

## 缺陷对电荷俘获存储器写速度影响\*

汪家余 赵远洋 徐建彬 代月花†

(安徽大学电子信息工程学院, 合肥 230039)

(2013年9月12日收到; 2013年11月21日收到修改稿)

基于密度泛理论的第一性原理以及 VASP 软件, 研究了电荷俘获存储器 (CTM) 中俘获层  $\text{HfO}_2$  在不同缺陷下 (3 价氧空位 ( $V_{\text{O}3}$ )、4 价氧空位 ( $V_{\text{O}4}$ )、铅空位 ( $V_{\text{Hf}}$ ) 以及间隙掺杂氧原子 ( $I_{\text{O}}$ )) 对写速度的影响. 对比计算了  $\text{HfO}_2$  在不同缺陷下对电荷的俘获能、能带偏移值以及电荷俘获密度. 计算结果表明:  $V_{\text{O}3}$ ,  $V_{\text{O}4}$  与  $V_{\text{Hf}}$  为单性俘获,  $I_{\text{O}}$  则是双性俘获,  $\text{HfO}_2$  在  $V_{\text{Hf}}$  时俘获能最大, 最有利于俘获电荷;  $V_{\text{Hf}}$  时能带偏移最小, 电荷隧穿进入俘获层最容易, 即隧穿时间最短; 同时对电荷俘获密度进行对比, 表明  $V_{\text{Hf}}$  对电荷的俘获密度最大, 即电荷被俘获的概率最大. 通过对 CTM 的写操作分析以及计算结果可知, CTM 俘获层 m- $\text{HfO}_2$  在  $V_{\text{Hf}}$  时的写速度比其他缺陷时的写速度快. 本文的研究将为提高 CTM 操作速度提供理论指导.

**关键词:** 电荷俘获存储器, 写速度, 铅空位, 第一性原理**PACS:** 31.15.A-, 23.40.-s, 81.05.Hd, 73.23.-b**DOI:** 10.7498/aps.63.053101

## 1 引言

随着非挥发存储器的不断发展, 传统的浮栅存储器已不能满足需要, 例如传统器件尺寸的不断减小, 导致器件的泄漏电流增大, 从而直接影响了存储器的存储特性. CTM 由于可以很好的缓解存储器的尺寸与泄漏电流之间的矛盾, 并且具有良好的存储特性等优点, 作为下一代非挥发性存储器而被广泛的研究<sup>[1-3]</sup>.

目前, 提高 CTM 的特性成为研究的重点, 表征器件特性的参数包括擦写速度、存储周期、存储窗口以及数据保持特性等<sup>[1-5]</sup>. 文献[4]研究不同材料及缺陷对 CTM 特性的影响, 结果表明高  $k$  材料作为俘获层可以有效的提高写速度以及提高数据的保持特性; 文献[5]的研究是通过在 CTM 中的俘获层与隧穿层之间引入  $\text{Si}_3\text{N}_4$  形成双隧穿层结构, 减小载流子通过隧穿效应进入俘获层的时间, 以达到提高器件写速度的目的; 文献[6]研究了在俘获层掺杂 Al 的比重对器件的写速度的影响, 结果表明 Hf 与 Al 的比例为 1 : 1 时的擦写速度最快; 文献[7]研究了不同的微观量 (俘获深度、电荷

有效质量、俘获截面和能带偏移) 对 CTM 的擦写速度 (program and erase) 和存储特性 (retention) 的影响, 研究结果表明, 俘获深度越大, 写速度越快; 增加俘获截面提高俘获密可以提高写速度, 其中俘获深度是对电荷的俘获能量, 俘获截面则反映电荷被俘获的概率. 文献[8]从能带偏移角度对 CTM 的 P-E 进行研究, 文中指出能带偏移值越小, 载流子隧穿的难度越小, 越有利于提高擦写速度.

第一性原理已被国内外所认可, 并被大量的研究所运用<sup>[9-13]</sup>. 高  $k$  材料  $\text{HfO}_2$  作为 CTM 俘获层被广泛研究<sup>[14-18]</sup>. 文献[15]通过第一性原理研究氧空位、间隙氧以及铅空位对  $\text{HfO}_2$  的结构以及对电荷俘获特性的影响, 结果表明, 不同的缺陷对电荷的俘获特性是不同的. 目前对 CTM 的研究中, 本征缺陷对其写速度特性研究很少, 文献[19]通过实验分析了间隙氧浓度对 CTM 性能的影响, 结果表明, 氧浓度越低, 对电荷的俘获密度越大, 即间隙氧原子在  $\text{HfO}_2$  中的浓度越小, 越有利于提高俘获密度. 通过对 CTM 中俘获层  $\text{HfO}_2$  的本征缺陷对写速度的影响分析, 有利于了解金属缺陷与非金属缺陷对 CTM 性能的影响.

