18p-PA7-10

第一原理分子動力学法に基づく導電性ブリッジ形成シナリオの検討

A scenario for the formation of a conducting-bridge based on first-principle calculations

鳥取大学 [1]，TEDREC[2]，物材機構 [3]，東大生産研 [4]

○木下健太郎 [1,2]，山崎隆浩 [3]，森山拓洋 [1]，大野隆央 [3,4]，岸田悟 [1,2]

Tottori Univ.[1], Tottori Univ. Electronic Display Research Center[2], NIMS[3], IIS, Univ. of Tokyo[4]

°Kentaro Kinoshita[1,2], Takahiro Yamasaki[3], Takumi Moriyama[1], Takahisa Ohno[3,4], and Satoru Kishida[1,2]　E-mail: kinoshita@ele.tottori-u.ac.jp

我々は，これまで単斜晶 HfO_2 柱状結晶で構成される多結晶薄膜を電極で挟んだ Cu/HfO_2/Pt 構造の Conducting-Bridge RAM (CB-RAM)デバイスのスイッチング機構を解明するため，実際の結晶構造と実験結果を反映させた計算モデルを提案し，HfO_2 の表面エネルギーの面方位依存性や HfO_2 表面における Cu の吸着エネルギーE_{ads}マップを算出してきた [1]．これにより，Cu 原子の拡散経路の特定が可能となり，表面 O 原子が欠損することで拡散経路が劇的な変更を受け，スイッチング電圧が増加することが示された．更に，水酸化物イオン OH^- が表面 O 原子の欠損を修復し，拡散障壁を低減させる可能性が示されたことから [2]，HfO_2-CB-RAM への水供給によるスイッチング電圧・電流の低減 [3]をある程度説明することもできた．しかし，これまでの報告はあくまでも HfO_2 の単位表面格子あたり 1 個の Cu 原子を置いた場合を扱ったものであった．

今回，単斜晶 HfO_2(110)表面上に Cu 原子を 1 原子から順に吸着させた構造を作り，第一原理計算プログラム PHASE[4]を用いて構造緩和と電子状態計算を行うことで，Cu フィラメントが実際に形成され得るか否か検証を試みた．表面単位格子には Hf 原子が 2 個，O 原子が 4 個露出している．最初の 1 原子は吸着エネルギーが最小になる最安定点に置かれ，表面酸素と結合を組むことが確認された．Fig. 1 の平面(左)及び側面 (右) 図に示されるように，4 原子吸着時に Cu の列状の一次元伝導経路が完成する．しかし，E_{ads} は原子数が増えるに従って減少 (安定化)するが，バルク状態に比べれば 1 原子あたり 1 eV 程度不安定であることが分かった．この結果は，電極金属が拡散することで低次元の伝導経路が形成され，低抵抗状態を発現するとする従来の単純な描像とは別のスイッチング機構の存在を示唆している可能性がある．当日は，表面欠陥を介した伝導機構等についても検討した結果を述べる．[1] 由良他，応用物理学会 2013 春季 27a-PB2-21. [2] 由良他，応用物理学会 2013 秋季 18a-D3-7. [3] Hasegawa *et al*., ECS Trans., 50, 61 (2013). [4] https://azuma.nims.go.jp/.

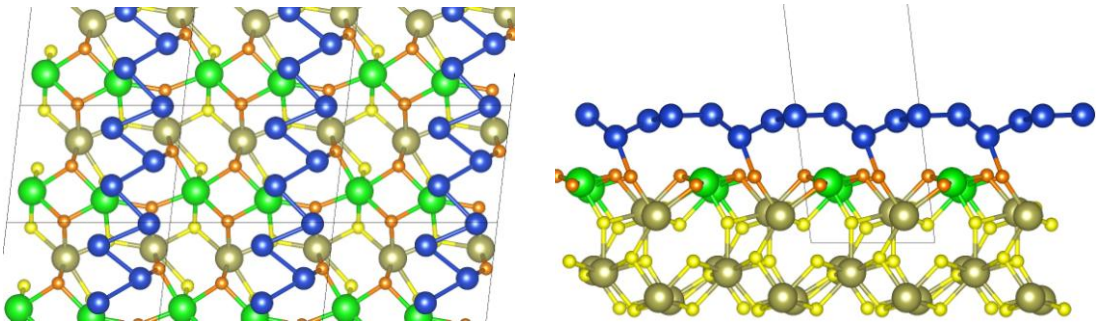

Fig.1 A top (left) and a side (right) views of a 4-Cu-atom-adsorbed HfO_2 surface structure. Yellow and red balls are O atoms, golden and green balls are Hf atoms. Blue balls are Cu atoms. The unit cells are indicated with thin lines. One Cu atom is coordinated with a surface O atom, while the other Cu atoms have no bond with surface atoms.

© 2014 年　応用物理学会