

中国材料大会 2025

暨新材料科研仪器与设备展

7 月 5-8 日, 2025

福建 厦门

D11-电子材料与微系统
D11-Electronic Materials and
Microsystems

主办单位

中国材料研究学会

会议网址: <https://cmc2025.scimeeting.cn>



D11-电子材料与微系统

分会主席：周益春、李敬锋、王晓慧、解荣军、项生昌

D11-01

基于低温共烧陶瓷（LTCC）的集成传感器研究

马名生*

中国科学院上海硅酸盐研究所

低温共烧陶瓷（LTCC）作为无源集成的主流技术，易于实现三维敏感结构与功能电路的集成，并且具有陶瓷固有的耐高温、耐腐蚀和高可靠性，是实现感知/通讯一体化集成的陶瓷基微机电系统（C-MEMS）的理想途径。本研究针对锂电池内部状态监测、飞机大气数据采集系统和海洋水文环境测量系统等特种需求，开展了从 LTCC 材料到集成器件的全链条创新研究，设计制备出了系列新型 LTCC 介质材料，相关专利技术实现高价值转化；获得了 LTCC 气体、液体、距离以及压力/温度集成传感器，相关论文入选 ESI 高被引论文；研制新型 LTCC 介质材料和集成传感器在多个重要工程中获得应用，解决了关键材料和器件的国产化问题。

D11-02

MLCC 用铌酸盐微晶玻璃的致密化烧结及介电性能研究

易云鹤^{1,2,3}、张庆猛^{*1,2,3}

1. 中国有研科技集团有限公司智能传感功能材料全国重点实验室，北京 100088

2. 有研工程技术研究院有限公司，北京 101407

3. 北京有色金属研究总院，北京 100088

MLCC 通过多层陶瓷介质与金属电极的精密叠层结构实现了高体积效率与优异高频特性，其介质材料的核心性能指标为介电常数(ϵ_r)与击穿场强(E_b)。储能微晶玻璃（如铌酸盐体系、钛酸盐体系）通过玻璃与晶相的协同作用，展现出独特的介电特性：高理论击穿强度，可调控的介电常数以及宽温域稳定性，这为开发新一代高性能 MLCC 介质材料提供了新思路。然而，传统的微晶玻璃制备方法为熔融-快冷-可控结晶法，其块体成型方式与制备 MLCC 的流延成型工艺存在冲突。若通过流延工艺制备微晶玻璃，需要先将母体玻璃破碎成粉体，该过程中破坏了整体性，引入了大量的孔隙，势必会导致击穿强度降低，难以获得高击穿强度和储能密度。因此，研究储能微晶玻璃的致密化烧结对实现其在 MLCC 上的应用具有重大意义。

本研究采用两步法致密化策略，利用 X 射线衍射、扫描电子显微镜、变温介电测试系统、铁电测试仪等分析了微晶玻璃样品的孔隙率、晶相组成、形貌、介电性能、电容变化率以及铁电性能。首先采用粉末压片烧结的方法成功制备了不同 Nb/Ti 比例微晶玻璃（ $\text{SrO-BaO-Nb}_2\text{O}_5\text{-TiO}_2\text{-SiO}_2$ ），研究表明：不同 Nb/Ti 比例微晶玻璃均具有致密的微观结构，孔隙率低于 0.52%。当 Nb:Ti=5:1 时，析出晶相为 $(\text{Sr,Ba})\text{Nb}_2\text{O}_6$ ，随着 Ti 含量的增加，当 Nb:Ti=2:1 和 1:1 时，析出晶相主要为 $\text{Ba}_5\text{Nb}_4\text{O}_{15}$ 以及少量 $(\text{Sr,Ba})\text{Nb}_2\text{O}_6$ 。当 Ti 含量继续增加，当 Nb:Ti=1:5 和 1:2 时，析出晶相主要为 $\text{Ba}_2\text{TiSi}_2\text{O}_8$ 和 $\text{Ba}_5\text{Nb}_4\text{O}_{15}$ ，以及少量 $(\text{Sr,Ba})\text{Nb}_2\text{O}_6$ 。随着 Ti 比例的增加，介电常数从 269.8 降低至 21.5，介电损耗从 0.0039 降低至 0.0026，击穿场强从 220 kV/cm 提升至 500 kV/cm。当 Nb:Ti=5:1 时，在 $-60^\circ\text{C}\sim 100^\circ\text{C}$ 范围内，电容变化率在 $-15.0\%\sim +2.5\%$ 之间；而其余 Nb/Ti 比例微晶玻璃样品在 $-60^\circ\text{C}\sim 200^\circ\text{C}$ 范围内的电容变化率在 $\pm 3\%$ 之间，具有优异的温度稳定性。在此基础上，通过流延法制备了致密的铌酸盐微晶玻璃（ $\text{PbO-SrO-BaO-SiO}_2\text{-TiO}_2\text{-Nb}_2\text{O}_5\text{-MgO}$ ），研究表明：通过成分设计，优化烧结工艺，引入 2% 的低熔点玻璃（ $\text{PbO-ZnO-B}_2\text{O}_3\text{-SiO}_2\text{-Al}_2\text{O}_3$ ），获得了致密的铌酸盐微晶玻璃，孔隙率低至 0.30%。析出的晶相主要为 $(\text{Sr,Ba})\text{Nb}_2\text{O}_6$ 相，同时伴随少量的 SiO_2 相，介电常数 ~ 1005 ，击穿场强 ~ 220 kV/cm，有效储能密度 $\sim 0.82\text{J}/\text{cm}^3$ ，在 $-20^\circ\text{C}\sim 120^\circ\text{C}$ 范围内电容温度系数在介于 $\pm 15\%$ 。基于上述结果，实现了铌酸盐微晶玻璃的致密化烧结，在工艺方面和介电性能方面展现了微晶玻璃材料应用于 MLCC 的可能。

