ドナー密度分布制御型メモリスタ素子における抵抗変化機構の有限要素法シミュレーション

Finite Element Analysis of Resistive Switching Characteristics in Memristive Devices

阪大院基礎工　○(M2)永田善也，藤平哲也，酒井朗

Osaka Univ.　°Zenya Nagata, Tetsuya Tohei, Akira Sakai

E-mail: sakai@ee.es.osaka-u.ac.jp

背景：脳神経回路を模したアルゴリズムの開発により人工知能技術が大きく発展した。一方で、これらソフトウェア実装に止まらず、脳型コンピュータのハードウェア実装に大きな期待が寄せられている。脳神経回路のシナプスの役割を模倣可能な新規の受動素子として、メモリスタが注目されている。メモリスタ素子は、素子抵抗を変化させることで流れた電荷量を記憶する。Strukov らによって TiO_2 系メモリスタの抵抗変化メカニズムに関して、キャリア（電子・正孔）及びドーパント（酸素空孔）のドリフト・拡散を考慮する 1 次元モデルが提唱されている [1]。我々は、これまでに還元 TiO_2 結晶を用いた独自の 4 端子構造を持つメモリスタ素子を開発してきた[2]。この素子では、4 端子への電圧印加によりもたらされる（擬）2 次元的な酸素空孔分布の変化が抵抗変化において本質的な役割を果たす。今回、二次元平面型端子デバイスの抵抗変化特性の理論的解析を目的として、ドーパントのドリフトと拡散を考慮した二次元有限要素法シミュレーションモデルを構築し、電圧印加による端子間のドーパント（ドナー）密度分布を評価した。

実験方法：本研究では正方形型の電極を想定し、素子内に一様なアクセプタ密度N_Aを仮定する。また、電極とのショットキー的接合を想定するために、電極部のドナー密度N_{D0}及び、抵抗変化層のドナー密度の平均値N_D^*の関係は$N_D^*/N_{D0} = 0.1$に設定した。キャリアのドリフト・拡散を考慮した定常状態でのキャリア（電子・正孔）連続式(1)(2)及び、ポアソン方程式(3)をニュートン法により解くことでキャリア密度分布$n(x,y), p(x,y)$とポテンシャル分布$\varphi(x,y)$を決定する。次に、酸素空孔のドリフト・拡散を考慮した連続式(4)をクーラン条件[3]の下で解き、新たなドナー密度分布$N_D(x,y)$を求める。これら(1)(2)(3)及び、(4)を再帰的に解くことで、特定の電圧印加条件でのドナー密度分布変化を評価した。

$$\nabla \cdot (-en(x,y)\mu_n \nabla \varphi_n(x,y) \;=\; 0 \tag{1}$$

$$\nabla \cdot (-ep(x,y)\mu_p \nabla \varphi_p(x,y) \;=\; 0 \tag{2}$$

$$-\varepsilon \Delta \varphi(x,y) = e(p(x,y) \;-\; n(x,y) \;+\; N_D(x,y) \;-\; N_A) \tag{3}$$

$$\frac{\delta N_D(x,y)}{\delta t} \;=\; \nabla \cdot (D_i \nabla N_D(x,y) \;-\; N_D(x,y) u_i \nabla \varphi(x,y)) \tag{4}$$

実験結果：図 1 は電極 1 と 2 を接地した場合のドナー密度分布のシミュレーション結果を示す。空間電界が生じることにより、電極付近ではドナー密度が減少した分布となる。図 2 は電極 1 に$v/v_0 = 20$の電圧を印加した場合のドナー密度分布である。図 1 と図 2 の比較から、電圧印加に起因する電場により、ドナー密度分布が変化していることがわかる。また、図 2 の電極間に着目すると、電極 1 から電極 2 へとドナーがドリフトし、電極 1 付近でドナー密度の低い領域が形成されている。この領域の形成によって、電極間の抵抗が大きくなると予想され、この電極周辺の二次元的な高抵抗領域の形成が、電圧印加に起因する素子の抵抗変化（高抵抗化）に寄与していると推測される。

謝辞：本研究は、JSPS 科研費 JP17H03236、 JP17K18881 の助成を得て行われた。

[1] Strukov, Small 5, 1058, 2009. [2] Takeuchi *et al.*, Sci. Rep. *in press.* [3] Courant, *et al.*, IBM J. Res. Dev, 11, 215, 1967.

Fig. 1. Donor concentration distribution while both electrodes are grounded.

Fig. 2. Donor concentration distribution while voltage is applied to electrode 1 under the condition of v/v_0=20.

© 2019年 応用物理学会