18a-D3-7

# 第一原理分子動力学法を用いた Conducting-Bridge Memory における微視的抵抗スイッチング機構の解明

## Elucidation of Microscopic Switching Mechanism in Conducting-Bridge Memory Using Ab Initio Calculation

鳥取大学 [1], TEDREC[2], 独立行政法人 物質材料研究機構 [3]

○由良 翔 [1], 山崎 隆浩 [3], 中田 謙吾 [1]

石井 晃 [1], 岸田 悟 [1,2], 木下 健太郎 [1,2]

Tottori Univ.[1], Tottori Univ. Electronic Display Research Center[2], NIMS[3].

○Sho Yura [1], Takahiro Yamasaki[3], Kengo Nakada[1], Akira Ishii[1],

Satoru Kishida[1,2] and Kentaro Kinoshita[1,2]

E-mail: b08t3073@faraday.ele.tottori-u.ac.jp

【序論】Conducting-bridge RAM (CB-RAM)は抵抗変化型メモリの一種であり，メモリ層である固体電解質或いは金属酸化物を金属電極で挟んだ構造をとる．電圧の印加により金属原子(或いは金属イオン)がメモリ層中を拡散し，金属的な電気伝導パスが生成/断裂する事で抵抗変化が生じるとされている．しかし，金属原子の拡散を直接観測することは困難であり，未だに動作機構の解明が不十分である．本研究では, Cu/$HfO_2$/Pt 構造の CB-RAM に対して行った実験結果を基に計算モデルを構築し，第一原理計算に基づいたシミュレーションを行うことで，金属原子の拡散面方位及び拡散経路を特定することを目指した．【計算】柱状成長された単斜晶 $HfO_2$ 膜で構成される Cu/$HfO_2$/Pt 構造における Cu 拡散経路を求めるため，先ず, $HfO_2$ の表面エネルギー密度の面方位依存性を求めた．続いて, Cu 拡散面に Cu 原子を吸着させたことによる全エネルギーの変化を算出し, Cu の拡散経路を特定した．計算には第一原理分子動力学法プログラム PHASE を用いた．【結果および考察】表面密度計算より，最安定面は(-1 1 1)面であることが示された[1]. Cu 拡散面はこれに垂直な面の内，最も安定な面である(1 1 0)であることが示唆された. fig. 1 及び Fig .2 に Cu 拡散面(1 1 0)面の表面構造と Fig. 1 のメッシュで区切られた領域に Cu 原子を吸着させた時の全エネルギーの分布(最安定点からの差$\Delta E$ で表示)を示す. 結果より, Cu 原子は最表面 Hf 原子を避けて拡散することが示唆された. [1]由良 他，第 60 回応用物理学会学術講演会 27a-PB2-21

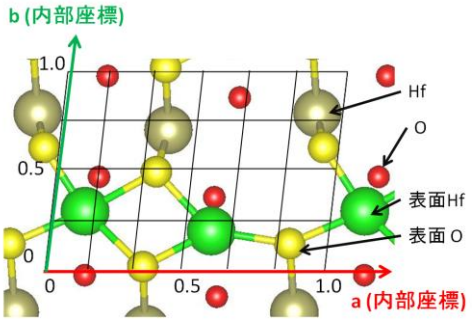


**Fig. 1 Surface structure of $HfO_2$ (110).**

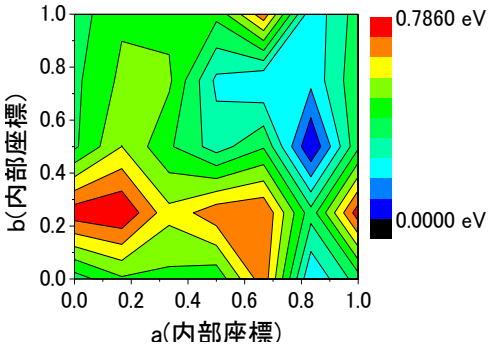


**Fig. 2 ΔE-distribution on $HfO_2$ (110) surface.**



© 2013 年　応用物理学会