能的决定性因素之一。工作气压诱导的薄膜形貌变化及漏电流抑制, 为设计高性能纤锌矿铁电器件提供了重要参考。

关 键 词: AlScN 薄膜; 工作气压; 微观结构; 铁电性能

中图分类号: TQ174 文献标志码: A 文章编号: 1000-324X(2026)04-0486-07

Effects of Working Pressure on the Structure and Electrical Properties of AlScN Thin Films

SUI Jinyang¹, ZHOU Dayu¹, ZHAO Wenjin¹, TONG Yi², WANG Xinpeng²

(1. School of Materials Science and Engineering, Dalian University of Technology, Dalian 116024, China; 2. Suzhou Laboratory, Suzhou 215123, China)

Abstract: Since ferroelectric properties of $\text{Al}_{1-x}\text{Sc}_x\text{N}$ thin films were experimentally confirmed in 2019, wurtzite-structured ferroelectric materials have received worldwide attention. However, the strong dependence of their ferroelectric performance on deposition parameters still remains a significant challenge, limiting their reliable integration into practical device applications. This study aims to systematically investigate the influence of sputtering working pressure on microstructural evolution and resultant ferroelectric properties of $\text{Al}_{1-x}\text{Sc}_x\text{N}$ thin films. The primary goal is to identify the optimal pressure window that yields superior ferroelectric performance and to

收稿日期: 2025-08-22; 收到修改稿日期: 2025-10-04; 网络出版日期: 2025-10-31

基金项目: 国家自然科学基金(52472120); 中央高校基本科研业务费资助项目(DUT24LAB117); 苏州实验室科研项目(SK-1202-2024-012)

National Natural Science Foundation of China (52472120); Fundamental Research Funds for the Central Universities of China (DUT24LAB117); Suzhou Laboratory Project (SK-1202-2024-012)

作者简介: 隋金洋(1998-), 女, 博士研究生. E-mail: 2020sjy@mail.dlut.edu.cn

SUI Jinyang (1998-), female, PhD candidate. E-mail: 2020sjy@mail.dlut.edu.cn

通信作者: 周大雨, 教授. E-mail: zhoudayu@dlut.edu.cn

ZHOU Dayu, professor. E-mail: zhoudayu@dlut.edu.cn

understand the underlying structure-property relationships. $\text{Al}_{0.71}\text{Sc}_{0.29}\text{N}$ thin films were deposited on silicon substrates using reactive magnetron sputtering in a pure nitrogen atmosphere, and experienced the working pressure varied from 0.27 Pa to 1.33 Pa. The correlation between crystal structure, surface morphology, and ferroelectric properties of the thin film was analyzed. The results showed that the working pressure significantly affected crystallization quality of $\text{Al}_{0.71}\text{Sc}_{0.29}\text{N}$ thin films, among which prepared under 0.52 Pa had the best crystallization quality and excellent ferroelectric properties. As the working pressure increased, the pyramid-like structures began to appear on surface of the film and gradually increased, while the static leakage current also gradually decreased. This work conclusively demonstrates that sputtering working pressure is one of the decisive factors in tuning microstructure and ferroelectricity of $\text{Al}_{1-x}\text{Sc}_x\text{N}$ films. The correlation between working pressure-induced morphological changes and leakage current suppression offers valuable insights for engineering high-performance wurtzite ferroelectric devices.

Key words: AlScN film; working pressure; micro structure; ferroelectric property

铁电材料基于其极化翻转特性, 凭借非易失性、低功耗和高速读写等优势, 在二进制数据存储领域具有重要应用价值, 例如铁电随机存储器(Ferroelectric Random Access Memory, FeRAM)、铁电场效应晶体管(Ferroelectric Field Effect Transistor, FeFET)和铁电隧道结(Ferroelectric Tunnel Junction, FTJ)^[1-2]。然而, 传统钙钛矿氧化物铁电体面临与标准半导体工艺兼容性差以及厚度微缩困难等瓶颈, 阻碍了其大规模商业化应用^[3-4]。铅基铁电材料也存在局限, 包括剩余极化强度通常低于传统钙钛矿材料, 铁电相稳定性受成分和厚度等因素影响显著, 循环耐久性不足及唤醒效应等问题, 限制了其产业化进程^[5]。

2019 年, Sc 掺杂 $\text{AlN}(\text{Al}_{1-x}\text{Sc}_x\text{N})$ 薄膜的铁电性得到实验验证, 为铁电材料开辟了新的路径^[6-7]。相较于传统铁电材料, 以 $\text{Al}_{1-x}\text{Sc}_x\text{N}$ 为代表的纤锌矿铁电薄膜具有铁电相结构稳定、超高热稳定性(居里温度 $>600\text{ }^{\circ}\text{C}$)^[8]和可纳米级微缩等优势^[9-10], 在微电子机械系统(Micro Electro Mechanical Systems, MEMS)和传感器等领域展现出巨大的应用潜力。磁控溅射技术因其掺杂含量易调控、薄膜质量好等优点, 已成为制备 $\text{Al}_{1-x}\text{Sc}_x\text{N}$ 薄膜的主要方法之一。凭借该技术可在低于 $400\text{ }^{\circ}\text{C}$ 的工艺条件下沉积 $\text{Al}_{1-x}\text{Sc}_x\text{N}$ 薄膜^[11], 与互补金属氧化物半导体(Complementary Metal Oxide Semiconductor, CMOS)后道工艺(Back End of Line, BEOL)及 III-V 族半导体技术兼容。

