

## ЭЛЕКТРОННЫЕ СВОЙСТВА МЕТАСТАБИЛЬНЫХ АТОМАРНЫХ СТРУКТУР В ОКСИДНЫХ ДИЭЛЕКТРИКАХ ПРИ ФОРМОВКЕ В ЭЛЕКТРИЧЕСКИХ ПОЛЯХ

*Ремизевич М.В.*

*Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники  
г. Минск, Республика Беларусь*

*Данилюк А.Л. – канд. физ.-мат. наук, доцент*

В данной работе моделируются электронные свойства метастабильных атомарных структур, возникающих в оксидных диэлектриках при формовке в электрических полях.

В настоящее время наноструктуры на основе диоксида гафния перспективны для использования в энергонезависимой резистивной памяти с произвольной выборкой (RRAM). Оксид гафния имеет высокую диэлектрическую проницаемость, относительно высокую энергию запрещенной зоны, и образует термодинамически устойчивый интерфейс с кремнием. Электрический пробой диэлектрика приводит к переключению в состояние с низким сопротивлением и создание высокой плотности ловушек, что делает возможным долговременное хранение заряда (до  $10^6$ - $10^7$  с). Электрические, структурные и спектроскопические характеристики, диоксида гафния, возникающие в результате пробоя, активно изучаются [1, 2].

В этой области достигнуты практические результаты, основным из которых является формирование стабильных наноразмерных слоев диоксида гафния, сопротивление которых переключается при относительно низком электрическом потенциале. Тем не менее, есть еще много нерешенных проблем, связанных с выявлением наиболее важных механизмов, связанных с переключением диоксида гафния из состояния с высоким сопротивлением в состояние с низким сопротивлением. Одна из таких проблем связана с наличием случайного телеграфного шума в диоксиде гафния. В данной работе, исходя из гипотезы о бистабильном характере ловушечных состояний, представлены результаты моделирования электронных свойств бистабильных ловушечных состояний в элементах резистивной памяти.

Электронные свойства метастабильных и бистабильных дефектных состояний существенно меняются при изменении их конфигурации или заряда, а их модель включает в себя представление о конфигурационной и зарядовой зависимости, как энергии связи электрона, так и энергии самого дефектного состояния в матрице. В наноразмерных оксидных диэлектриках при их формовке электрическим полем возникают проводящие филаменты (нити), содержащие или обедненные кислородом области: кислородные вакансии или межузельные атомы кислорода. Такие дефекты кристаллической решетки, притягивающие электроны, способствуют образованию автолокализованных электронных состояний, в то время как такое состояние не существует в регулярном кристалле. Эти дефекты проявляют метастабильные свойства, что ведет к сильной зависимости их свойств от внешних условий: электрических полей и температуры. Сильное взаимодействие электрона с такой атомной подсистемой приводит к электронной или дырочной автолокализации. В неупорядоченных (или сильно разупорядоченных) структурах, к которым относятся образующиеся проводящие филаменты в оксидных диэлектриках при их электрической формовке, характерен значительный разброс параметров и автолокализация может сопровождаться большими смещениями атомов. При этом существен вклад ангармонических составляющих атомного потенциала. Выражение для этого потенциала может быть записано в виде [3]:

$$V(x) = V_0(ax^4 + bx^3 + cx^2 + dx), \quad (1)$$

где  $V_0 = \frac{1}{2}k_0a_0^2$ ,  $k_0$  - характерная атомная квазиупругая константа,  $a_0 \sim 0.1$  нм - характерная атомная длина,  $a, b, c, d$  – параметры дефектной структуры,  $x$  – конфигурационная координата. В этом случае автолокализация в атомной ангармонической конфигурации при значительной гибридизации состояний описывается выражением гамильтонианом вида [2]:

$$G(x) = -\frac{dV(x)}{dx}, \quad (2)$$

Также дополнительно следует учитывать наличие периодической силы, связанной с электрон-фононным взаимодействием и воздействие шума. Общий вид зависящего от времени  $t$  гамильтониана [3,4]:

$$G(x, t) = -dV(x)/dx + A \cos(\omega t + \varphi) + \sqrt{2D} \text{Noise}(t), \quad (3)$$

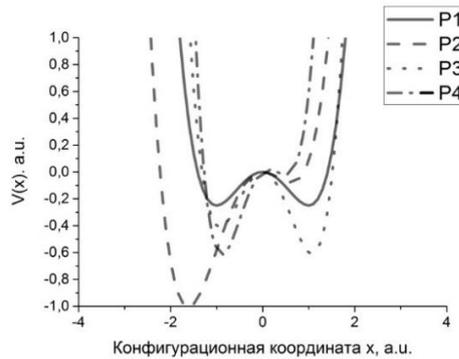
где  $\varphi$  – сдвиг по фазе,  $A$  – амплитуда периодического воздействия,  $D$  – уровень шума.

С помощью выражений (1) и (2) проведены расчеты зависимости формы бистабильных потенциалов и производной величины  $G(x)$ , а также их влияния на электронные свойства бистабильных состояний.

