

## Электронные свойства бистабильных электронных состояний в диоксиде гафния

*А. А. Назаренко*

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

В данной работе моделируются электронные свойства бистабильных электронных состояний, возникающих в диоксиде гафния при формовке в электрических полях. Приведены результаты расчетов зависимости формы ангармонических конфигурационных потенциалов от параметров дефектной структуры. Установлено, что в зависимости от значений параметров ангармонический бистабильный потенциал изменяет свою симметрию, а также глубину и ширину потенциальных ям. Проведенные расчеты влияния на электронные свойства бистабильных состояний параметров конфигурационных потенциалов показали, что при наличии периодического воздействия и шума возможны переходы из одного бистабильного состояния в другое.

**Ключевые слова:** бистабильные состояния, диоксид гафния, резистивная память, многофононные взаимодействия.

В настоящее время наноструктуры на основе диоксида гафния перспективны для использования в энергонезависимой резистивной памяти с произвольной выборкой (RRAM). Диоксид 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 создает высокую плотность 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]. 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 переключения 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 условиях электрической формовки и переключения сопротивления. В данной работе, исходя из гипотезы о бистабильном характере ловушечных состояний, представлены результаты моделирования электронных свойств бистабильных ловушечных состояний в диоксиде гафния. 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 носителя заряда 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

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

где  $V_0 = (1/2)k_0a_0^2$ ,  $k_0$  - характерная атомная квазиупругая константа,  $a_0^2 \sim 0,1$  нм – характерная атомная длина,  $a, b, c, d$  – параметры дефектной структуры,  $x$  – конфигурационная координата [2]. В этом случае автолокализация в атомной ангармонической конфигурации при значительной гибридизации состояний описывается гамильтонианом вида [2]:

$$G(x) = -(dV(x)/dx). \quad (2)$$

Также дополнительно следует учитывать наличие периодической силы, связанной с электрон-фононным взаимодействием и влияние шума. Общий вид зависящего от времени  $t$  гамильтониана

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

где  $\varphi$  – сдвиг по фазе,  $A$  – амплитуда периодического воздействия,  $D$  – уровень шума [2].

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

Для моделирования переключения бистабильных состояний используется модель бистабильного переключения при наличии периодической силы, связанной с электрон-фононным взаимодействием и воздействие шума. Общий вид зависящего от времени  $t$  обобщенной конфигурационной координаты ловушки  $x(t)$  [3]:

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

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

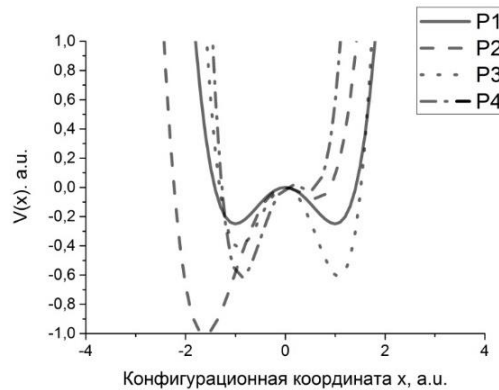


Рис. 1. Ангармонические потенциалы бистабильного центра, отливающиеся значениями параметров  $a, b, c, d$  (P1-P4)

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  $G(x)$ . Конфигурационные параметры  $a, b, c, d$  позволяют управлять электронными свойствами бистабильного центра, что отражается на его электронных свойствах, в частности зарядовых.

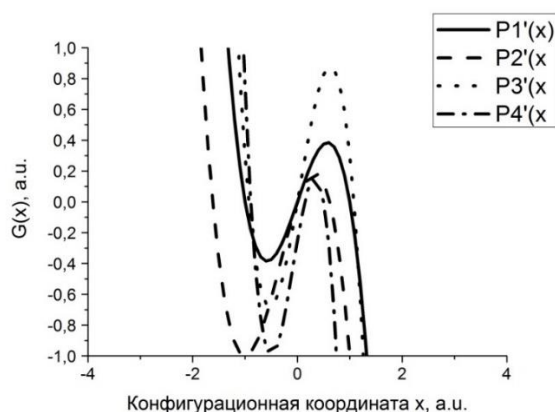


Рис. 2. Гамильтониан  $dV/dx$  в зависимости от сочетания параметров  $a, b, c, d$  (P1'-P4')

Проведенные расчеты влияния на электронные свойства бистабильных состояний параметров конфигурационного потенциала показали, что при наличии периодического воздействия и шума возможны переходы из одного бистабильного состояния в другое. При этом такие переходы существенно зависят от соотношения глубин потенциальных ям и определяются уровнем шума. Показано, что управление параметрами ангармонического бистабильного потенциала позволяет менять параметры перехода из одного метастабильного состояния в другое, в частности, регулировать время нахождения в каждом из них.

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

### Список 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] **Klinger, M.I.** Atomic quantum diffusion, tunnelling states and some related phenomena in condensed systems// Physics Reports. – Vol. 94. – No. 5. – P. 183-312.
- [3] Stochastic resonance / **L. Gammaitoni** [et al.] // Rev. Mod. Phys. – 1998. – Vol.70. – No. 1. – P. 223-287.

### Electronic properties of bistable electronic states in hafnium dioxide

*A. A. Nazarenka*

Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics, Minsk, Republic of Belarus

### Annotation

This paper simulates the electronic properties of bistable electronic states arising in hafnium dioxide during molding in electric fields. The results of calculations of the dependence of the form of anharmonic configuration potentials on the parameters of the defective structure are presented. It is established that depending on the values of the parameters the anharmonic bistable potential changes its symmetry, as well as the depth and width of the potential wells. Calculations of the effect of configuration potentials parameters on the electronic properties of bistable states have shown that transitions from one bistable state to another are possible in the presence of periodic action and noise.

**Keywords:** bistable states, hafnium dioxide, resistive memory, multiphonon interactions.