在磁控溅射过程中, 工作气压是一个关键参数, 它直接影响溅射粒子的能量和运动状态, 从而对薄膜的微观结构和性能产生重要影响。目前, 绝大多数文献报道采用 Ar/N_2 混合气体进行反应溅射。Fichtner 等^[12]报道了在混合气体条件下气压对 $\text{Al}_{1-x}\text{Sc}_x\text{N}$ 薄膜内应力的调控规律。Yasuoka 等^[13]对

比了氩氮混合气体和纯氮气气氛下薄膜铁电性能的差异, 在纯氮气条件下能得到铁电性能更优异的薄膜, 但在纯氮气气氛下更进一步的系统研究仍较为缺乏。溅射工作气压如何通过调控粒子动力学行为影响晶粒生长的择优取向、晶界缺陷密度及漏电路径等, 尚未得到系统阐释。揭示这一关联规律对实现 $\text{Al}_{1-x}\text{Sc}_x\text{N}$ 薄膜的可控制备、优化其存储器应用性能具有迫切的理论和工程价值。因此, 本研究旨在深入探究纯氮气气氛下工作气压对磁控溅射制备 $\text{Al}_{1-x}\text{Sc}_x\text{N}$ 薄膜组织结构和铁电性能的影响规律, 为优化薄膜制备工艺和提高其性能提供理论指导。

本研究使用双靶反应磁控溅射, 在 Si 衬底上沉积了一系列工作气压梯度(0.27~1.33 Pa)的 $\text{Al}_{1-x}\text{Sc}_x\text{N}$ 薄膜, 并对其结构和电学性能进行表征。结果表明, 随着工作气压增大, 薄膜中 O 元素含量逐渐增加, 同时非(0002)取向晶粒逐渐增多。薄膜的铁电性能和结晶质量直接相关, 在 0.52 Pa 条件下得到最佳的结晶质量和优异的铁电性能。

1 实验方法

1.1 样品制备

使用中国科学院沈阳科学仪器股份有限公司生产的超高真空三腔室磁控溅射镀膜系统, 通过双靶射频反应磁控溅射制备 $\text{Al}_{1-x}\text{Sc}_x\text{N}$ 薄膜。使用直径为 76.2 mm、厚度为 3 mm 的圆柱形 Al 金属和 Sc 金属靶材(纯度为 99.995%)。使用重掺杂 n 型(111)-Si 作为基片, 采用标准 RCA 工艺对其进行清洗。将清洗后的衬底装入溅射室, 抽真空至 $5\times 10^{-4}\text{ Pa}$ 后, 通入高纯氮气至设定工作气压(0.27~1.33 Pa), 在纯氮气气氛下进行反应。沉积过程中, 保持 Al 靶和 Sc 靶射频功率分别为 260 和 185 W, 衬底温度为 $350\text{ }^{\circ}\text{C}$,

沉积时间为 45 min。

1.2 结构表征及性能测试

采用 3D 表面轮廓仪(SuperView W1, Chotest)测量薄膜的厚度;采用 X 射线光电子能谱仪(X-ray Photon-electron Spectrometer, XPS, ESCALABTM 250Xi)分析薄膜的化学成分;采用 X 射线衍射仪(X-ray Diffractometer, XRD, SmartLab 9 kW, Rigku)在 $2\theta=30^{\circ}\sim 80^{\circ}$ 范围内进行测试,分析薄膜的晶体结构和择优生长取向;采用扫描电子显微镜(Scanning Electron Microscope, SEM, JSM-7610, JEOL)观察样品表面形貌。

使用金属-绝缘体-半导体(Metal Insulator Semiconductor, MIS)平面电容器进行电学测试。氮化钛(TiN)上电极点($\phi 110\ \mu\text{m}$)采用磁控溅射技术通过覆盖金属掩膜板进行沉积。采用 Radiant 铁电测试仪(Multiferroic 100V, Radiant Technologies)进行电学性能测试,包括电容器的极化-电场强度(Polarization-electric field, P - E)和瞬态电流-电场强度(Current-electric field, I - E)性能。测试时底电极接地,上电极接输入电压。

2 结果与讨论

2.1 AlScN 薄膜的化学成分和微观结构表征

为研究溅射工作气压对 $\text{Al}_{1-x}\text{Sc}_x\text{N}$ 薄膜化学成分的影响,选取工作气压为 0.27、0.52 和 0.93 Pa 的代表性样品进行 XPS 分析。为去除薄膜表面吸附的

