

Conducting-bridge メモリにおける Cu 拡散経路の特定

Clarification of Cu migration path in conducting-bridge memory

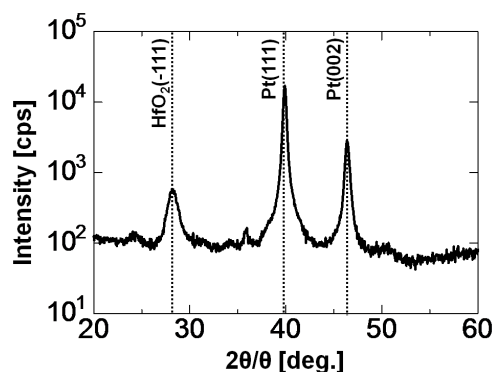
鳥取大学¹, TEDREC², 富士通研³ ○由良 翔¹, 木下 健太郎^{1,2}, 山崎 隆浩³, 中田 謙吾¹石井 晃¹, 岸田 悟^{1,2}Tottori Univ.¹, Tottori Univ. Electronic Display Research Center², FUJITSU Lab. Ltd.³○Sho Yura¹, Kentaro Kinoshita^{1,2}, Takahiro Yamasaki³, Kengo Nakada¹, Akira Ishii¹and Satoru Kishida^{1,2}

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

【序論】Conducting-bridge Random Access Memory (CB-RAM)は抵抗変化型メモリの一種であり、固体電解質を金属電極で挟んだ構造をとる。電圧の印加により金属イオンが固体電解質中を拡散し、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、金属原子がどの経路をどのような機構で拡散するか直接観測する事は困難であり、未だに動作の解明が不十分なままである。そこで本研究では、(1) Cu/HfO₂/Pt 構造の CB-RAM の HfO₂ 柱状結晶表面の方位を求め、(2) 表面上の任意の各サイトに Cu を置いた時の全エネルギーを計算することにより Cu の拡散経路を特定する。【実験】初めに単斜晶 HfO₂ の複数の面方位 [(-111), (111), (110), (01-1), (101)]をシミュレーション・ソフトウェア(Fujitsu SCIGRESS-ME)を用いて切り出し、表面エネルギー密度を第一原理分子動力学法プログラム PHASE により求めた。計算結果を Pt 上に柱状成長した HfO₂ の X 線回折(XRD)測定の結果と比較した。【結果及び考察】表 1 に各面方位に対する表面エネルギー密度の計算結果を示す。既計算例 [1]とほぼ類似の傾向が確認され、最も表面エネルギー密度が低いのは(-111)面であった。故に、結晶成長方向の面方位は(-111)であることが示唆され、実際に観測された XRD の結果(図 1)と整合した。次いで(111), (110)面の順に表面エネルギー密度が低い。故に、(-111)に垂直な面方位の中では、(110)が最も表面エネルギーが低く、柱状成長した HfO₂ の側面は(110)面によって支配的に形成される可能性が高い。この表面上を金属原子が拡散することで電気伝導パスの生成/断裂が生じると考えられる。銅原子の吸着エネルギーの吸着サイト依存性に関する詳細は発表当日に報告する。[1] Mukhopadhyay *et al* ,PHYSICAL REVIEW B 73,115330 (2006).

表 1 表面エネルギー密度の面方位依存性

面方位	表面エネルギー密度		誤差(%)
	計算値(J/m ²)	既計算例 ^[1] (J/m ²)	
(-1 1 1)	1.048	0.993	5.52
(1 1 1)	1.230	1.199	9.89
(1 1 0)	1.435	1.388	3.41
(0 1-1)	1.451		
(1 0 1)	1.845	1.550	19.04

図 1 HfO₂ の薄膜の X 線回折測定結果