抵抗変化メモリ(ReRAM)の導電性パス生成機構の検討
～ NiO の様々な表面状態に対する電子状態解析 ～

鳥取大工 [1], 物材機構 [2], 東大生産研 [3], TiFREC [4]
○(DC)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
~ Electronic State Analysis for Various NiO Surfaces ~

Tottori Univ.[1], NIMS [2], IIS, Univ. of Tokyo[3], TiFREC[4]
○T. Moriyama[1,4], T. Yamasaki [2], T. Ohno[2,3], S. Kishida[1,4], K. Kinoshita[1,4]
E-mail: kinoshita@ele.tottori-u.ac.jp

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の生成機構の検討が行われている．これまでにメモリ層として使われる遷移金属酸化物(TMO)の単結晶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]，第一原理計算においても粒界が抵抗変化機構に与える影響を考慮する必要がある．

我々はこれまでに実際に作製した多結晶 NiO 薄膜の形状特性を基に NiO 結晶粒モデルを作り，第一原理計算プログラム PHASE/0[3]を使って NiO の様々な面方位の表面エネルギー密度 E_{surf} を計算する事で，モデルの構成面に最も適切な面方位を割り当てた(Fig. 1) [4]．また，表面に対する電子状態を解析した結果，(001)表面は単結晶 NiO と同様に絶縁性を示す一方，(11-2)表面は導電性を持つことが分かった．これは，結晶粒モデルの側面(即ち，結晶粒界)が導電性を持ちやすい事を示唆しており，実際の多結晶 NiO 薄膜-ReRAM の初期状態が高抵抗であることと合致しない．

今回，(11-2)表面に微小な(001)表面から成るテラス構造を導入した計算モデルを作製し(Fig. 2)，E_{surf} を計算した．計算には周期スラブモデルを採用し，スラブ中央の原子のみを固定し，それ以外は緩和した．真空層の厚さは 10 Åに固定した．電子相関は GGA を用い[5]，ハバード補正項 U_{eff} = 5.3 eV を導入した．Table 1 に E_{surf} のテラスの有無および表面面方位依存性を示す．(11-2)表面に対してテラス構造を導入することで，E_{surf} が 0.21 J/m^2 減少し，安定な表面になることが分かる．これは，(001)表面の E_{surf} = 0.87 J/m^2 が他の面方位の E_{surf} と比べて低いことに起因する．これらの結果は，導電性を持つ(11-2)表面において絶縁性を示す微小な(001)表面が露出することで結晶粒側面が絶縁性を持ち，微小な(001)表面に導電性パスが導入される可能性を示唆している(Fig. 1)．

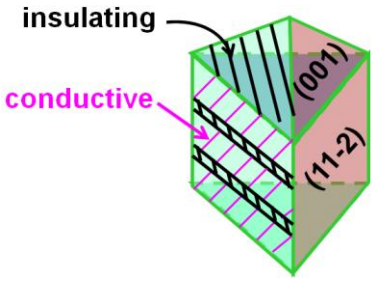

Fig. 1 NiO grain model and its conductivity.

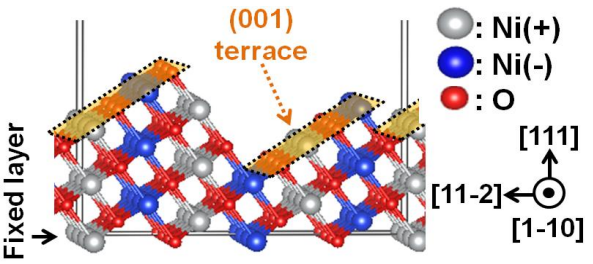

Fig. 2 (11-2) surface with (001) terraces.

Table. 1 E_{surf} for various surface structures.

Orientation	(001) terrace	E_{surf} [J/m^2]
(11-2)	w/	2.12
	w/o	2.33
(001)	-	0.87

[1] Lee *et al.*, Phys. Rev. B **81**, 193202 (2010). [2] Seo *et al.*, Appl. Phys. Lett. **85**, 5655 (2004). [3] https://azuma.nims.go.jp/ [4] 森山等，第 62 回応用物理学会春季学術講演会，13p-P5-4 (2015). [5] J. Perdew *et al.*, Phys. Rev. Lett. **77**, 3865 (1996).

© 2016年 応用物理学会