本文运用第一性原理计算了 CTM 俘获层 H-

\* 国家自然科学基金 (批准号: 61376106) 资助的课题.

† 通讯作者. E-mail: daiyueh2013@163.com

fO<sub>2</sub> 在 3 价氧空位 (V<sub>O3</sub>)、4 价氧空位 (V<sub>O4</sub>)、铪空位 (V<sub>Hf</sub>) 以及间隙掺杂氧原子 (I<sub>O</sub>) 下的能带偏移值、电荷俘获能以及俘获密度, 主要说明了载流子隧穿进入俘获层的难度, 电荷被俘获的速度以及电荷被俘获的概率. 对计算数据的分析, 了解不同缺陷的其写速度的影响, 并找出写速度最快的缺陷. 通过本文的研究, 了解影响 CTM 写速度的因素, 为提高 CTM 的写速度提供理论指导.

## 2 计算方法

### 2.1 结构模型

本文研究了 TAHOS 结构的 CTM, 如图 1 所示, 其中 Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> 为阻挡层; HfO<sub>2</sub> 是俘获层; SiO<sub>2</sub> 是隧穿层, 本文的研究的是俘获层 HfO<sub>2</sub> 在不同缺陷下的写操作速度.

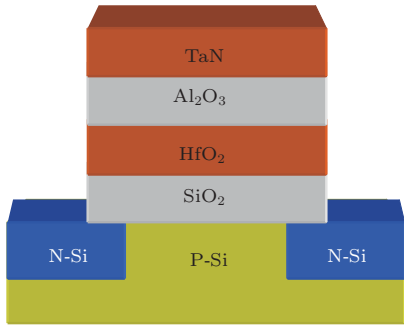


图 1 (网刊彩色) CTM 的结构示意图

由于单斜 HfO<sub>2</sub> (m-HfO<sub>2</sub>) 的结构在常温下最稳定, 所以本文选取 m-HfO<sub>2</sub> 作为研究对象. 为了确保研究的准确性, 本文对 m-HfO<sub>2</sub> 做 2 × 2 × 2<sup>[14-16]</sup> 的延拓后, 对其制造不同的缺陷. Vienna ab-initio Simulation Package (VASP) 被用来计算能量、态密度以及电荷分布. 通过测试后, 选取平面波截断能 (ENCUT) 为 450 eV, Brillouin 区的 k 点网格为 3 × 3 × 3 Monkhorst-Park 方案, 迭代过程中原子间的相互作用力的收敛精度为 0.015 eV/Å.

对 CTM 写操作是通过将电子或空穴写入到俘获层. 本文是通过模拟在不同缺陷状态 HfO<sub>2</sub> 分别写入电子或空穴来实现对其写操作的模拟<sup>[20]</sup>.

### 2.2 计算模拟

本文研究的是 HfO<sub>2</sub> 的本征缺陷对写速度的影响, 对 HfO<sub>2</sub> 的结构分析后, HfO<sub>2</sub> 中存在两种晶格氧原子如图 2 所示, 图 2(a)3 价氧原子 (O3),

图 2(b)4 价氧原子 (O4), 其中红色是晶格氧原子, 蓝色是铪原子. 间隙氧原子有三种不同的位置, 如图 3 所示, 图 3 中蓝色的是间隙氧原子的并标识了 1, 2, 3, 以代表不同的位置. 分别计算三种间隙氧情况下的形成能, 比较形成能的大小决定本研究中的间隙氧原子掺杂的位置. 根据形成能越小结构越稳定<sup>[21]</sup>, 以及计算的结果 (如表 1 所示), 所以在本文中的间隙氧原子被掺入到位置 3.