D11-03

量子点发光与 Micro-LED 显示

宣瞳瞳*、解荣军

厦门大学

量子点发光器件的发光可以分为光/电激发、辐射复合发光、光子提取三个过程，对器件的发光性能至关重要。因此，理解量子点发光材料构效关系，理性地构筑高性能发光材料；掌握器件结构对光场分布、载流子注入和输运行为的影响，管理光子和载流子物理过程，改善光/电激发和光子提取效率，是构筑高效、高亮度发光器件的两个关键挑战。此外，如何构筑高效、高亮度光转换型 Mini/Micro-LED 阵列是实现超高清显示的关键问题。针对上述关键问题与挑战，紧密围绕“发光材料缺陷态调控→发光器件内光子与载流子管理→微缩化 LED 与显示”的研究路线开展了持续性的研究工作。首先，研制了微区光电测量系统，实现了单颗粒发光材料、微尺度发光薄膜及发光器件的光电性能的精准表征。其次，提出了基于缺陷态调控提升材料发光性能的学术思想，证明了量子点发光材料的表面配体、组成、核壳结构等对缺陷态调控的巨大潜力，构筑了一系列高效纯色量子点发光材料；再次，揭示了发光器件内的光子与载流子管理机制，为构筑高效、高亮度发光器件提供有效的指导原则；最后，提出了主动发光型微型钙钛矿发光二极管（Micro-QLED）微显示技术方案，为发展超高清全彩 Micro-LED 显示技术开辟了新的途径。

D11-04

自然语言处理驱动发光性能数据提取以及材料设计

黄霖、解荣军*

厦门大学材料学院

近年来人工智能与机器学习推进了发光材料研发方法由实验试错法到数据驱动式材料研发的演变，进一步加速了发光构效关系的探索及新材料的研制。然而高质量、大规模发光材料性能数据的缺乏，极大地阻碍了机器学习算法在发光材料领域应用潜力的发挥。材料科学文献是蕴含材料数据的重要来源，然而其中的科学数据多以非结构化文本形式存在，难以被直接读取、统计与再利用。因此需要材料文献数据高效提取技术。文本挖掘技术以其快速获取文本中科学数据及信息的优势被众多领域所融合运用。然而，由于各学科领域专业术语及表述方式的差异性，已有的文本挖掘及自然语言处理工具无法直接在领域间进行应用迁移。因此，针对现有技术发光材料领域实施时出现的难题：一是掺杂发光材料化学式难以完整提取，二是多元材料与性能实体的关系无法准确匹配，三是文献中指代词的使用导致以句为单位匹配时材料实体的丢失，本研究开发了面向无机发光材料领域的自然语言处理框架。经大规模应用验证，该方法从 16559 篇文献中自动构建 6400 组结构-发光关系，化学式提取与关系提取的准确率，召回率和 F1 分数分别为 0.942, 0.972, 0.956, 和 0.889, 0.816, 0.851。并基于 MongoDB 数据管理平台构建了无机发光材料性能数据库，目前可实现高级检索功能。在所获得数据集上筛选出 Eu²⁺掺杂的氮化物和硫化物作为训练数据集，构建了发射波长机器学习预测模型，其预测精度达 $R^2 = 0.88$ 。本研究构建的发光性能数据提取系统突破了传统自然语言处理技术在发光材料领域的适应性局限，建立了从文本挖掘到材料研发的闭环研究范式。

D11-05

用于宽色域背光显示的窄带绿色氮化物荧光粉

章昕煜、解荣军*

厦门大学材料学院

β -Sialon:Eu²⁺(Si_{6-z}Al_zO_zN_{8-z}:Eu²⁺, 0 < z ≤ 4.2)已被公认为是一种用于宽色域背光源的优秀窄带绿色荧光粉，但再进一步降低 β -Sialon:Eu²⁺的带宽以实现高色纯度，则很难实现高量子效率。在此，我们提出了一种巧妙的烧结方法来最大限度地降低 β -Sialon:Eu²⁺颜色纯度和发光强度之间的权衡问题。最终当 z 值减小到 0.03 时，获得超窄带 β -Sialon:Eu²⁺，其发射峰位为 527 nm，半高全宽为 44.9 nm，外量子效率为 37.3%。结构分析表明随着 Al-O 取代量（即 z 值）的降低， β -Sialon:Eu²⁺显示出更高的结构有序性和刚性。通过将 β -Sialon:Eu²⁺(z = 0.03)、红色荧光粉 K₂SiF₆:Mn⁴⁺与蓝色 InGaN LED 芯片相结合，白光发光二极管的光效达到 93.91 lm W⁻¹，色域高达 101.2 %NTSC，这比使用商用 β -Sialon:Eu²⁺所得到的色域要

