

抵抗変化メモリ(ReRAM)の導電性パス生成機構の検討 ～ NiO の様々な面方位の第一原理電子状態解析 ～

鳥取大工¹, 物材機構², 東大生産研³, TiFREC⁴

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

Formative Mechanism of Conducting Path in Resistive Random Access Memory

～ First-Principles Electronic State Analysis for Various NiO Surfaces ～

Tottori Univ.¹, NIMS², IIS, Univ. of Tokyo³, TiFREC⁴

○T. Moriyama^{1,4}, T. Yamasaki², T. Ohno^{2,3}, S. Kishida^{1,4}, K. Kinoshita^{1,4}

E-mail: b08t3067@faraday.ele.tottori-u.ac.jp

ReRAMは遷移金属氧化物(TMO)を電極で挟んだ単純構造を持ち、高集積化が容易であることから、微細化限界に直面したFlashの次世代メモリとして期待されている。ReRAMの動作機構解明に向けて、第一原理計算による導電性パス(フィラメント)の生成機構の検討が盛んに行われている。これまでに単結晶 TMO モデルに酸素欠陥を導入することで、導電性が生じるとの計算結果が報告されている[1]。しかし、実際に作製される ReRAM 素子は多結晶 TMO 薄膜が用いられる事が多く[2]、単結晶 TMO モデルでは粒界がフィラメント生成に及ぼす影響が考慮されていない。

本研究では実際に作製した柱状成長した多結晶 NiO から成る ReRAM の表面・断面 SEM 像及び XRD パターンから最も単純な NiO 結晶粒モデルを仮定し、第一原理計算プログラム PHASE[3]を使って NiO の様々な面方位表面に対する表面エネルギー密度を計算し、モデル構造の構成面に最も適切な面方位を割り当てた(Fig. 1)。更に、これらの表面に対する電子状態を詳しく解析した。表面の計算には周期スラブモデルを採用し、スラブ中央の原子以外は構造緩和を行った。このとき、真空層の厚さは全ての周期スラブモデルにおいて 10 Å で統一した。電子相関は GGA を用い[4]、ハバード補正項 $U = 5.0$ eV を導入した。Fig. 2 に(001)表面および(11-2)表面における Ni および O の局所状態密度(LDOS)をそれぞれ示す。比較として、単結晶 NiO の DOS から求めたバンドギャップ($E_g = 3.1$ eV)を示す。(001)表面ではバルク単結晶と同様に絶縁性を示すが、(11-2)表面は欠陥の無い(理想)表面を出しているにも関わらず、導電性を持ちやすい事が分かる。これらの結果は、欠陥によるフィラメントの生成箇所が(001)表面である事を示唆している。

[1] H. D. Lee *et al.*, Phys. Rev. B **81**, 193202 (2010). [2] S. Seo *et al.*, Appl. Phys. Lett. **85**, 5655 (2004).

[3] <http://www.ciss.iis.u-tokyo.ac.jp> [4] J. P. Perdew *et al.*, Phys. Rev. Lett. **77**, 3865 (1996).

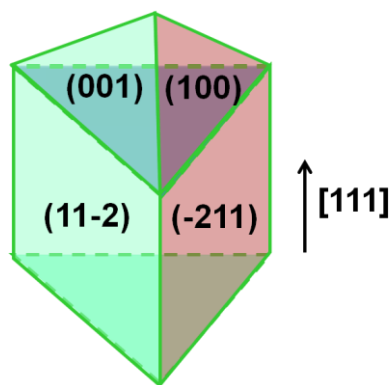


Figure 1 NiO grain model based on surface and cross-sectional SEM images and XRD pattern of NiO.

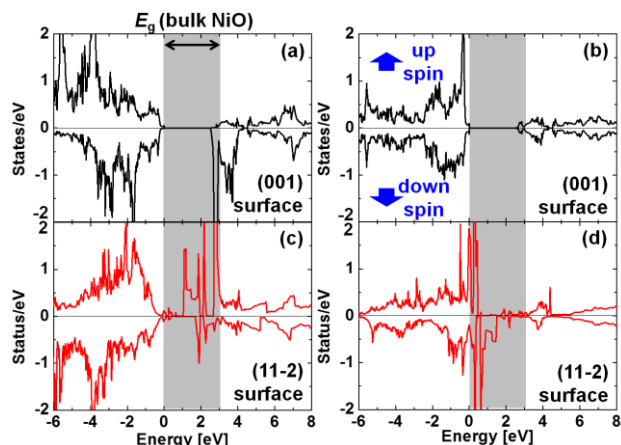


Figure 2 (a) Ni- and (b) O-LDOS on (001) surface. (c) Ni- and (d) O-LDOS on (11-2) surface.