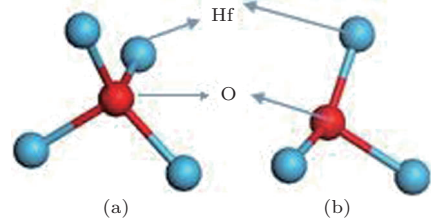


图 2 (网刊彩色) HfO<sub>2</sub> 中的不同氧原子 (a) 3 价氧原子 (O3); (b) 4 价氧原子 (O4)

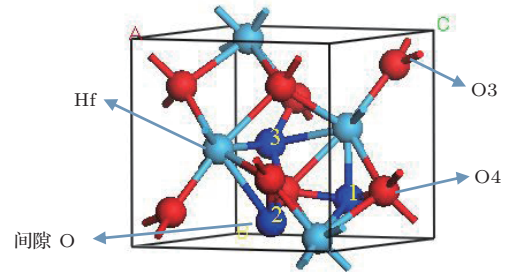


图 3 (网刊彩色) m-HfO<sub>2</sub> 中间隙氧原子的不同位置

表 1 m-HfO<sub>2</sub> 中三种位置间隙氧的形成能

位置	位置 1	位置 2	位置 3
形成能/eV	2.443	2.527	1.623

## 3 计算结果与分析

对 CTM 的工作原理分析, 表明写操作是载流子 (电子或空穴) 通过隧穿进入俘获层, 被俘获层中的缺陷陷阱俘获. 对写过程的研究, 表明减小电荷隧穿进入俘获层的难度、增加俘获速度以及增加对电荷的俘获密度 (即陷阱密度) 可以加快 CTM 的写速度.

### 3.1 俘获能

本文计算了 m-HfO<sub>2</sub> 在不同缺陷时的电荷俘获能. 所用的俘获能计算公式<sup>[22]</sup>:

$$\Delta E^e = E^{q=-1} - E^{q=0} - E_{\text{defect}}^{q=-1} + E_{\text{defect}}^{q=0}, \quad (1a)$$

$$\Delta E^h = E^{q=+1} - E^{q=0} - E_{\text{defect}}^{q=+1} + E_{\text{defect}}^{q=0}. \quad (1b)$$

(1a)式表示对电子的俘获能, (1b)式表示对空穴的俘获能.  $E^{q=-1}$  是完整的晶胞写入电子优化能量,  $E^{q=0}$  是完整晶胞优化能量,  $E_{\text{defect}}^{q=-1}$  是在缺陷状态下写入电子优化能量,  $E_{\text{defect}}^{q=0}$  是缺陷优化能量;  $E^{q=+1}$  是完整的晶胞中写入空穴优化能量,  $E_{\text{defect}}^{q=+1}$  是缺陷状态下写入空穴优化能量. 如果俘获能为正值表明缺陷可以俘获载流子; 负值则不能俘获载流子. 电荷俘获能越大, 对载流子的俘获速度越快.

运用 (1a), (1b) 式分别计算了 m-HfO<sub>2</sub> 在不同缺陷下对载流子的俘获能, 结果如图 4 所示. 从计算结果可以看出 V<sub>O3</sub>, V<sub>O4</sub> 对电子的俘获能分别是 0.107 eV 和 0.095 eV, 表明对电子的俘获能很小 (即对电子几乎无俘获能力); V<sub>Hf</sub> 对空穴的俘获能为 -0.361 eV, 对空穴无俘获能力; 而 I<sub>O</sub> 对电子和空穴的俘获能为 2.702 eV 和 0.844 eV. 这些结果表明, V<sub>O3</sub>, V<sub>O4</sub>, V<sub>Hf</sub> 为单性俘获; I<sub>O</sub> 为双性俘获, 这与文献 [16] 的研究相一致. 最重要的是, 通过图 4 可以看出 V<sub>Hf</sub> 对电子的俘获能为 4.441 eV, 与其他缺陷对载流子的俘获能比较, V<sub>Hf</sub> 对电子的俘获能最大, 也就是说 V<sub>Hf</sub> 对电子的俘获速度相比于其他缺陷对载流子的捕获速度最快.

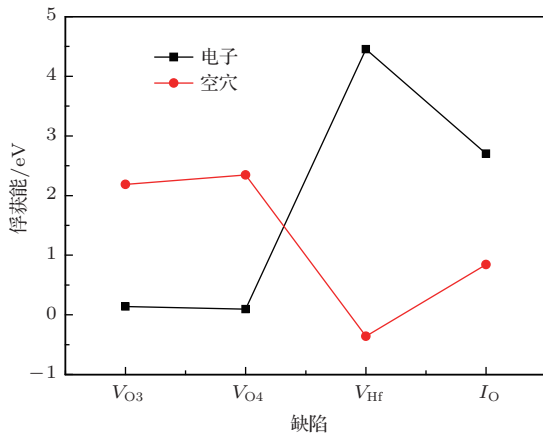


图 4 缺陷对电荷的俘获能

### 3.2 能带偏移

由于俘获能越大, 载流子越容易被俘获. 根据上述俘获能的研究, 本文分别对 V<sub>O3</sub>, V<sub>O4</sub> 写入空穴; 对 V<sub>Hf</sub>, I<sub>O</sub> 写入电子.