氧、碳等污染物,测试前用能量为 5 keV 的 Ar^+ 离子对样品表面进行刻蚀处理,刻蚀时间为 2 min。图 1 为刻蚀后的高分辨 $\text{Al}2\text{p}$ 、 $\text{Sc}2\text{p}$ 和 $\text{N}1\text{s}$ 谱图,并使用 Advantage 软件对其进行拟合分析,拟合时 $\text{Al}2\text{p}$ 、 $\text{Sc}2\text{p}_{3/2}$ 和 $\text{N}1\text{s}$ 使用的灵敏度因子分别为 0.560、3.983 和 1.676。表 1 为拟合 XPS 谱图得到的元素原子百分比,随着工作气压的增加,薄膜内 O 元素的比例逐渐增大,而 N 元素的比例逐渐减小。在不同工作气压下,Sc 元素掺杂的原子百分比($\text{Sc}/(\text{Sc}+\text{Al})$)基本保持不变,约为 29%。图 1(a~c)为 $\text{Al}2\text{p}$ 的 XPS 谱图,随着工作气压的升高, $\text{Al}2\text{p}$ 始终保持为 Al-N 单峰状态。图 1(d~f)为 $\text{Sc}2\text{p}$ 和 $\text{N}1\text{s}$ 的 XPS 图谱,其中 $\text{Sc}2\text{p}$ 存在两对光电子峰,分别对应 Sc-N 键(位于 399.5 eV 的 $\text{Sc}2\text{p}_{3/2}$ 和位于 404.2 eV 的 $\text{Sc}2\text{p}_{1/2}$)和 Sc-O 键(位于 401.4 eV 的 $\text{Sc}2\text{p}_{3/2}$ 和位于 406.2 eV 的 $\text{Sc}2\text{p}_{1/2}$)。从图中可知,随着工作气压的升高,Sc-O 键的比例逐渐增大。由于 Sc-O 键的结合能(-1908.8 kJ/mol)较 Al-O 键(-1675.7 kJ/mol)更低^[14],在 Al、Sc 与 O 的结合中,更容易生成 Sc 的氧化物。

表 1 不同工作气压制备的 $\text{Al}_{0.71}\text{Sc}_{0.29}\text{N}$ 薄膜中各元素的原子百分比

Table 1 Atomic percentages of elements for $\text{Al}_{0.71}\text{Sc}_{0.29}\text{N}$ films prepared at different working pressures

Working pressure/Pa	Al/%	Sc/%	N/%	O/%
0.27	29.64	13.33	43.12	13.39
0.52	31.58	12.59	40.79	15.05
0.93	30.42	12.60	34.56	22.42

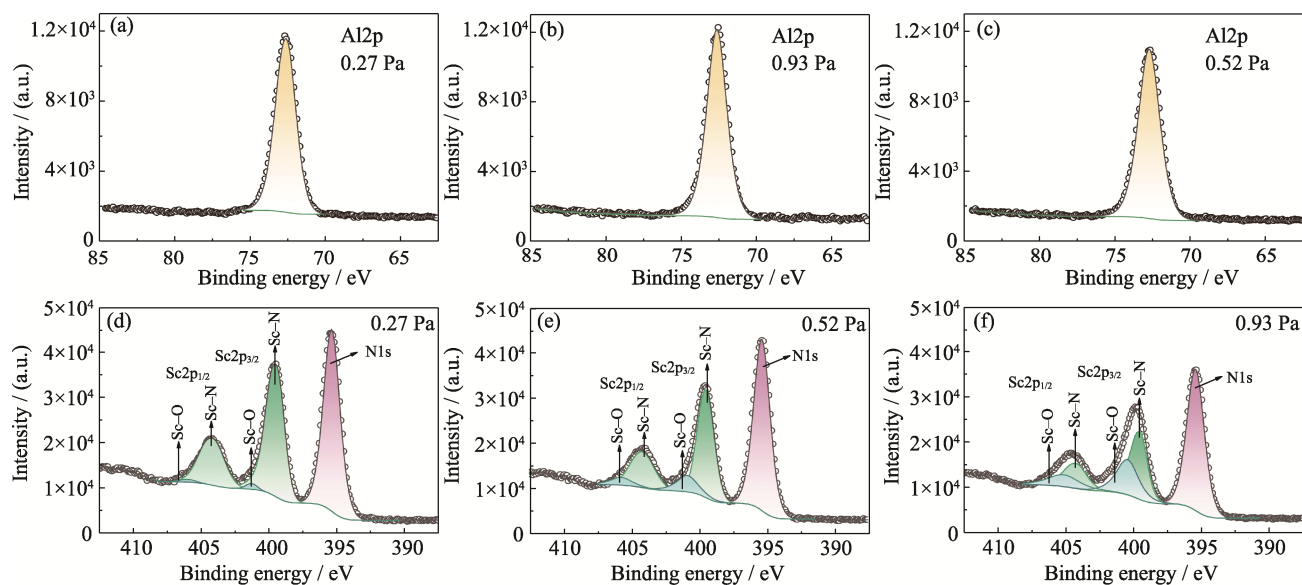


图 1 不同工作气压下制备的 $\text{Al}_{0.71}\text{Sc}_{0.29}\text{N}$ 薄膜的 XPS 谱图

Fig. 1 XPS spectra of $\text{Al}_{0.71}\text{Sc}_{0.29}\text{N}$ films deposited at different working pressures (a-c) $\text{Al}2\text{p}$; (d-f) $\text{Sc}2\text{p}$ and $\text{N}1\text{s}$

工作气压越高, $\text{Al}_{0.71}\text{Sc}_{0.29}\text{N}$ 薄膜表面的氧化程度越严重, 造成这一现象的原因可能是当工作气压升高时, 薄膜的孔隙率增加, 当样品脱离真空时, 表面会吸附更多氧, 更容易被氧化。

