

多結晶 NiO 薄膜における溶媒供給効果の理論的検討

Theoretical study of the effect of solvent supply in polycrystalline NiO films

東理大理¹, 鳥取大工², 物材機構³○肥田聡太^{1,2,3}, 酒井貴弘¹, 森田巧¹, 山崎隆浩³, 奈良純³, 大野隆央³, 木下健太郎¹Tokyo Univ. of Science¹, Tottori Univ.², NIMS³○S. Hida^{1,2,3}, T. Sakai¹, T. Morita¹, T. Yamasaki³, J. Nara³, T. Ohno³, K. Kinoshita¹

E-mail: b13t3052@faraday.ele.tottori-u.ac.jp

【序論】抵抗変化メモリの実用化に向けて、金属酸化物薄膜中における抵抗変化機構の解明が急がれる。我々は実験と理論計算を相補的に用いることで、多結晶 NiO 薄膜の粒界表面が様々なバンドギャップを持つ微小表面の組み合わせによって構成されており、粒界原子の僅かな移動による局所的な面方位の変化が抵抗変化の起源であるとする、Grain surface tiling model を提案した[1]。また、溶媒供給実験の結果から NiO に溶媒を供給すると抵抗値や動作電圧に影響を及ぼすことがわかった[2]。本研究では様々な面で構成されている粒界表面における溶媒供給効果を理論的に解明するために NiO の粒界粒表面にあたる(001)面と(11-2)面[1]に水を加えた計算を行うことにより、NiO への溶媒供給効果を理論的に解析した。【計算方法】多結晶 NiO の(001)面は絶縁性、(11-2)面は導電性となっている。それぞれの表面に対して水吸着によるエネルギー、構造及び電子状態密度(DOS)の変化を評価した。計算には第一原理分子動力学プログラム PHASE/0[3]を用いた。【結果及び考察】Fig. 1 に NiO の(a) (001)面, (b) (11-2)面に H₂O を一つ加えたときの構造変化を示す。(001)面の場合には H₂O の状態で吸着しているのに対し、(11-2)面の場合には H₂O が H と OH に解離して吸着していることがわかる。また、この時のそれぞれの吸着によって得られるエネルギーは(001)面:0.552 eV, (11-2)面:1.66 eV と(11-2)面の方がより H₂O が吸着しやすい。Fig. 2 に(a) (001)面, (b) (11-2)面の H₂O 供給前後における H₂O 付近の局所 DOS を示す。(001)面の場合には H₂O 供給前後で DOS に大きな変化は無く、絶縁性を保つのにに対し、(11-2)面の場合には導電性の面が H₂O 吸着により、絶縁性に変化した。これは、導電性(11-2)面が解離した H と OH によって終端されたために表面状態が変わり、絶縁性に変化したと考えられる。即ち、H₂O の解離吸着によって膜表面が安定化し、面の導電性が変化し得る。この結果は、過去の溶媒供給による NiO の抵抗値変化と整合する[2]。[1]Moriyama *et al.*, JAP **120**, 215302 (2016). [2]肥田等, 第 78 回応用物理学会秋季学術講演会, 5p-A202-7 (2017). [3]T. Ohno *et al.*, SC '07 Proc. 2007 ACM/IEEE conference on Supercomputing, 57. 【謝辞】本研究の一部は NIMS の材料数値シミュレータを用いて得られた。

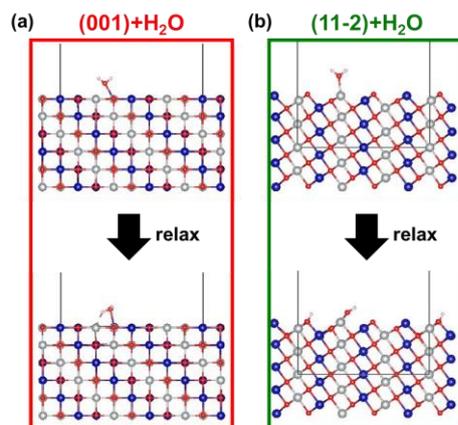


Fig. 1 Structural changes of (a) (001) and (b) (11-2) surfaces by H₂O supply

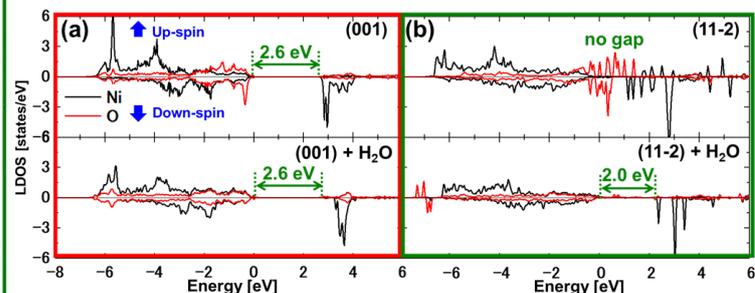


Fig. 2 Local density of states Ni and O on (a) (001) and (b) (11-2) surfaces by H₂O supply