价带偏移反映空穴隧穿进入俘获层的难易, 导带偏移则是电子隧穿进入俘获层的难易通过对 CTM 的工作机理分析表明, 对器件加正电压, 使 N-Si 中的多子 (电子) 进入 P-Si 中, 在 P-Si 中形成耗尽层, 最终使得电子进入俘获层中; 通过加反压使 P-Si 中的多子 (空穴) 进入俘获层, 以达到被俘

获层俘获的目的, 最终实现 CTM 的存储功能. 同时文献 [8] 指出价带偏移值与导带偏移值的计算式, 能带偏移计算式如下:

$$\Delta E_v = (E_v)_{\text{P-si}} - (E_v)_{\text{HfO}_2}, \quad (2a)$$

$$\Delta E_c = (E_c)_{\text{HfO}_2} - (E_c)_{\text{P-si}}. \quad (2b)$$

运用 VASP 计算得到 P-Si 导带底和价带顶的数值分别为 1.87167 eV 和 0.78967 eV; HfO<sub>2</sub> 在 V<sub>O3</sub>, V<sub>O4</sub>, V<sub>Hf</sub> 和 I<sub>O</sub> 四种缺陷下的导带底和价带顶的数值如表 2 所示, 其中 HfO<sub>2</sub> 的计算结果与文献 [23,24] 相符合.

表 2 HfO<sub>2</sub> 中本征缺陷的导带底和价带顶

缺陷种类	m-HfO <sub>2</sub>	
	E <sub>V</sub> /eV	E <sub>C</sub> /eV
HfO <sub>2</sub>	0	4.0028
V <sub>O3</sub>	-2.72216	1.27684
V <sub>O4</sub>	-2.5306	1.6194
V <sub>Hf</sub>	-0.07587	3.96682
I <sub>O</sub>	0.13259	4.19359

CTM 俘获层 m-HfO<sub>2</sub> 在不同缺陷时的能带偏移值计算结果如表 3 所示. 通过表 3 可以看出, 不同缺陷对能带偏移影响不同, 即通过缺陷效应可以改变载流子隧穿进入俘获层的难度; V<sub>Hf</sub> 时的导带偏移值为 1.995 eV, 相比于其他缺陷的能带偏移值最小, 这表明电子隧穿进入俘获层最容易, 也就是减小电子隧穿的时间, 从而加快 CTM 器件的写速度.

表 3 写操作过程中的能带偏移值

缺陷种类	能带偏移值	
	ΔE <sub>V</sub> /eV	ΔE <sub>C</sub> /eV
V <sub>O3</sub>	3.51183	—
V <sub>O4</sub>	3.32027	—
V <sub>Hf</sub>	—	1.99515
I <sub>O</sub>	—	2.32192

### 3.3 俘获密度

俘获密度表示电荷被俘获的概率. 电荷被俘获概率越大, 越有利于 CTM 的写操作, 即俘获层对电荷的俘获概率越大, CTM 的写速度越快. 由于不同缺陷造成 m-HfO<sub>2</sub> 的电子结构变化不同, 各原子对电荷的局域作用也将发生改变 (即不同缺陷导致 m-HfO<sub>2</sub> 内的可移动载流子数目不同). 据此本文的研究俘获密度的方法是研究缺陷态 m-HfO<sub>2</sub> 的电荷局域分布, 对缺陷态 m-HfO<sub>2</sub> 写入电荷, 当



写入电荷后的缺陷态电荷局域分布趋于无缺陷时的电荷局域分布, 即说明写入电荷后 m-HfO<sub>2</sub> 达到无缺陷时的电子结构, 写入的电荷数表示缺陷态的 m-HfO<sub>2</sub> 内的可俘获电荷的数目, 即说明缺陷对电荷的俘获密度.