图 2(a) 为不同工作气压下制备的薄膜的 XRD 图谱。根据 AlN 的标准衍射卡片 (PDF#25-1133), 在 $2\theta=36.3^\circ$ 和 77.2° 出现分别对应于纤锌矿相的 (0002) 和 (0004) 衍射峰, 所有样品均未观察到明显的其他衍射峰。由此可知, 在不同工作气压下制备的薄膜样品均为 (0002) 择优取向, 并且工作气压为 0.31~0.58 Pa 的薄膜样品具有 (0004) 衍射峰, 表明薄膜具有极佳的择优生长特性。其中 (0002) 衍射峰的强度和半高峰宽如图 2(b) 下图所示。

图 2(b) 上图为不同工作气压下薄膜的沉积速率。在整个实验的工作气压范围内, 薄膜沉积速率在 $(3.65 \pm 0.10) \text{ nm/min}$ 窄范围内波动。因此, 可以通过 (0002) 衍射峰的强度来比较薄膜的结晶质量。随着工作气压的增加, 薄膜厚度呈现先减小后增大的趋势。在低气压下, 粒子具有较大的平均自由程, 受其他粒子的散射较小, 因而可获得较大的沉积速率。而在高气压下, 轰击靶材的气体离子增多, 被溅射出来的粒子数量增多, 这也导致较大的沉积速率。当溅射气压在 0.52 Pa 附近时, 沉积粒子的能量

和数量达到平衡, 各不占优势, 薄膜沉积速率最低。此时薄膜的 (0002) 衍射峰强度最高, 半高峰宽最窄, 结晶质量最好。

图 2(c) 为系列薄膜的掠入射 X 射线衍射 (GIXRD) 图谱。随着工作气压的升高, 逐渐出现纤锌矿结构的 (10 $\bar{1}$ 0)、(10 $\bar{1}$ 2) 和 (11 $\bar{2}$ 0) 衍射峰, 并逐渐增强。

根据 XRD 图谱的 (0002) 衍射峰和 GIXRD 图谱的 (10 $\bar{1}$ 3) 衍射峰, 计算了晶格参数 c 和 a , 如图 2(d) 所示。图 2(d) 右侧坐标轴为计算的 c/a , 蓝色区域为文献中通过第一性原理计算得到的 $\text{Al}_{0.7}\text{Sc}_{0.3}\text{N}$ 理论 c/a , 约为 1.5^[15]。随着工作气压的增加, c/a 逐渐减小并趋于稳定, 与理论 c/a 比较, 薄膜应力由压应力逐渐转变为拉应力。在磁控溅射沉积过程中, 高能原子轰击样品表面是形成压应力的主要原因。而随着溅射工作气压的增大, 腔室中的粒子数量不断增多, 粒子碰撞概率增大, 到达基片表面时动能减小, 因此沉积薄膜的压应力减小并最终转变为拉应力^[16]。

图 3(a) 展示了通过 SEM 获得的不同工作气压下的 $\text{Al}_{0.71}\text{Sc}_{0.29}\text{N}$ 薄膜的上表面微观形貌。在低气压 (0.27 Pa) 下, 观察到均匀、连续的柱状晶团簇, 为 (0002) 晶面的上表面形貌。随着工作气压的增加, 表面开始出现棱锥结构, 并逐渐增多, 直至完全覆盖整个上表面 (1.33 Pa)。这些结构是不同角度倾斜的

