

第一原理計算による抵抗変化型メモリ材料 ZrO_2 へのドーピング評価*Examination of atomic doping effect for ZrO_2 by first-principles calculations*

東京都市大総研

○大島 翔太, 岩松 雅夫, 丸泉 琢也, 白木 靖寛

ARL Tokyo City University

○S.Oshima, M.Iwamatsu, T.Maruizumi, Y.Shiraki

E-mail: g1281311@tcu.ac.jp

1 背景:

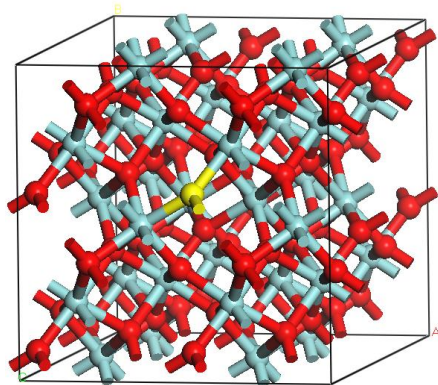
抵抗変化型メモリ材料の一つとして、 ZrO_2 が検討されている。本材料に関しては、酸素欠損形成が抵抗変化機構に関与している。また、実験的には、Al などのⅢ属元素添加による特性改善が行われている。本研究では実験、計算ともに評価されていないⅢ属元素として Y, Mg をドーピングした ZrO_2 について、酸素欠損生成エネルギーの変化などを第一原理計算により検討したので報告する。

2 解析モデル

第一原理計算バンド計算には CASTEP®を用いた。平面波基底の打ち切りは 340eV、交換相関ポテンシャルには Perdew Wang の GGA 近似、Vanderbilt 型のウルトラソフト擬ポテンシャルを用いた。解析モデルには monoclinic ZrO_2 の単位胞を a, b, c 各方向とも 2 倍したスーパーセルを用い、酸素欠損の生成エネルギー、欠陥準位、荷電安定性、そしてドーパント導入時の酸素欠損生成エネルギーを評価した。図 1 に酸素欠損を導入したスーパーセルモデルを示す。Zr を置換するドーパント元素には Al, Y, Mg の 3 種を検討した。

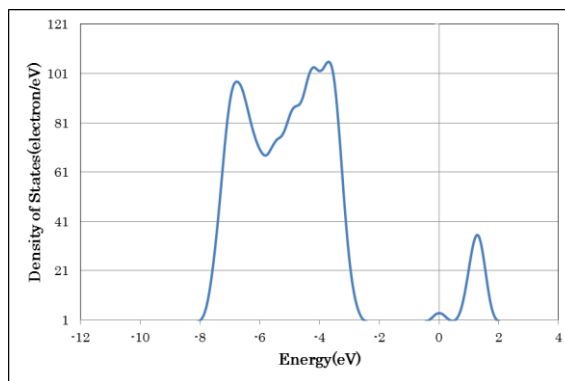
3 解析結果

無添加 ZrO_2 については、酸素欠損生成エネルギーが 6.79eV となり、文献値と一致し、ギャップ中に欠損準位を示した(図 2)。ドーパント添加に伴う酸素欠損生成エネルギーの変化や電子状態変化などの詳細に関しては当日述べる。本研究の一部は、私立大学戦略的研究基盤形成支援事業(平成 21 年～平成 25 年)を受けて行われた。

図 1. ZrO_2 の酸素欠損モデル構造。

酸素欠損部は黄色で示した。

参考文献;Applied Physics Letters **96**, 123502 _2010

図 2.酸素欠損を含む ZrO_2 の状態密度。