图 5(a), (b), (c) 分别是完整 HfO<sub>2</sub>, V<sub>Hf</sub> 及 I<sub>O</sub> 的电荷局域分布. 以图 5(a) 为基态, 对 I<sub>O</sub>, V<sub>Hf</sub> 进行参数设置后, 发现 V<sub>Hf</sub> 和 I<sub>O</sub> 出现电荷局域弱的区域, 如图 5(b), (c) 黑色区域. 对 I<sub>O</sub>, V<sub>Hf</sub> 写入电

子后的电荷局域分布如图 6(a), (b) 所示. 图 6(a), (b) 分别与图 5(b), (c) 比较, 发现 I<sub>O</sub> 在写入一个电子后其内电荷局域弱区域明显减小, 几乎消失, 如图 6(a) 黑色区域; V<sub>Hf</sub> 写入一个电子后电荷局域分布与写入电子前 V<sub>Hf</sub> 电荷局域分布相比变化较小, 对 V<sub>Hf</sub> 继续写入电子后, 清晰的发现其内的电荷局域分布逐渐趋于无缺陷电荷局域分布, V<sub>Hf</sub> 在写入多个电子数后的电荷分布如图 6(c), (d) 所示. 结果表明 V<sub>Hf</sub> 可以俘获 3 个及以下的电子.