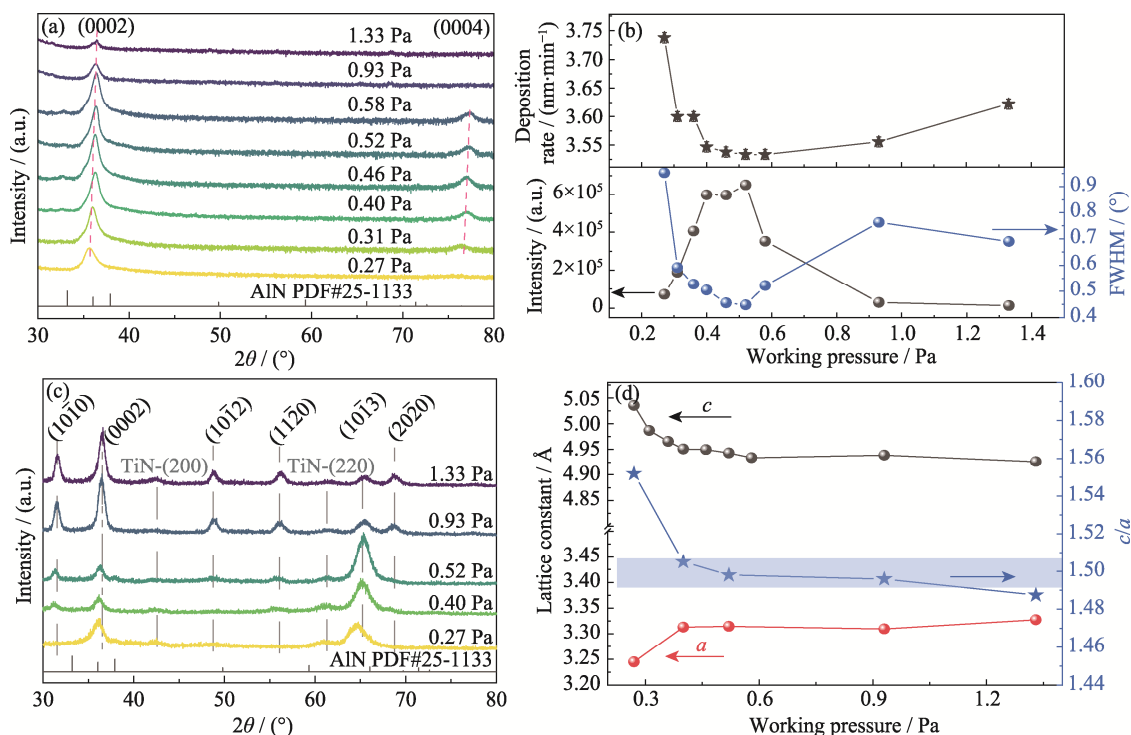
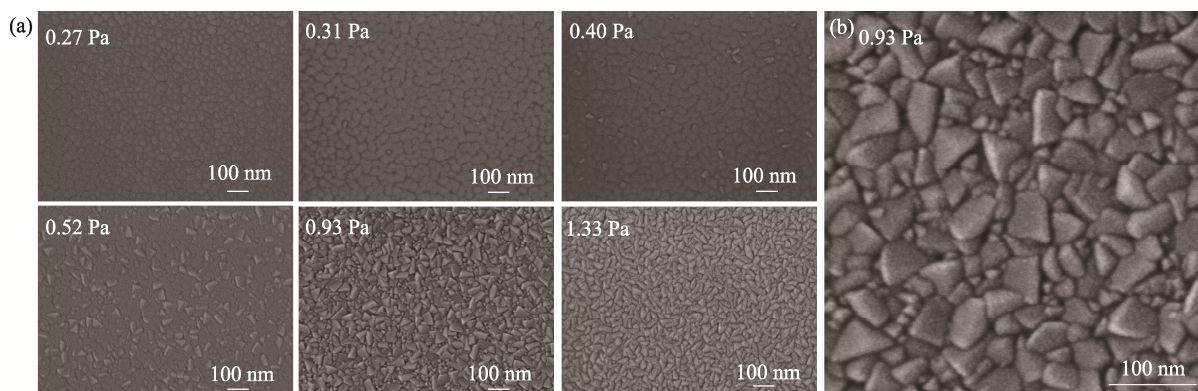


图 2 不同工作气压下制备的 $\text{Al}_{0.71}\text{Sc}_{0.29}\text{N}$ 薄膜的 XRD 图谱、薄膜沉积速率和晶格参数

Fig. 2 XRD patterns, deposition rates and lattice parameters of $\text{Al}_{0.71}\text{Sc}_{0.29}\text{N}$ films deposited at different working pressures (a) XRD patterns; (b) Deposition rate, intensity and full width at half maximum (FWHM) of the (0002) diffraction peak; (c) GIXRD patterns; (d) Calculated lattice parameters c , a and c/a

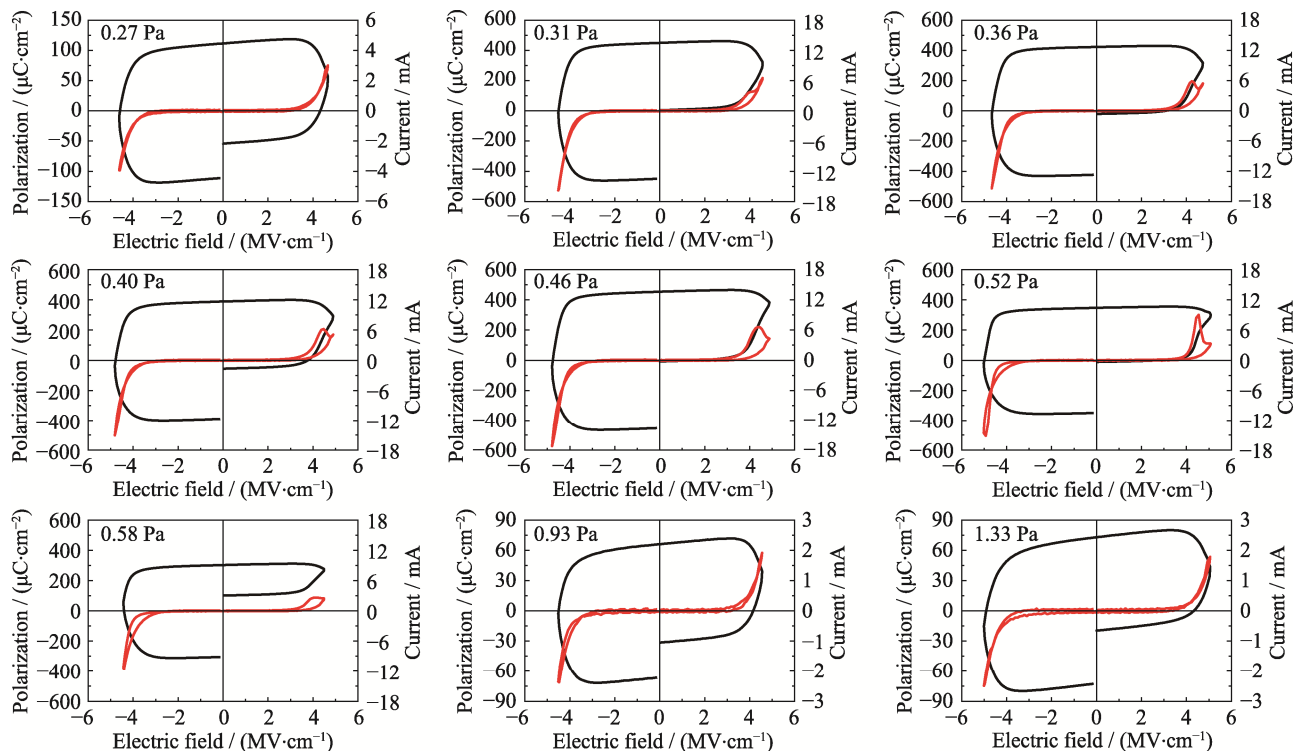
图 3 $\text{Al}_{0.71}\text{Sc}_{0.29}\text{N}$ 薄膜的表面形貌Fig. 3 Surface morphologies of $\text{Al}_{0.71}\text{Sc}_{0.29}\text{N}$ films(a) Samples deposited at different working pressures ($\times 100$ k); (b) Sample deposited at 0.93 Pa ($\times 200$ k)