优越 4.3-16.8 %。

D11-06

缺陷和应变工程协同增强 SrTiO₃ 薄膜的铁电性

陈超、陈德杨*

华南师范大学

在室温条件下, 张力双轴应变已被证实可在 SrTiO₃ 薄膜中诱导出面内铁电性。然而, 对于电子器件的实际应用而言, 面外铁电性更具价值。本研究通过外延应变与缺陷工程相结合的方法, 成功实现了具有显著四方畸变 (c/a 比约为 1.061) 和超高铁电稳定性 (超过 1000 K) 的室温面外铁电 SrTiO₃ 薄膜。光学二次谐波生成 (SHG) 技术验证了四方畸变的增强对铁电性能的显著提升作用。此外, 扫描透射电子显微镜 (STEM) 与 X 射线吸收近边光谱 (XANES) 的联合分析揭示了缺陷与应变协同作用下超四方 SrTiO₃ 薄膜四方畸变增强及强铁电性起源的微观机制。本研究的发现为铁电材料的设计理念提供了新的启示, 其方法和思路有望拓展至其他材料体系, 为提升铁电性能以及探索新奇物理现象提供理论与实验基础。

D11-07

Sn 元素促进 MOCVD 中高质量 ϵ -Ga₂O₃ 单晶薄膜的生成

王龙*、王垚、冯倩、张雅超、张进成、郝跃

西安电子科技大学

MOCVD 系统中, 以高纯氧为氧源难以生成单晶 ϵ -Ga₂O₃ 外延薄膜, 存在与 ϵ -Ga₂O₃ 混合存在的问题, 通常以 H₂O 为氧源, 才能制备出单晶 ϵ -Ga₂O₃ 外延薄膜, 而氧气是制备氧化物半导体最常用的氧源。基于此, 我们在 MOCVD 系统中加入 Sn 元素辅助生长, 成功制备出单晶 ϵ -Ga₂O₃ 外延薄膜, 同时, Sn 元素有效的促进了 ϵ -Ga₂O₃ 外延速率并且具有更高的结晶质量和更小的表面粗糙度, 脉冲法通入 Sn 比直接通入 Sn 元素更加有效。根据反应腔中发生的相关化学方程式、吉布斯自由能的变化以及晶体结构的角度, 分析并解释了 Sn 元素促进 ϵ -Ga₂O₃ 生成的原因。

D11-08

氧化铅基铁电薄膜的疲劳与印记失效机制研究

廖佳佳、周益春*

西安电子科技大学

氧化铅基铁电薄膜因其与硅基先进工艺兼容、强尺寸微缩能力、快速极化翻转等优势, 在非易失性高密度存储器、存算一体等领域中展现了重要的应用潜力。相比于传统钙钛矿结构铁电材料, 氧化铅基铁电薄膜的疲劳和印记失效更为显著, 是限制其应用的主要挑战之一。本报告将围绕氧化铅基铁电薄膜疲劳和失效机制, 从电场循环下氧化铅基铁电薄膜极化翻转的物理过程出发, 阐释偶极子与缺陷耦合导致电荷注入的疲劳失效机制, 并提出抑制电荷注入强度的氧化铅基铁电超晶格薄膜设计策略, 实现了超过 1E12 次的抗疲劳性能。探究了偶极子与氧缺陷耦合导致的印记失效机制, 提出了抑制印记效应的读写方法, 为实现高可靠性氧化铅基铁电器件提供指导。

D11-09

水声探测用多参数共高 PZT 基压电陶瓷的制备及性能研究

肖维、陈政燃、梁瑞虹*

中国科学院上海硅酸盐研究所

压电材料在实现电能和机械能之间的转换方面发挥着至关重要的作用。传统水声换能器用压电陶瓷的材料体系有 P8, P5 和 P4 体系。发射型 P8 压电陶瓷通常机械品质因数 Q_m 高 (>1000), 但其压电系数 d_{33} 低 ($<250\text{pC/N}$); 接收型 P5 压电陶瓷 d_{33} 高 ($\geq 450\text{pC/N}$), 但 Q_m 低 (~ 70); 收发两用 P4 型压电陶瓷具备适中的 d_{33} ($\sim 350\text{pC/N}$) 和 Q_m (~ 700)。在保持其他参数不降低的情况下, 若将功率型 P4 压电陶瓷 d_{33} 提高至 500pC/N 以上, 声呐探测距离可提高一倍以上。因此, 研究兼具 P4 和 P5 性能优势, 即高

d33、高 Qm、高居里温度 Tc 的多参数共高压电陶瓷，对于实现高效能量转换设备的开发，推动现有水声技术的发展具有重要意义。

然而，压电陶瓷的各性能参数之间存在着固有的拮抗关系。例如，在目前的 PZT 基压电陶瓷性能改性方法中，压电性的增强通常以牺牲如 Tc、Qm 等其他关键性能参数为代价，严重限制了多参数共高压电陶瓷的制备。近期，我们提出了一种针对材料相结构、铁电畴和晶格缺陷的多尺度协同调控策略，成功弱化了 d33 和 Qm 之间的拮抗关系。在 PZT 基压电陶瓷中获得了 $d_{33}=502\text{pC/N}$ 、 $Q_m=726$ 、 $k_p=0.69$ 、 $\tan\delta=0.0024$ 和 $T_c=267^\circ\text{C}$ 的优异综合机电性能结合。相较于传统 P4 材料，在未降低 Qm 的情况下，d33 实现了 43.4% 的显著提升。结构分析表明，优异的压电性能来源于准同型相边界（MPB）附近的低能量势垒和极化旋转增强。同时，也得益于高温极化后的高取向畴结构和较小的畴尺寸。另一方面，硬性掺杂钉扎铁电畴结构保持了陶瓷的硬化效果。该工作为设计兼具高 d33、高 Qm 和高 Tc 的大功率压电陶瓷提供了一种新的性能调控思路和方法。