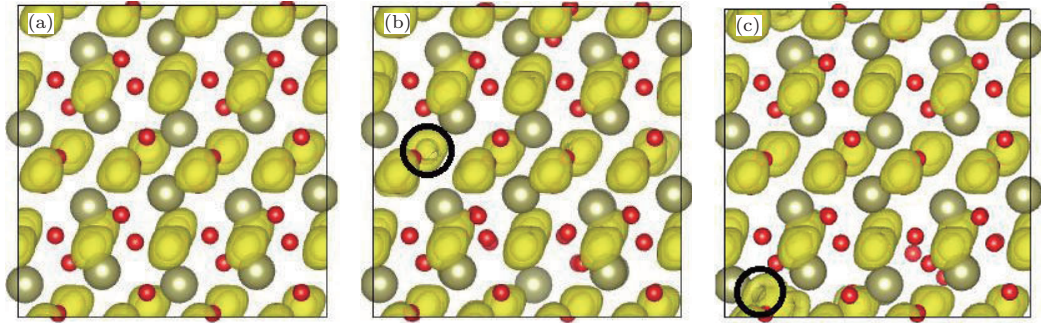


图 5 (网刊彩色) 电荷局域分布 (a) 完整 HfO<sub>2</sub>; (b) V<sub>Hf</sub>; (c) I<sub>O</sub>

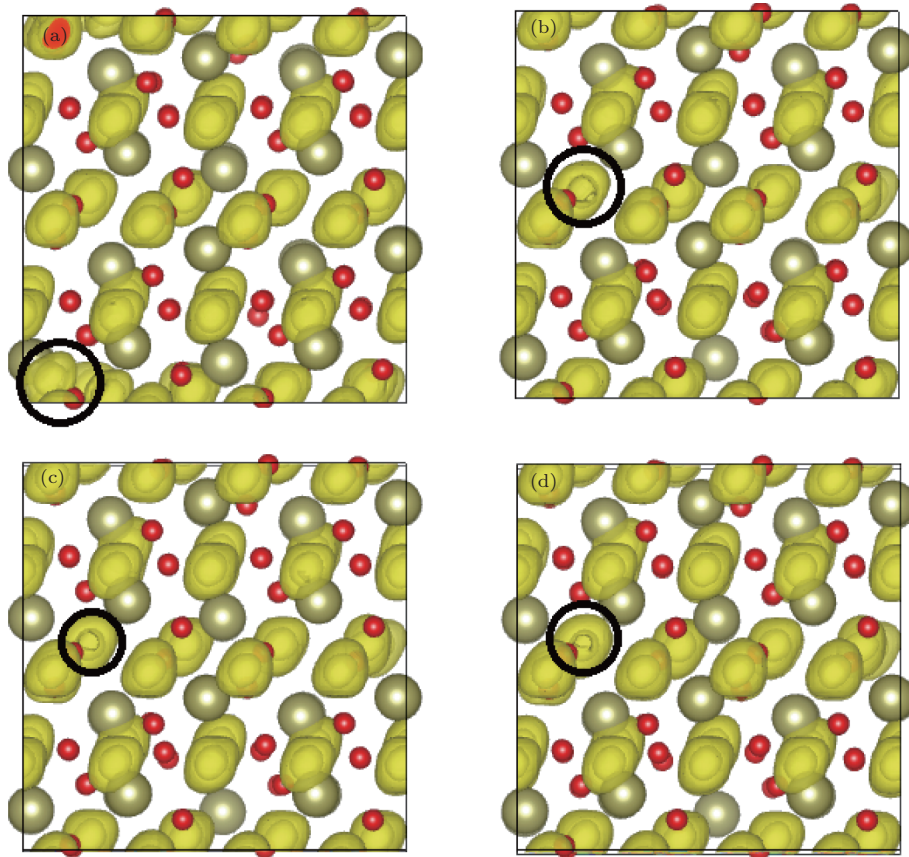


图 6 (网刊彩色) 电子写入后的电荷局域 (a) I<sub>O</sub> 写入电子后的电荷局域分布; (b) 写 1 个电子后的 V<sub>Hf</sub> 电荷局域分布; (c) 写 2 个电子后的 V<sub>Hf</sub> 电荷局域分布; (d) 写 3 个电子后的 V<sub>Hf</sub> 电荷局域分布

为了清晰的看出  $V_{O3}$  与  $V_{O4}$  中的团簇, 选择无缺陷  $m\text{-HfO}_2$  电荷恰好完全离域为基态, 如图 7(a).  $V_{O3}$  与  $V_{O4}$  与基态在相同参数设置下电荷分布, 如图 7(b), (c). 通过比较后, 清晰地看出  $V_{O3}$  与  $V_{O4}$  时形成团簇, 即图 7(b), (c) 中的黄色区域. 对  $V_{O3}$  与  $V_{O4}$  分别写入空穴, 其内电荷局域分布如

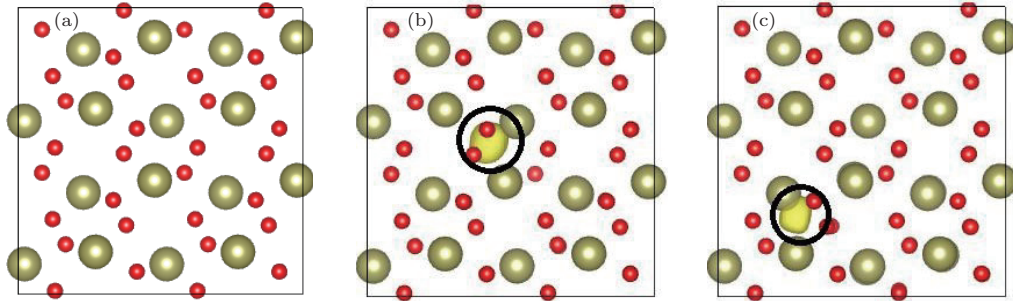


图 7 (网刊彩色) 电荷局域分布 (a) 完整  $\text{HfO}_2$ ; (b)  $V_{O3}$ ; (c)  $V_{O4}$

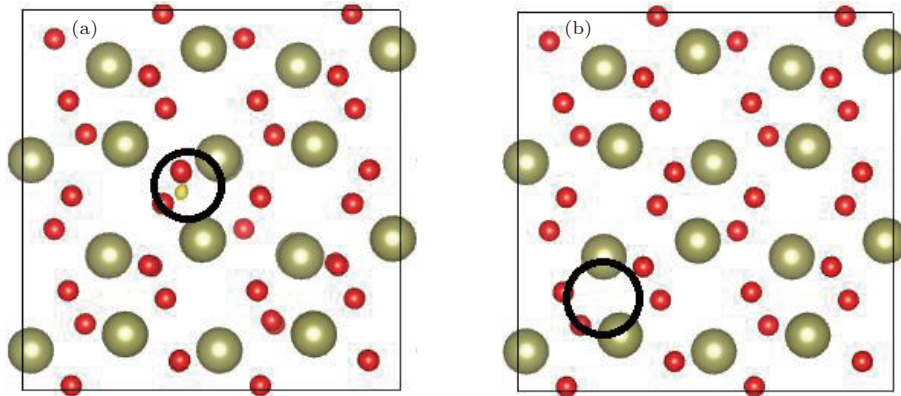


图 8 (网刊彩色) 写入空穴后的电荷局域分布 (a)  $V_{O3}$ ; (b)  $V_{O4}$

综合对不同缺陷写入电荷数量分析, 表明  $V_{O3}$ ,  $V_{O4}$  以及  $I_O$  在写入一个电荷后趋于无缺陷时的电荷分布,  $V_{\text{Hf}}$  在写入 3 个后才趋于无缺陷时的电荷分布. 这就表明在这些缺陷中,  $V_{\text{Hf}}$  可以俘获的电荷数量最多, 那么在写入相同数量的电荷时, 电荷在  $V_{\text{Hf}}$  中被俘获的概率最大.