柱状晶粒，其中分立的小平面为(0002)晶面。从图 3(b)中可以清晰看到，这些小平面有粗糙的纹理结构，为典型的(0002)晶面的结构特征^[17]。结合 GIXRD 图谱可知，随着工作气压的增加，逐渐出现的(10 $\bar{1}$ 2)、(10 $\bar{1}$ 3)衍射峰来自于这些锥状结构。这主要是因为，在高气压下，粒子到达基片表面时的动能较小，使得吸附原子的表面迁移能力严重受限。它们倾向于在初始着陆点附近直接成核以其他晶面生长，而无法进行长程迁移以找到能量最低的位置((0002)晶面具有最低表面能)。因此，这种扩散受限的生长模式，使得某些晶粒沿非 c 面晶面生长，最

终演化为棱锥状或锥状结构。

2.2 AlScN 薄膜的电学性能表征

对该系列薄膜进行了 P - E 测试，测试波形为三角波，测试频率为 10 kHz。如图 4 所示，所有薄膜样品的 P - E 曲线均表现出近似矩形的形态，这种表观的高矩形度不能直接等同于优异的铁电性能。该特征很大一部分来自于漏电流的贡献，因而准确的铁电现象应由 I - E 曲线的翻转电流峰判断。实验结果表明，薄膜的铁电性能与工作气压呈现非单调的关系。从工作气压为 0.31~0.58 Pa 条件下制备的薄膜的 I - E 曲线中逐渐观察到明显的漏电电流分离

图 4 不同工作气压下 $\text{Al}_{0.71}\text{Sc}_{0.29}\text{N}$ 薄膜的 P - E 曲线和 I - E 曲线Fig. 4 P - E and I - E curves for $\text{Al}_{0.71}\text{Sc}_{0.29}\text{N}$ films deposited at different working pressures

的铁电翻转电流峰。

由于测试中极化强度包含漏电流的部分, 为了量化不同工作气压下的剩余极化强度 (Remanent Polarization, P_r), 对 $I-E$ 曲线进行了分峰拟合处理以提取 P_r , 结果如图 5 所示。如图 5(a) 所示, 以 0.52 Pa 样品正侧的 $I-E$ 曲线为例, 将图 4 中的数据以电流-时间 (Current-time, $I-t$) 作图进行分峰拟合, 这种方法在该领域被广泛使用^[18]。在 0.31~0.52 Pa 工作气压区间, 随着工作气压的增大, 极化翻转电流峰的峰值逐渐增大, 即 P_r 逐渐增大。这一现象表明薄膜内部可翻转的铁电畴数量增加, 标志着铁电性能得到持续优化。然而, 当工作气压超过 0.52 Pa 并继续增大时, 极化翻转电流峰强度开始减弱, 并最终消失。

对于具有明显铁电翻转电流峰的样品, 提取 $I-E$ 曲线正侧的翻转电流峰的电场为矫顽场强 (Coercive Electric Field, E_c), 如图 5(b) 所示。当 P_r 大于 $100 \mu\text{C}/\text{cm}^2$ 时 (0.40~0.52 Pa), E_c 基本不变, 此时气压对 E_c 的影响较小。而对于 P_r 较小的样品, E_c 的显著降低与所需翻转的铁电畴数量减少有关。

这表明 E_c 不只与晶体结构有关, 还与可翻转的有效铁电畴数量有关。

$\text{Al}_{1-x}\text{Sc}_x\text{N}$ 薄膜铁电性源于其纤锌矿结构能够沿 c 轴方向自发极化, 并可在外加电场下实现 180° 翻转^[6]。结合 XRD 结果可知, 薄膜铁电性能的强弱与其 (0002) 晶面衍射峰的强度直接相关。在铁电性能最优的工作气压区间 (0.52 Pa 附近), (0002) 衍射峰强度最高且半高峰宽较窄, 证实了薄膜具有高度 c 轴取向、低缺陷密度和良好的长程有序性, 这是实现高效铁电极化翻转的关键结构基础。而偏离此工作气压区间时, (0002) 衍射峰强度减弱, 半高峰宽宽化, 说明结晶质量下降或取向度减弱。其中, 低气压下, 薄膜虽具有明确的 (0002) 取向, 但其 (0002) 衍射峰强度较低; 而在高压下, 薄膜的 (0002) 衍射峰强度较低, 同时存在大量其它取向的晶面。这均与铁电性能的减弱趋势一致, 从薄膜结构根源上解释了 $I-E$ 曲线中极化翻转电流峰演变的物理本质。

