多結晶 HfO_2 における抵抗スイッチング現象の機構解析
-第一原理計算によるアプローチ-

Analysis of resistive switching mechanism in polycrystalline HfO_2 by using first-principles calculation

鳥取大工 [1], 物材機構 [2], TiFREC [3], 東京理科大 [4]
○(M1C)肥田聡太 [1], 山崎隆浩 [2], 奈良純 [2], 大野隆央 [2], 岸田悟 [1,3], 木下健太郎 [4]
Tottori Univ.[1], NIMS [2], TiFREC [3], Tokyo Univ. of Science [4]
○S. Hida[1], T. Yamasaki [2], J. Nara[2], T. Ohno[2], S. Kishida[1,3], K. Kinoshita[4]
E-mail: b13t3052@faraday.ele.tottori-u.ac.jp

【序論】HfO_2 は抵抗変化メモリ(ReRAM)のメモリ層として有用であることがこれまでに報告されている[1]. デバイス応用を加速するためには, HfO_2 の特性を理解することが重要である. これまでの研究では HfO_2 単結晶中に酸素欠陥(Vo)を導入することで電気的特性に変化が生じることや結晶粒界における Vo の安定性が理論計算から求められている[2]. しかし, これらの研究で用いられる HfO_2 の計算モデルは, 実際の ReRAM 素子における HfO_2 とは形状や結晶性, 注目すべき個所が異なる場合が殆どである. そこで, 本研究では, Pt/HfO_2/Pt 構造の ReRAM を用いて取得した実験結果から計算モデルを構築し, 材料の特性を詳しく調査した.【計算モデル及び計算方法】 これまでの HfO_2 の形状評価[3]から Fig. 1(a)の走査電子顕微鏡(SEM)像のように HfO_2 は多結晶となっており[-111]配向していることがわかっている. この結果から Fig. 1(b)の様な柱状結晶粒モデルを構築することができる. このモデルにおける結晶粒表面の面方位を調べるために HfO_2 の各面方位の安定性を表面生成エネルギー(E_{surf})から評価した. また, Vo 生成エネルギー(E_{Vo})および状態密度(DOS)を計算して表面への Vo 導入による影響を評価した. 計算には第一原理分子動力学プログラム PHASE/0 を用いた.【結果及び考察】 HfO_2 の各面方位の E_{surf} を Table 1 に示す. E_{surf} の計算結果から, 多結晶 HfO_2 の結晶粒表面として[-111]に垂直であり, 最も E_{surf} が小さい(110)面を選ぶことにする. E_{Vo} と(110)面からの Vo の距離の関係を Fig. 2 に示す. この結果から Vo は表面近傍に生成されやすいことがわかる. また, Fig. 3 の Vo 表面導入個数を変えた DOS から Vo が結晶粒表面の電気伝導に大きな影響を与え得ることがわかる. 以上の結果は, 多結晶 HfO_2 をベースとする ReRAM 素子中の V_O は結晶粒表面に生成され易く, V_O の凝集と拡散により抵抗スイッチングが生じることを示唆する.

[1]Goux *et al.*, APL **97**, 243509 (2010). [2] Bersuker *et al.*, Solid-State Electronics **65-55**, 146 (2011). [3] Yura *et al.*, JPS Conf. Proc. **1**, 012091 (2014).

【謝辞】本研究の一部は, NIMS, 東京大学物性研究所および京都大学情報環境機構のスーパーコンピュータシステムを用いて得られた.

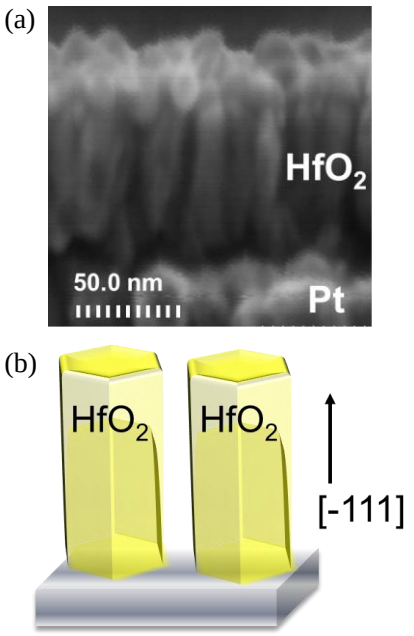

Fig. 1 (a) Cross sectional image of HfO_2 /Pt by SEM. (b) Calculation model of polycrystalline HfO_2.

Table 1 Surface energies for the several orientations of HfO_2.

Orientation	E_{surf} [J/m^2]
(-111)	1.038
(111)	1.219
(110)	1.349
(01-1)	1.374
(101)	1.636
(010)	1.844

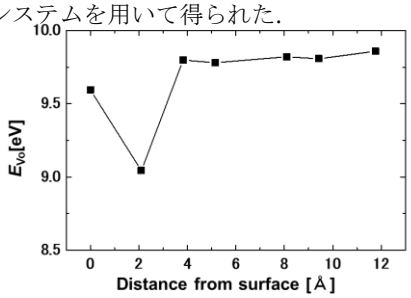

Fig. 2 Vacancy formation energy as a function of distance from HfO_2 (110) surface.

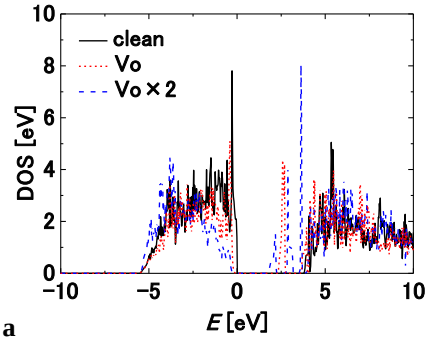

Fig. 3 Layer DOS of clean and defective HfO_2 (110) surfaces.

© 2018年 応用物理学会