## 4 结 论

对 CTM 在 TAHOS 结构中的俘获层材料  $\text{HfO}_2$  制造缺陷, 通过计算不同缺陷下的俘获能表明电荷被俘获的速度; 计算能带偏移表明电荷通过隧穿层的难易; 计算电荷分布可以直观的看出电荷在材料中的分布, 并通过写入的电子前后的电荷分布变化表明缺陷对电荷的俘获密度. 计算结果表明  $V_{\text{Hf}}$  缺陷的  $\text{HfO}_2$  作为俘获材料时, 电荷可以最快的

图 8 所示. 分别比较图 8(a) 与图 7(b) 和图 8(b) 与图 7(c), 发现团簇明显减小甚至与无缺陷时的电荷局域分布相同, 说明当空穴被写入后, 其内部的电荷局域分布达到无缺陷时的稳定状态. 同时, 根据写入空穴后的电荷局域分布情况说明  $V_{O3}$  比  $V_{O4}$  的俘获密度略大.

时间通过隧穿进入俘获层, 同时电荷以最快的速度被俘获, 最后电荷被俘获的概率最大. 综合这些结果表明,  $V_{\text{Hf}}$  湿的写速度最快.

本文重点研究了  $m\text{-HfO}_2$  在不同本征缺陷下对 CTM 写速度, 通过对俘获能、能带偏移值以及电荷俘获密度说明这一问题, 了解了不同缺陷对 CTM 写速的影响因素. 同时, 本文的研究主要是从理论的角度对 CTM 的写操作进行分析, 为实验提供理论依据.

## 参考文献

- [1] Jin L, Zhang M H, Huo Z L, Yu Z A, Jiang D D, Wang Y, Bai J, Chen J N, Liu M 2012 *Sci. China Tech. Sci.* **55** 888
- [2] Sabina S, Francesco D, Alessio L, Gabriele C, Olivier S 2012 *Appl. Phys. Exp.* **5** 021102