D11-10

基于多态弛豫相的高熵陶瓷电容器的超高储能

张敏*

山东大学

超高功率密度多层陶瓷电容器（MLCC）是电气和电子系统中的关键元件。然而，难以同时实现高储能密度与高储能效率。我们提出了一种具有多态弛豫相的 BaTiO₃ 基无铅 MLCC 的高熵设计。该策略通过降低畴翻转势垒有效地最小化了滞回损耗，并通过晶格畸变和晶粒细化的高原子无序提高了击穿强度。受益于协同效应，我们在 MLCC 中实现了 20.8 焦耳/立方厘米的高储能密度和 97.5% 的超高效率。

D11-11

具有超低工作电压和高极化的柔性无唤醒 Hf_{0.5}Zr_{0.5}O₂ 铁电薄膜

王俊辉 1,2, 姜杰 2*, 廖佳佳 1*, 周益春 1

先进材料与纳米科技学院，西安电子科技大学，西安，700126)

材料科学与工程学院，湘潭大学，湘潭，411105)

由于对可穿戴电子设备市场需求的爆发式增长，柔性透明 HfO₂ 基铁电薄膜引起了广泛关注。然而，超低工作电压与强大且稳定的铁电性能的协同优化是其在便携式设备应用的先决条件，同时实现比较困难。本工作实现了饱和电压仅为 1.3/3 V、剩余极化(2Pr)为 38/60 $\mu\text{C}\cdot\text{cm}^{-2}$ 的柔性 Hf_{0.5}Zr_{0.5}O₂ 铁电薄膜。此外，该薄膜还表现出可忽略的唤醒效应，并具有优异的抗压/抗拉应力稳定性以及耐受高达 150 °C 的高温环境。基于翻转电流测量，研究了不同弯曲半径下的极化翻转动力学，结果表明，薄膜本征极化翻转速度几乎不受弯曲形变影响，证实其卓越的柔性适应性。进一步分析表明，激活场与压应力或拉应力呈现显著负相关，这归因于施加到[111]取向六方晶胞的面内应变降低了能量势垒。我们的工作为超低功耗、柔性且稳定的 HfO₂ 基铁电薄膜的应用提供了新的见解，有望加速其在可穿戴智能终端、柔性传感器等领域的产业化进程。

关键词：柔性铁电体，Hf_{0.5}Zr_{0.5}O₂，超低工作电压，可靠性

D11-12

基于铝掺杂氧化铅基铁电薄膜的 3D FE-NAND 结构研究

杨文杰，石万千，廖佳佳，廖敏，周益春*

(先进材料与纳米科技学院，西安电子科技大学，西安，700126)

HfO₂ 基铁电场效应晶体管（FeFET）得益于与商用闪存类似但更简单的结构，使得其可以集成到三维（3D）NAND 架构中进而有望实现超大容量存储应用。然而，在 3D Fe-NAND 器件制程中，通常需要经历高达 850 °C-1050 °C 的热处理步骤，这将很大程度地影响铁电层的性能，并且随着三维堆叠密度的不断增加，有必要进一步缩减铁电层的厚度。因此，本研究采用实验与 Sentaurus TCAD 仿真相结合的方式，在实验上制备了超高退火温度下（850 °C）仍具有良好铁电性的超薄（4.5nm）HfAlO_x 薄膜；此外，提取

相关参数并利用 Sentaurus TCAD 仿真软件模拟铁电薄膜厚度微缩对 3D Fe-NAND 性能影响, 将较薄的 HfAlO_x 铁电薄膜集成到 FeFET 中时, 通过缩减 HfAlO_x 薄膜的厚度, 能够显著提升器件在较低栅极电压下的存储窗口, 这表明超薄 HfAlO_x 铁电薄膜在三维器件的低功耗操作中具有竞争力。这项工作提供了与 3D Fe-NAND 架构兼容的高性能、高集成 HfO₂ 基铁电场效应晶体管的策略。

关键词: HfAlO_x, 耐高温, 超薄, TCAD, 3D Fe-NAND

D11-13

栅氧化层陷阱对氧化钪基 FeFET 单粒子效应的影响研究

宫明威 1, 乔彬 1, 廖佳佳 1,2, 陈华 1,2*, 周益春 1,2*

1. 西安电子科技大学先进材料与纳米科技学院, 西安 710126

2. 陕西省空天高电子轨道材料与防护技术重点实验室, 西安 710126

*E-mail: hchen@xidian.edu.cn; yichunzhou@xidian.edu.cn

氧化钪基铁电场效应晶体管 (FeFET) 具有结构简单、集成度高、低功耗等优点。实验表明 FeFET 具有优异的抗总剂量效应的能力, 但随着器件尺寸的微缩, 相较于总剂量效应来说, 单粒子效应已成为了主要的辐射损伤效应。粒子入射会在栅氧层中引入缺陷与陷阱, 增加了 FeFET 单粒子效应的复杂性。基于此, 我们利用 Sentaurus TCAD 仿真方法探究铁电层陷阱电荷、界面陷阱电荷对单粒子效应响应的影响。研究发现, 不同类型铁电层陷阱电荷在铁电层本征极化向下时, 对单粒子瞬态脉冲电流的影响是更为严重的; 不同类型 Si/SiO₂ 界面陷阱电荷在铁电层本征极化方向不同时, 均会导致脉冲电流峰值降低; HfO₂/SiO₂ 界面陷阱电荷对单粒子瞬态脉冲电流的影响却很微弱。此研究揭示了缺陷对于 FeFET 单粒子效应的影响机理, 为氧化钪基 FeFET 的航天应用提供必要的理论指导与保障。