图 6(a) 为系列薄膜的静态电流密度-电场强度 ($J-V$) 曲线。为了更清晰地比较不同工作气压下的漏电流大小, 分别选取相同电场强度下的电流密度

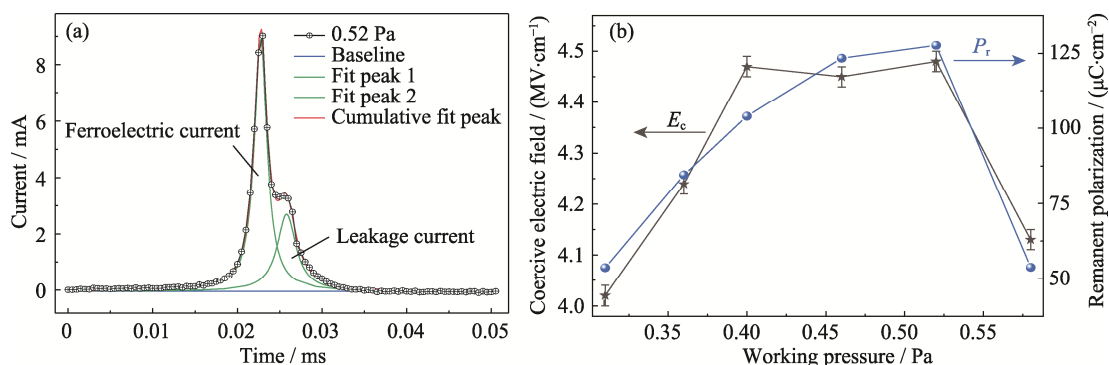


图 5 不同工作气压下 $\text{Al}_{0.71}\text{Sc}_{0.29}\text{N}$ 薄膜 $I-t$ 拟合示例(a)、矫顽场强和剩余极化强度(b)

Fig. 5 $I-t$ curve fitting (a), coercive electric field and remanent polarization (b) of $\text{Al}_{0.71}\text{Sc}_{0.29}\text{N}$ films deposited at different working pressures

Colorful figures are available on website

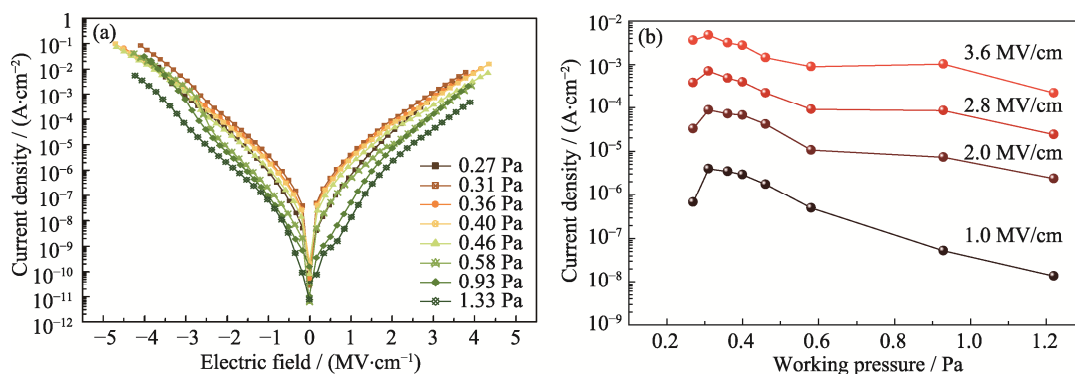


图 6 不同工作气压下 $\text{Al}_{0.71}\text{Sc}_{0.29}\text{N}$ 薄膜的静态 $J-E$ 曲线(a)和不同场强下的电流密度(b)

Fig. 6 Static $J-E$ curves (a) and current density at different electric fields (b) of $\text{Al}_{0.71}\text{Sc}_{0.29}\text{N}$ films deposited at different working pressures

进行对比分析,如图 6(b)所示。在不同的电场强度下,漏电流密度随工作气压的变化遵从一致的趋势。当工作气压从 0.27 Pa 增加到 0.31 Pa 时,漏电流增加,这可能与薄膜的结晶化程度增强所诱导的载流子输运行为变化相关^[19]。随着工作气压的进一步增大,静态漏电流持续减小。这一结果可以很好地对应于薄膜上表面形貌的演化特征。在样品表面开始出现棱锥状结构后(0.31 Pa),随着工作气压的增加,棱锥状结构持续增多,漏电流持续减小。这种棱锥状结构强化了晶界散射,同时可以有效阻断导电通道,是导致工作气压在 0.31 Pa 以上,漏电流持续降低的关键结构因素。

3 结论

本研究使用双靶反应磁控溅射,在(111)-Si 衬底上制备了 $\text{Al}_{0.71}\text{Sc}_{0.29}\text{N}$ 薄膜,在纯氮气气氛下研究了其微观结构和电学性能与工作气压的关系。当工作气压为 0.52 Pa 时,薄膜表现出最优的(0002)择优取向,这归因于该气压下溅射粒子动能与迁移率的平衡:粒子具备足够能量抵达衬底并有序排列,同时避免了低气压下的过度轰击缺陷或高压下的能量衰减导致的薄膜结晶质量较差。这证明了 $\text{Al}_{0.71}\text{Sc}_{0.29}\text{N}$ 薄膜铁电性能和其(0002)择优取向程度的强相关性,同时明确了静态漏电和薄膜形貌的关系。本研究证明了纯氮气环境中气压-微观结构-铁电性能的相关性,为纤锌矿结构铁电存储器的高效制备提供了关键理论支撑和实用化路径。