- [3] Fu J, Singh N, Yang B, Zhu C X, Lo G Q, Kwong D L 2008 *IEEE Electron Dev. Lett.* **29** 518
- [4] Zeng Y J, Dai Y H, Chen J N 2012 *Materials and Structures* **49** 382 (in Chinese) [曾叶娟, 代月花, 陈军宁 2012 材料与结构 **49** 382]
- [5] Wang Y Q, Gao D Y, Hwang W S, Shen C, Zhang G, Samudra G, Y. Yeo C, Yoo W J 2006 *Electron Devices Meeting, 2006. IEDM'06. International San Francisco, Dec. 11-13 2006* p1
- [6] Tsai P H, Chang-Liao K S, Liu C Y, Wang T K, Tzeng P J, Lin C H, Lee L S, Tsai M J 2008 *IEEE Electron Dev. Lett.* **29** 265
- [7] Paul A, Sridhar Ch, Gedam S, Mahapatra S 2006 *Electron Devices Meeting, 2006. IEDM'06. International San Francisco, Dec. 11-13 2006* 393
- [8] Maikap S, Lee H Y, Wang T Y, Tzeng P-J, Wang C C, L S Lee, K C Liu, Yang J-R, Tsai M-J 2007 *Semiconductor Science and Technology* **22** 884
- [9] Zhao Z Y, Liu Q J, Zhang J, Zhu Z Q 2007 *Acta Phys. Sin.* **56** 6592 (in Chinese)[赵宗彦, 柳清菊, 张瑾, 朱忠其 2007 物理学报 **56** 6592]
- [10] Sun B, Liu S J, Zhu W J 2006 *Acta Phys. Sin.* **55** 6589 (in Chinese)[孙博, 刘绍军, 祝文军 2006 物理学报 **55** 6589]
- [11] Ma X G, Tang C Q, Huang J Q, Hu L F, Xue X, Zhou W B 2006 *Acta Phys. Sin.* **55** 4208 (in Chinese)[马新国, 唐超群, 黄金球, 胡连峰, 薛霞, 周文斌 2006 物理学报 **55** 4208]
- [12] Gong C W, Wang Y N, Yang D Z 2006 *Acta Phys. Sin.* **55** 2877 (in Chinese)[宫长伟, 王轶农, 杨大智 2006 物理学报 **55** 2877]
- [13] Xu L F, Gu C Z, Yu Y 2004 *Acta Phys. Sin.* **53** 2710 (in Chinese)[徐力方, 顾长志, 于洋 2004 物理学报 **53** 2710]
- [14] Zhang W, Hou Z F 2012 *Phys. Status Solid B* **250** 352
- [15] Foster A S, Gejo F L, Shluger A L, Nieminen R M 2002 *Phys. Rev. B* **65** 174117
- [16] Cho D Y, Lee J M, Oh S J, Jang H, Kim J Y, Park J H, Tanaka A 2007 *Phys. Rev. B* **76** 165411
- [17] Li D J, Liu M, Long S B, Wang Q, Zhang M H, Liu J, Yang S Q, Wang Y, Yang X N, Chen J N, Dai Y H 2009 *Nanoelectronic Device & Technology* **46** 518 (in Chinese) [李德君, 刘明, 龙世兵, 王琴, 张满红, 刘璟, 杨仕谦, 王永, 杨潇楠, 陈军宁, 代月花 2009 纳米器件与技术 **46** 518]
- [18] Spiga S, Congedo G, Russo U, Spiga S, Congedo G, Russo U, Lamperti A, Salicio O, Driussi F, Vianello E 2010 *Solid-State Device Research Conference, European Sevilla Sept. 14-16 2010* p408
- [19] Park J, Cho M, Kim S K, Park T J, Lee S W, Hong S H, Hwang C S 2005 *Appl. Phys. Lett.* **86** 112907
- [20] Song Y C, Liu X Y, Du G, Kang J F, Han R Q 2008 *Chin. Phys. B* **17** 2678
- [21] Zhou M X, Zhao Q, Zhang W, Liu Q, Dai Y H 2012 *Journal of Semiconductors* **33** 072002
- [22] Gritsenko V A, Nekrashevich S S, Vasilev V V, Shaposhnikov A V 2009 *Microelectronic Engineering* **78** 1866
- [23] Lee C K, Cho E, Lee H S, Hwang C S, Han S 2008 *Phys. Rev. B* **86** 012102
- [24] Zheng J X, Ceder, Maxisch T, Chim W K, Choi W K 2009 *Phys. Rev. B* **75** 104112

# Effect of defect on the programming speed of charge trapping memories<sup>\*</sup>

Wang Jia-Yu Zhao Yuan-Yang Xu Jian-Bin Dai Yue-Hua<sup>†</sup>

1) (School of Electronics and Information Engineering, Anhui University, Hefei 230039, China)

( Received 12 September 2013; revised manuscript received 21 November 2013 )

## Abstract

The programming speed of charge trapping memories (CTM) with different defects were studied based on the first principle and VASP package. The defects include threefold oxygen vacancy ( $V_{O3}$ ), fourfold oxygen vacancy ( $V_{O4}$ ), hafnium vacancy ( $V_{Hf}$ ), and interstitial oxygen ( $I_O$ ). Trapping energy, energy band offset, and the trapping density were calculated and compared. Results show that  $V_{O3}$ ,  $V_{O4}$  only trap holes,  $V_{Hf}$  only trap electrons, and  $I_O$  trap electrons and holes; the most important is the trapping energy which is greater in  $V_{Hf}$ . It is the best for trapping charges; because the charge tunneling into trapping layer is easy in  $V_{Hf}$ . It can also reduce the tunneling time. Finally, the trapping densities were compared with each other:  $V_{Hf}$ 's trapping density is greater than other defects, i.e. charges can be trapped easier than by other defects. All of these show that  $V_{Hf}$  is the best one for reducing programming time. This paper will provide a theoretical guidance for increasing the programming speed of CTM.

**Keywords:** charge trapping memories, programming speed, hafnium vacancy, the first principle

**PACS:** 31.15.A-, 23.40.-s, 81.05.Hd, 73.23.-b

**DOI:** [10.7498/aps.63.053101](https://doi.org/10.7498/aps.63.053101)

---

<sup>\*</sup> Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 61376106).

<sup>†</sup> Corresponding author. E-mail: [daiyueh2013@163.com](mailto:daiyueh2013@163.com)