关键词: FeFET; 陷阱电荷; 单粒子效应; TCAD

D11-14

从轨道杂化和共价性的角度理解氧化钪铁电性起源

阳江衡 1, 周益春 1*

(1. 先进材料与纳米科技学院, 西安电子科技大学, 西安, 700126)

在以 PZT 为代表钙钛矿型结构中, 人们已经存在一个普遍的认知晶格振动, 即离子的集体运动, 通常被用来解释铁电性的机制; 强烈非谐晶格振动 (称为软模理论) 的冻结被认为会产生宏观铁电相。同时需要指出体系中金属-O 键的共价变化同时会影响体系铁电畸变, 即轨道杂化和共价性是影响铁电性能的重要因素。而在 HfO₂ 体系中, 因为其结构为萤石结构, 极化主要发生在一半的晶胞内 (极化层), 铁电相变机理与 PZT 不同。所以目前没有发现 $q=0$ 的点存在软模的相关相, 难以从经典的角度去理解 HfO₂ 产生铁电相的原因。研究发现通过构建 7 配位萤石结构, 理论上可以在不同元素体系中稳定 PO 相, 所以可以从化学键的局部改变 (轨道杂化和共价) 的角度去理解萤石结构铁电性的产生。通过计算 HfO₂ 中化学键的共价性的改变, 发现局部化学键的轨道杂化和共价性的增强会直接影响到结构的铁电畸变程度, 这可能是 HfO₂ 中铁电相变的起源。进一步的, 通过对体系施加不同应变条件, 发现应变会通过影响化学键进而改变体系的铁电畸变大小, 很好的解释了 HfO₂ 中存在的负压电效应, 这项作为认识萤石结构的铁电性起源提供了新的视角。

关键词: 轨道杂化, 共价性, 氧化钪, 铁电相变

D11-15

氧化钪基铁电薄膜的界面磁电耦合效应

段天鹏 1, 陈昭婷 1, 杨琼 1,†

1 湘潭大学材料科学与工程学院, 湖南省薄膜材料与器件重点实验室, 湘潭, 411105

近年来, 铁电/铁磁异质结构中磁电耦合效应的研究为开发新一代非易失性存储器件提供了重要机遇。其中, HfO₂ 基铁电材料因其优越的硅工艺兼容性而备受关注。本研究采用第一性原理计算方法, 系统揭示了 HfO₂/Ni 和 HfO₂/CrI₃ 两类界面的磁电耦合效应。在 HfO₂/Ni 体系中, 我们发现界面处形成的氧化镍

单层会导致磁电效应反转。这种反转源于 Ni-O 键在费米能级附近产生强的交换分裂特性的反键态。在 HfO₂/CrI₃ 体系中, 我们观测到 CrI₃ 的磁矩对铁电极化方向——极化指向(Pin)/背离(Pout)界面——表现出显著的响应。HfO₂ 的极化诱导了 Pin(Pout)界面上屏蔽电荷的积累(耗尽), 这影响了界面上交换分裂自旋带的相对数量, 从而导致单层 CrI₃ 的总磁矩增强(减少)。通过 HfO₂ 铁电极化的翻转, CrI₃ 的易磁化轴从平面外(Pout)切换到平面内(Pin)方向。此外, 单层 CrI₃ 的居里温度(TC)在 Pout 状态下提高了 78%。我们的工作为界面磁电耦合的研究和多铁性器件的设计提供了有用的指导。

关键词: HfO₂, 第一性原理, 界面磁电耦合

D11-16

基于超晶格结构的氧化钬基铁电薄膜耐久性提升研究

贾世杰 1, 廖佳佳 1*, 姜杰 2*, 周益春 1*

(1. 先进材料与纳米科技学院, 西安电子科技大学, 西安, 700126)

(2. 材料科学与工程学院, 湘潭大学, 湘潭, 411105)

传统信息存储技术在面对海量数据处理时已经接近其物理极限, 难以满足日益增长的数据存储需求。氧化钬(HfO₂)基铁电存储器由于与 CMOS 工艺完全兼容、超强的尺寸微缩及低功耗等特性, 已成为未来最具市场竞争力的新型存储器之一。然而, 在数据反复的写入和擦除过程中, HfO₂ 基铁电存储器频繁出现的薄膜疲劳失效现象, 严重限制了存储器件的服役可靠性。要实现高耐久性的铁电存储器, 必须深入探究铁电存储器件在信息擦写过程中铁电极化翻转的物理过程。其中, 建立微观极化翻转过程与宏观电学性能失效之间的关联, 厘清极化翻转过程中漏电现象产生的物理机制, 并大幅提升铁电薄膜材料的抗疲劳性能显得尤为重要。本工作针对微观极化翻转过程中的电荷注入现象与宏观疲劳失效之间的关联机理进行了深入剖析与阐释。并通过构建 HZO-ZrO₂ 铁电超晶格结构, 从极化翻转速度和退极化场两方面出发, 降低极化翻转过程中电荷注入的持续时间和注入强度, 抑制由于电荷注入诱导的薄膜失效问题, 成功制备出高耐久性(>10¹² 次电场循环)铁电薄膜材料, 并同时具备低矫顽场($2E_c \approx 1.7$ MV/cm)和快极化翻转速度, 这为高耐久性氧化钬基铁电存储器的实现提供新的策略和视角。