参考文献:

- [1] KIM K H, KARPOV I, OLSSON R H, *et al.* Wurtzite and fluorite ferroelectric materials for electronic memory. *Nature Nanotechnology*, 2023, **18**(5): 422.
- [2] ZHANG Y L, ZHU Q X, TIAN B B, *et al.* New-generation ferroelectric alsen materials. *Nano-Micro Letters*, 2024, **16**(1): 31.
- [3] IHLEFELD J F, HARRIS D T, KEECH R, *et al.* Scaling effects in perovskite ferroelectrics: fundamental limits and process-structure-property relations. *Journal of the American Ceramic Society*, 2016, **99**(8): 2537.
- [4] KIM Y S, KIM D H, KIM J D, *et al.* Critical thickness of ultrathin ferroelectric BaTiO_3 films. *Applied Physics Letters*, 2005, **86**(10): 3.
- [5] MIKOLAJICK T, SLESAZECK S, MULAOSMANOVIC H, *et al.* Next generation ferroelectric materials for semiconductor process integration and their applications. *Journal of Applied Physics*, 2021, **129**(10): 21.
- [6] FICHTNER S, WOLFF N, LOFINK F, *et al.* AlScN: a III-V semiconductor based ferroelectric. *Journal of Applied Physics*, 2019, **125**(11): 114103.
- [7] HAYDEN J, HOSSAIN M D, XIONG Y H, *et al.* Ferroelectricity in boron-substituted aluminum nitride thin films. *Physical Review Materials*, 2021, **5**(4): 044412.
- [8] ISLAM M R, WOLFF N, YASSINE M, *et al.* On the exceptional temperature stability of ferroelectric $\text{Al}_{1-x}\text{Sc}_x\text{N}$ thin films. *Applied Physics Letters*, 2021, **118**(23): 232905.
- [9] SCHÖNWEGGER G, ISLAM M R, WOLFF N, *et al.* Ultrathin $\text{Al}_{1-x}\text{Sc}_x\text{N}$ for low-voltage-driven ferroelectric-based devices. *Physica Status Solidi-Rapid Research Letters*, 2023, **17**(1): 6.
- [10] RYOO S K, KIM K D, CHOI W, *et al.* Fabrication of ultrathin ferroelectric $\text{Al}_{0.7}\text{Sc}_{0.3}\text{N}$ films under complementary-metal-oxide-semiconductor compatible conditions by using $\text{HfN}_{0.4}$ electrode. *Advanced Materials*, 2025, **37**(1): 2413295.
- [11] YASUOKA S, SHIMIZU T, TATEYAMA A, *et al.* Impact of deposition temperature on crystal structure and ferroelectric properties of $(\text{Al}_{1-x}\text{Sc}_x)\text{N}$ films prepared by sputtering method. *Physica Status Solidi A-Applications and Materials Science*, 2021, **218**(17): 2100302.
- [12] FICHTNER S, REIMER T, CHEMNITZ S, *et al.* Stress controlled pulsed direct current co-sputtered $\text{Al}_{1-x}\text{Sc}_x\text{N}$ as piezoelectric phase for micromechanical sensor applications. *APL Materials*, 2015, **3**(11): 6.
- [13] YASUOKA S, SHIMIZU T, TATEYAMA A, *et al.* Effects of deposition conditions on the ferroelectric properties of $(\text{Al}_{1-x}\text{Sc}_x)\text{N}$ thin films. *Journal of Applied Physics*, 2020, **128**(11): 114103.
- [14] HASEMAN M S, NOESGES B A, SHIELDS S, *et al.* Cathodoluminescence and X-ray photoelectron spectroscopy of ScN: dopant, defects, and band structure. *APL Materials*, 2020, **8**(8): 7.
- [15] ZHANG S Y, HOLEC D, FU W Y, *et al.* Tunable optoelectronic and ferroelectric properties in Sc-based III-nitrides. *Journal of Applied Physics*, 2013, **114**(13): 11.
- [16] ABADIAS G, LEROY W P, MAHIEU S, *et al.* Influence of particle and energy flux on stress and texture development in magnetron sputtered TiN films. *Journal of Physics D-Applied Physics*, 2013, **46**(5): 9.
- [17] SANDU C S, PARSAPOUR F, MERTIN S, *et al.* Abnormal grain growth in AlScN thin films induced by complexion formation at crystallite interfaces. *Physica Status Solidi A-Applications and Materials Science*, 2019, **216**(2): 11.
- [18] GREMMEL M, FICHTNER S. The interplay between imprint, wake-up, and domains in ferroelectric $\text{Al}_{0.70}\text{Sc}_{0.30}\text{N}$. *Journal of Applied Physics*, 2024, **135**(20): 204101.
- [19] DOHERTY T A S, WINCHESTER A J, MACPHERSON S, *et al.* Performance-limiting nanoscale trap clusters at grain junctions in halide perovskites. *Nature*, 2020, **580**(7803): 360.