Для моделирования переключения бистабильных состояний используется модель бистабильного переключения при наличии периодической силы, связанной с электрон-фононным взаимодействием и воздействию шума. Общий вид зависящего от времени  $t$  обобщенной конфигурационной координаты ловушки  $x(t)$  [4]:

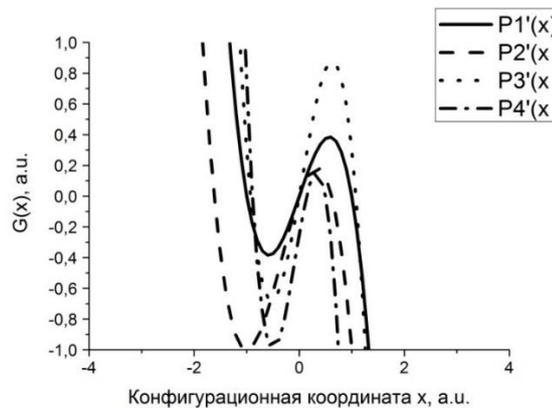
$$dx/dt = dV(x)/dx + A \cos(\omega t + \varphi) + \sqrt{2D} \text{Noise}(t), \quad (4)$$

С помощью выражения (4) проведены расчеты кинетики переходов между бистабильными уровнями в зависимости от параметров конфигурационного потенциала, амплитуды периодического воздействия и уровня шума.



$$P1 (a = \frac{1}{4}; c = -\frac{1}{2}; b, d = 0), P2 (a = \frac{1}{4}, b = \frac{1}{3}, c = -\frac{1}{2}, d = 0), P3 (a = \frac{1}{2}, b = -\frac{1}{10}, c = -1, d = 0), P4 (a = 1, b = \frac{1}{3}, c = -1, d = \frac{1}{4})$$

Рисунок 1 - Ангармонический потенциал бистабильного центра



$$P1 (a = \frac{1}{4}; c = -\frac{1}{2}; b, d = 0), P2 (a = \frac{1}{4}, b = \frac{1}{3}, c = -\frac{1}{2}, d = 0), P3 (a = \frac{1}{2}, b = -\frac{1}{10}, c = -1, d = 0), P4 (a = 1, b = \frac{1}{3}, c = -1, d = \frac{1}{4})$$

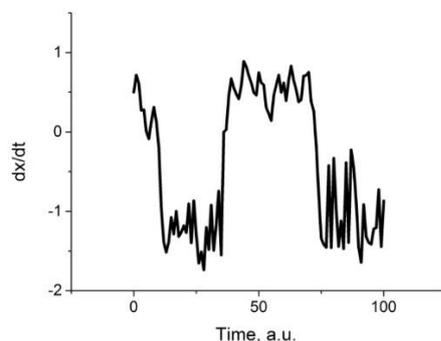
Рисунок 2 - Гамильтониан  $dV/dx$  в зависимости от параметров

Установлено, что в зависимости от значений параметров  $a, b, c, d$  ангармонический бистабильный потенциал изменяет свою симметрию, а также глубину и ширину потенциальных ям, рисунок 1. Соответствующим образом меняется также и функция  $G(x)$ , рисунок 2. Конфигурационные параметры  $a, b, c, d$  позволяют управлять электронными свойствами бистабильного центра, что отражается на его электронных свойствах, в частности зарядовых.

Проведенные расчеты влияния на электронные свойства бистабильных состояний параметров конфигурационного потенциала показали, что при наличии периодического воздействия и шума возможны переходы из одного метастабильного состояния в другое. При этом такие

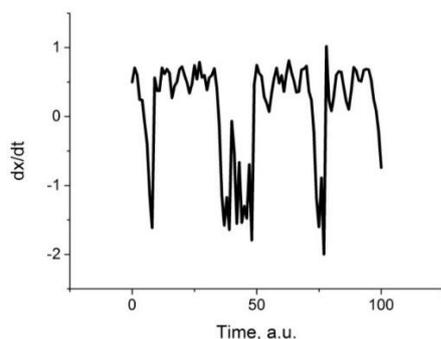
переходы существенно зависят от соотношения глубин потенциальных ям и определяются уровнем шума, рисунки 3, 4.

Показано, что управление параметрами ангармонического бистабильного потенциала позволяет управлять характеристиками перехода из одного метастабильного состояния в другое, в частности, регулировать время нахождения в каждом из них. Так, на рисунке 3 приведены результаты для случая примерно равного времени нахождения в каждом из метастабильных состояний, а на рисунке 4 – время нахождения в нижнем (более глубоком состоянии) выше, чем в верхнем с меньшей потенциальной энергией.



$$A=0,25, \varphi=0, \omega=1, D=0,02, a = \frac{1}{4}, b = 0, c = -\frac{1}{2}, d = 0$$

Рисунок 3 - Переходы между метастабильными состояниями бистабильного центра под действием вынуждающей силы и шума



$$A=0,25, \varphi=0, \omega=1, D=0,02, a = \frac{1}{4}, b = \frac{1}{3}, c = -\frac{1}{2}, d = 0$$

Рисунок 4 - Переходы между метастабильными состояниями бистабильного центра под действием вынуждающей силы и шума

Полученные результаты будут использованы для выявления механизма быстрого (электронного) переключения проводимости оксидных диэлектриков в электрическом поле для разработки перспективных элементов резистивной памяти.

*Список использованных источников:*

- [1] Recent progress in resistive random access memories: Materials, switching mechanisms, and performance/ F. Pan [et al.] // Materials Science and Engineering Report. – 2014. - Vol. 83, No.1. - P. 1-59.
- [2] Device and SPICE modeling of RRAM devices / P. Sheridan [et al.] // Nanoscale. - 2011. - Vol. 3, No.9. - P. 3833-3840.
- [3] Klinger, M.I. Atomic quantum diffusion, tunnelling states and some related phenomena in condensed systems// Physics Reports. – Vol. 94, No. 5. – P. 183-312.
- [4] Stochastic resonance / L. Gammaitoni [et al.] // Rev. Mod. Phys. – 1998. – Vol.70, No. 1. – P. 223-287.