关键词: HZO-ZrO₂ 超晶格, 耐久性能, 电荷注入, 退极化场

D11-17

铁电 HfAlO_x 印记失效研究

包克瑜 1, 廖佳佳 1, 彭仁赐 1, 周益春 1*

(1. 先进材料与纳米科技学院, 西安电子科技大学, 西安, 700126)

随着半导体器件尺寸微缩不断逼近物理极限, 各类存储设备已转向三维集成、多值存储等方式来提升存储密度。氧化钬(HfO₂)独有的隔离带结构能避免晶胞间的极化相互影响, 有望实现晶胞级的极化翻转控制, 有着极大的多值存储潜力。然而, 当存储器由单值转变为多值后, 存储状态之间的裕度也会成倍地减小, 这对器件的可靠性提出了更高的要求。与其他钙钛矿结构的铁电材料相比, HfO₂ 存在更严重的印记效应, 在 100 °C 以上仅加热数分钟其电滞回线就会产生超过 1.5 MV/cm 的偏移。这一偏移量与 HfO₂ 本身的矫顽电场相当, 对器件的服役可靠性带来了极大的风险。基于此, 本工作研究了 HfAlO_x 铁电电容中由印记引起的操作偏差, 利用多种表征方法确定了氧空位是 HfAlO_x 印记效应的来源, 通过相场模拟揭示了氧空位引发的内建电场是引起印记失效的直接原因。此外, 我们还提出了一种能够抵消印记效应的预编程策略, 为 HfO₂ 基铁电存储器的应用提供了新的策略和见解。

关键词: 铁电存储器, 高密度存储, HfO₂, 印记

D11-18

原子层沉积 HZO 铁电薄膜的厚度效应调控

曾斌建

(湘潭大学材料科学与工程学院, 湘潭 411105)

基于原子层沉积方法制备的 HfZrO_x (HZO) 铁电薄膜由于 CMOS 工艺兼容性高、结晶温度低、工艺窗

口大和可三维集成等特点,被认为是制作集成铁电器件的绝佳材料。然而,当厚度低于 8 nm 或高于 20 nm 时, HZO 薄膜的铁电性能急剧退化,限制了其产业化应用。基于此,我们开展了如下研究:(1)通过原子层沉积工艺的起始层设计,在 450 °C 下制备出了铁电性能优异的超薄(约 5 nm) $\text{Hf}_{0.5}\text{Zr}_{0.5}\text{O}_2$ 薄膜;(2)提出四方相形核促进铁电正交相形成策略,在 400 °C 下制备出了铁电性能和疲劳性能优异的超厚(约 54 nm) HZO 薄膜。这些工作的开展为开发高密度铁电存储器和集成压电/储能器件等提供了关键支撑。

关键词: 原子层沉积, HZO 铁电薄膜, 厚度效应, 铁电性能

D11-19

无铅钙钛矿高熵陶瓷的储能和光学性能研究

吴啸*, 曾祥福, 林枫, 高旻, 赵纯林

(福州大学材料科学与工程学院, 福州, 350108)

摘要: ABO₃ 型钙钛矿结构具有优异的缺陷容忍能力,易实现掺杂或固溶,钙钛矿氧化物陶瓷通常具有良好的铁电和压电性能,已广泛应用于高性能现代电子设备。近年来,钙钛矿高熵陶瓷的出现使其单一的电学性能研究逐渐拓宽至多样化的光学性能和光-电多功能性。本研究基于合理的组分调控、高熵设计、稀土掺杂、缺陷工程和微结构调制,采用流延成型与冷等静压成型相结合的技术,制备了环境友好型无铅钙钛矿 $\text{Bi}_{0.5}\text{Na}_{0.5}\text{TiO}_3$ (BNT)基高熵陶瓷。在陶瓷中构建了三方-正交-四方-立方多晶相和缺陷偶极子共存的显微结构,最终实现了高极化强度($P_{\text{max}} \sim 50 \mu\text{C cm}^{-2}$),高储能性能(可回收储能密度 $W_{\text{rec}} \sim 11 \text{ J cm}^{-3}$, 储能效率 $\eta > 90\%$),超快放电速度($t_{0.9} = 67 \text{ ns}$),以及储能特性优异的温度、频率和循环稳定性。此外,还研究了稀土离子掺杂对 BNT 基陶瓷发光性能的影响,发现 $\text{Yb}^{3+}/\text{Tm}^{3+}$ 共掺杂为 BNT 基陶瓷带来了反常荧光增强现象。BNT 基高熵陶瓷卓越的储能性能和优异的荧光温度传感功能,为开发新型电-光功能一体化电介质储能材料和智能传感电容器奠定了基础。

