

# 酸化物系人工シナプス素子におけるドナー欠陥挙動の 第一原理理論解析

大阪大学 基礎工学研究科 藤平 哲也, 小泉優紀, 二宮 雅輝, 林 侑介, 酒井 朗

**目的** 人工シナプス素子への応用が期待される酸化物系抵抗変化材料（メモリスタ）の特性を支配するドナー欠陥の挙動を、第一原理計算を中心とした理論手法により詳細に解析する。

**内容** 代表的な酸化物メモリスタ材料のルチル型 $\text{TiO}_2$ に着目し、ドナー欠陥となる酸素空孔を含むスーパーセルモデルを構築し、空孔形成および移動エネルギーと、その外部電界依存性を系統的に評価した。計算には第一原理電子状態計算コードであるOpenMXおよびVASPを用いた。

**結果** 酸素空孔の形成・移動エネルギーは $\text{TiO}_2$ の結晶方位により顕著な差異を示し、実験で観察されている4端子平面型メモリスタの方位依存特性の起源となっている可能性が示された。また、空孔の集積により形成される拡張欠陥（剪断面）近傍の酸素サイトでは、空孔形成・移動エネルギーがバルク結晶の値から変化し、電界下での空孔のドリフト・拡散および抵抗変化の挙動に影響することが示唆された。

利用した計算機  
使用ソフトウェア  
並列化

OCTOPUS 汎用CPUノード群  
OpenMX、VASP  
最大 160 CPU 並列

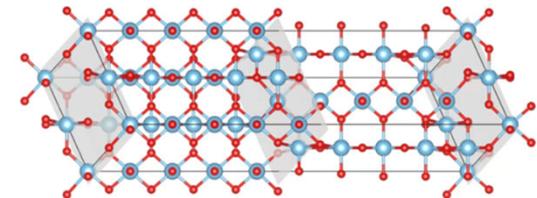


図  $\text{TiO}_{2-x}$  剪断面構造のスーパーセルモデル