D11-20

新型二维 Janus 结构光电特性高通量计算与数据智能系统开发

于亚东 1*, 尚立峻 1, 杨勇丽 1, 代梦艳 1*

1 中国人民解放军军事科学院防化研究院, 北京, 102205, 中国

二维材料因具有独特的物理化学特性,在光电子领域展现出巨大的应用潜力。然而,光生电子-空穴对再复合、光吸收性能差、光电转化效率低等问题往往限制了其进一步发展和实际应用。为此,本研究基于第一性原理高通量计算,对 MA₂Z₄ 型二维材料及其 Janus 结构进行系统设计与筛选,基于稳定性、电子结构、光电功能特性等描述符,从 720 个候选结构中筛选出 10 个具有高光伏转换效率(PCE)的结构和 4 个具有光催化析氢反应活性(HER)的候选结构,阐明了通过构建非对称 Janus 结构引入内建电场对 MA₂Z₄ 材料物化性质的影响规律及其调控机制,为新型 Janus 结构的设计及其在光电子和光催化领域的应用提供关键候选材料。此外,针对二维材料数据高维、多源、异构等特点,本研究开发了基于大模型 LoRA 微调技术的 PDF 文献数据自动采集提取、结构化、入库的数据智能结构化和交互系统,实现“文献数据-结构化数据-二维材料数据库”全流程自动化和智能化;针对数据库中的数据,创新提出了基于多基础模型优化的堆叠机器学习模型,可实现仅根据元素基本属性精准预测其功函数和带隙能物理化学特性,极大提高了预测精度和研发效率。本研究为二维材料的高效筛选和预测奠定了理论和技术基础。

关键词: 二维 Janus 结构; 高通量计算; 二维材料数据库; 数据智能结构化和交互系统

D11-21

CeO₂ 掺杂 Li₂ZnTi₃O₈ 微波陶瓷结构与介电温变特性及其在 5G 微带贴片天线中的应用

张正朴, 石锋, 徐越

摘要: 本文通过固相反应工艺制备 $\text{Li}_2\text{ZnTi}_3\text{-xCe}_x\text{O}_8$ 陶瓷,考察了 1025°C-1125°C 的烧结温度以及不同水平的 Ce^{4+} 替代($x=0.01-0.04$)如何影响陶瓷材料的微观结构和介电特性。X 射线衍射(XRD)结果表明,所有掺杂 Ce^{4+} 的样品均表现出由 $\text{Li}_2\text{ZnTi}_3\text{O}_8$ (LZT) 和 CeO_2 组成的双相结构。当 $x=0.03$ 时,晶胞体积达到峰值,适量的 Ce^{4+} 掺杂可以显著促进晶粒生长,减少孔隙数量,提高样品的相对密度。拉曼

光谱分析表明, Ce^{4+} 掺杂导致 $[\text{TiO}_6]$ 八面体振动模式的变化。拉曼特征峰的位移和半峰全宽 (FWHM) 变化与介电常数和 $Q \times f$ 值的变化密切相关。当 Ce^{4+} 含量为 0.03, 烧结温度为 1050°C 时, $\text{Li}_2\text{ZnTi}_{3-x}\text{Ce}_x\text{O}_8$ 陶瓷表现出最优异的微波介电性能。这些陶瓷的介电常数 (ϵ_r) 为 24.54, $Q \times f$ 值为 54618 GHz, 谐振频率的温度系数 (τ_f) 为 $-13.97 \text{ ppm}/^\circ\text{C}$ 。介电温度谱和损耗温度谱表明, 该材料在 25°C 至 200°C 之间具有更稳定的介电常数。居里温度随着掺杂的增加而升高, 最高居里温度出现在 $x=0.03$ 处。基于 $\text{Li}_2\text{ZnTi}_{2.97}\text{Ce}_{0.03}\text{O}_8$ 陶瓷的 2.65GHz 微带贴片天线的 HFSS 仿真结果表明, 该天线具有合理的增益 (4.6dBi) 和出色的回波损耗 (-23.8dB)。这表明该天线具有广阔的应用前景。因此, $\text{Li}_2\text{ZnTi}_{3-x}\text{Ce}_x\text{O}_8$ 陶瓷是一种有前景的用于 5G 通信技术的微波介电材料。

D11-22

Dy₂O₃ 掺杂 BaTiO₃ 基陶瓷结构和性能调控

郑兴华

福州大学材料科学与工程学院, 福建 福州, 350108

随着车载、航空航天、钻探等领域快速发展, 多层陶瓷电容器 (MLCCs) 朝着高容、宽温稳定、低耗趋势发展, MLCC 用 BaTiO_3 基陶瓷备受关注。本文采用固相法制备了不同含量 Dy_2O_3 掺杂 BaTiO_3 基陶瓷, 对其晶体结构、显微结构、电阻率、离子占位和介电性能进行了系统研究。随 Dy_2O_3 掺杂量增加, 四方相下降。当掺杂量 $\leq 0.4 \text{ mol}\%$ 时, Dy^{3+} 主要占据 A 位, 形成施主掺杂, 导致电阻率从纯 BT 的 $1012 \Omega \cdot \text{cm}$ 骤降至 $105 \Omega \cdot \text{cm}$, 同时具有巨介电常数, 其 1 kHz 室温下获得了 $\epsilon_r = 2.38 \times 10^5$, $\tan \delta = 0.17$ 。当掺杂量 $> 0.4 \text{ mol}\%$ 时, Dy^{3+} 同时占据 A 位和 B 位, 形成自补偿效应, BaTiO_3 基陶瓷显著提升到 $1010 \Omega \cdot \text{cm}$, 而且介电常数回落至 103。同时, 发现通过提高烧结温度可以促进 Dy^{3+} 进入 B 位, 显著提升电阻率。本研究通过烧结温度调控稀土离子在 BaTiO_3 基陶瓷占据情况, 为性能调控和降低成本提供了一种新途径。

关键词: MLCC; 稀土掺杂; 巨介电效应; 核-壳结构; BaTiO_3 基陶瓷

D11-23

触觉应力翻转铁电极化

薛飞

浙江大学, xuef@zju.edu.cn

在铁电材料体系中, 机械应力诱导铁电极化翻转通常依赖于挠曲电效应机制。通过非均匀应力场产生的梯度电场驱动电极化反转, 然而其实际应用面临显著挑战: 需借助原子力显微镜探针在纳米级接触区域施加 GPa 的超高机械应力, 这严重限制了其在触觉传感和存储器件等领域的实际应用。突破这一技术瓶颈的关键在于开发新型低压强驱动策略, 甚至实现触摸量级机械应力下的极化调控。摩擦电效应展现出了独特优势——该效应通过界面接触带电与静电感应耦合作用, 能在千帕级压强下产生数百伏量级的高压输出, 为低功耗铁电极化翻转提供了极具潜力的技术路径。本研究创新地使用摩擦电效应, 突破该领域的巨大压强瓶颈, 实现超低压强的机械活动调控铁电极化, 为构建高灵敏度、低功耗的类触觉系统提供了全新思路。

D11-24

基于纳米界面工程的亚稳相调控研究刘炫伶¹

西安电子科技大学, 先进材料与纳米科技学院, 陕西西安, 710100

新型铁电二氧化铪 (HfO_2)、新型光电薄膜甲脒铅碘 (FAPbI_3) 等具有多晶多相特性的功能材料面临着目标亚稳相不稳定的难题, 限制了其进一步发展应用。本团队探究了应变、掺杂对铁电相氧化铪形成机理的影响。此外, 我们探究了界面工程对相稳定性的影响机制, 针对 FAPbI_3 黑相不稳定的问题探究了 PbS - FAPbI_3 纳米异质结构中 PbS 晶面取向对黑相 FAPbI_3 稳定性的影响机制, 利用 (200) 晶面择优取向的 PbS 纳米片成功构筑了 PbS 纳米片- FAPbI_3 纳米外延结构, 通过利用 Pb-S 化学键合以及纳米异质界面应变同步提高了黑相 FAPbI_3 的热-动力学稳定性, 经计算, 在 Pb-S 化学键合的作用下黑相自由能降低, 而在压缩应变的作用下黑相向黄相相变的能垒提高。优化后的薄膜在 $40 \pm 5^\circ\text{C}$, $40 \pm 5\% \text{ RH}$ 环境下存放 1000h 后仍没有

发生相变，获得了显著提升的相稳定性。

关键词：亚稳相；相稳定性；纳米异质结构；应变工程；界面工程。

D11-25

极化拓扑畴构筑及其在类脑器件中的应用探索

田国 1*, 高兴森 1

1 华南师范大学, 华南先进光电子研究院, 广州, 510006

guotian@m.scnu.edu.cn

铁电材料中的极化拓扑畴(如涡旋畴、中心畴、斯格明子等)带来了诸如拓扑保护、导电特性增强、负微分电容等一系列新颖物性,有望为后摩尔时代高性能信息电子器件提供新途径。为了发展新型极化拓扑器件,需要实现拓扑畴和性能的可控操控。本报告将介绍课题组近期在多铁性 BiFeO_3 薄膜与纳米岛中拓扑畴的构筑与器件应用工作。包括,通过电荷、挠曲电等效应的竞争及协同作用实现拓扑畴自组构生长策略,提出挠曲电诱导自支撑铁电薄膜褶皱处的拓扑畴形成机制,并探索以极化拓扑畴结构作为神经元,应用于类脑计算,实现图像识别等新功能。结果为进一步开发新概念极化拓扑信息器件打下了基础。

关键词: 铁电拓扑、铁电纳米结构、信息器件、类脑

D11-26

基于氧化铅基的铁电电容极化模型研究

党方欢, 郝璞琪, 廖敏*, 周益春

(先进材料与纳米科技学院, 西安电子科技大学, 西安, 700126)

新兴的铁电存储技术(FRAM)对高可靠性的铁电电容模型提出了迫切需求,以精准模拟铁电电容器的极化行为,其核心要求是能够准确计算铁电材料在任意施加电压下的极化响应。然而,现有的铁电电容器模型往往结构复杂,这些模型通常依赖大量参数。仿真过程既耗时又占用大量计算资源,难以在大规模电路仿真中高效应用。本研究构建了一种兼具高精度与高计算效率的铁电电容器仿真模型。随着施加电压的增加,同一方向上的畴也会增加,在此基础上构建了铁电畴变化对应的概率密度函数,基于铁电器件物理学推导出了铁电 SPICE 模型。在本模型中,铁电薄膜的厚度、面积、线性介电常数、饱和极化、矫顽场、电阻率、开关时间常数等参数可以用户定义或从测量数据中提取。其他因素用于控制模拟精度、速度和铁电初始状态。本研究采用实验与 HSPICE 仿真结合的方式,在实验上制备了具有良好铁电性的超薄 HZO 薄膜,将实验与仿真模型数据相对比,表明该模型能够很好的描述在任意电压范围内准确模拟极化行为。本研究构建的铁电电容模型不仅能准确捕捉极化-电压曲线的滞回现象和非线性特性即并模拟其 P-V 特性,而且能够精确描述铁电电容器的电学性能 C-V, I-V 特性。该模型应能够完美集成至主流电路仿真平台(SPICE),满足集成电路设计中的协同仿真需求。

关键词: 铁电电容, 畴概率密度函数, 极化宏模型, HSPICE