

密度泛函理论研究氧空位对HfO₂晶格结构和电学特性影响

代广珍 蒋先伟 徐太龙 刘琦 陈军宁 代月花

Effect of oxygen vacancy on lattice and electronic properties of HfO₂ by means of density function theory study

Dai Guang-Zhen Jiang Xian-Wei Xu Tai-Long Liu Qi Chen Jun-Ning Dai Yue-Hua

引用信息 Citation: [Acta Physica Sinica](#), 64, 033101 (2015) DOI: 10.7498/aps.64.033101

在线阅读 View online: <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.033101>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn/CN/Y2015/V64/I3>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

[Lu³⁺ 掺杂对 CdO 陶瓷电、热输运性能的影响](#)

[Effect of Lu³⁺-doping on high-temperature electric and thermal transport properties of CdO](#)

物理学报.2014, 63(17): 178102 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.178102>

[等待点 N=82 附近核素 \$\beta\$ -衰变寿命的研究](#)

[\$\beta\$ -decay half-lives for waiting point nuclei around N=82](#)

物理学报.2014, 63(16): 162301 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.162301>

[超新星爆发环境核素 ^{56,57,59,60}Co 的电子俘获](#)

[Electron capture of nuclides ^{56,57,59,60}Co in supernova explosive surrounding](#)

物理学报.2013, 62(7): 072301 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.62.072301>

[微锗掺杂直拉单晶硅中的锗-空位复合体](#)

[Ge-vacancy complexes in Ge-doped Czochralski silicon crystal](#)

物理学报.2012, 61(6): 063101 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.61.063101>

密度泛函理论研究氧空位对HfO₂晶格结构和电学特性影响*

代广珍^{1)2)†} 蒋先伟²⁾ 徐太龙²⁾ 刘琦³⁾ 陈军宁²⁾ 代月花²⁾

1)(安徽工程大学电气工程学院, 安徽省检测及自动化重点实验室, 芜湖 241000)

2)(安徽大学电子信息工程学院, 安徽省集成电路设计重点实验室, 合肥 230601)

3)(中国科学院微电子研究所, 北京 100029)

(2014年8月5日收到; 2014年9月19日收到修改稿)

HfO₂因高 k 值、热稳定性良好和相对Si导带偏移良好等特点, 作为电荷俘获型存储器栅介质材料得到了广泛研究. 为了明确高 k 俘获层提高CTM电荷俘获效率的原因, 运用基于密度泛函理论的第一性原理计算, 研究了氧空位引起HfO₂的晶格变化及其影响. 计算结果显示优化后氧空位最近邻氧原子间距明显减小, 次近邻O与Hf间距变化稍小. 优化后氧空位明显改变局部晶格, 而对较远晶格影响逐渐减弱, 即引起了局部晶格变化深能级和导带电子态密度主要是Hf原子贡献, 而价带则是O原子贡献. 优化后各元素局部电子态密度和总电子态密度都明显大于未优化体系, 局部电子态密度之和比总电子态密度小. 优化后俘获电荷主要在氧空位周围和相邻氧原子上, 而未优化时电荷遍布整个体系. 优化后缺陷体系电荷局域能增大, 电荷量增加时未优化体系电荷局域能明显减小, 即晶格变化无饱和特性对电荷局域影响大. 说明晶格变化对电荷的俘获能力较强, 有利于改善存储器特性.

关键词: 密度泛函理论, 第一性原理, 氧空位, 电荷俘获

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

DOI: 10.7498/aps.64.033101

1 引言

等比例缩小给传统浮栅Flash带来了短沟效应(short channel effect, SCE)难以控制、亚阈值泄漏电流增加, 导致漏致势垒降低(drain induced barrier lowering, DIBL), 降低了器件的操作速度; 降低了浮栅对控制栅的耦合度, 使得相邻存储单元间串扰增强^[1, 2]. 为解决这些难题, 研究人员积极寻找新型非挥发性存储材料、研究其存储机理并完善CTM存储器结构^[3-6].

CTM存储器具有完全兼容当前主流CMOS工艺, 且设计上与传统浮栅结构一致, 成为新一代存储器备选方案之一. 此外, 浮栅介质中缺陷之间相互独立, 其中一个存储的电荷泄漏不影响其他缺

陷存储的电荷, 因此, 数据保持特性优越^[7,8]. 研究人员为了改善CTM存储器的性能, 做了大量实验研究, 主要可以分为三方面: 1) 寻找更好的高 k 材料^[9,10]; 2) 改进高 k 材料的制备工艺^[11-13]; 3) 利用能带工程改进器件的结构^[4,14,15]. 高 k 材料具有较高的介电常数、较宽的带隙、相对Si具有合理的导带偏移等优秀的特性, 用来作为栅介质层, 可以使漏电流减小, 从而使得栅介质层厚度可以继续减小, 用以延续摩尔定律^[10,14,16]. 高 k 介质HfO₂在制备过程中易产生缺陷, 作为俘获层, 具有高俘获效率. 对此人们做了大量的实验研究, 但是实验研究一般只能通过测量器件的宏观电学特性估计可能的原因^[15], 而无法从微观上解释HfO₂的电荷俘获机理.

* 国家自然科学基金面上项目(批准号: 61376106)资助的课题.

† 通信作者. E-mail: gzDai2014@163.com

理论研究方面, 运用量子力学原理, 根据原子核和电子互相作用原理及基本运动规律, 求解薛定谔方程的算法, 即第一性原理计算方法, 作为一种行之有效研究手段, 被研究人员广泛采用 [16–26]. 对于高 k 介质的研究, 研究人员主要运用第一性原理计算来分析研究的微观结构, 缺陷的形成难易及相互作用、原子间的成键、电荷分布等. 栅绝缘介质中的带电缺陷能够显著降低场效应晶体管的电学特性, 而通过掺杂固定带电缺陷, 使其中性化, 则可以提高其可靠性. 文献 [18] 就是通过将 Mg 合成如 HfO_2 中减小带正电氧空位的影响. 研究已经证明在完美的可变形晶格中小的电子和空穴极化子的存在, 但极化子的自俘获依然难以验证. 单斜晶 HfO_2 中存在稳定的电子和空穴极化子态, 其中空穴极化子位于两个氧格子之间的氧原子上, 而电子极化子位于 Hf 原子上, 极化子跃迁的小势垒说明俘获的电荷具有相对较高的迁移率 [19]. 运用基于 LDA 和 GGA 近似的第一性原理计算严重低估带隙, 考虑不同的计算方法修正误差, 从而给出合理的氧化物半导体和绝缘体的能带结构和氧空位能级 [16]. 这些方面的研究对于材料的控制与选择都具有重要的实际意义. 此外, 大量的文献阐述了关于电子结构、电荷有效质量、介电常数、能带结构, 以及缺陷迁移能等方面的内容, 用来说明高 k 材料作为俘获层的俘获机理, 以及预测性能提高的方法 [18–24]. 不带电的氧空位缺陷的配位价及其相互之间的间距对其相互作用存在影响 [21], 且配位价为 4 的氧空位 ($V_{\text{O}4}$) 比配位价为 3 的氧空位稳定, 不带电的 V_{O} 能够提高介电常数, 而正 2 价 V_{O} 则使介电常数降低 [25]. 带正电荷的氧空位能够俘获电子, 具有镜像吸引界面的作用 [22]. 掺杂的金属离子影响氧空位形成, 使其更易于形成. 此外, 对缺陷体系的态密度、能级和缺陷迁移能等都具有影响 [20]. 前期的研究表明环境氧的不同对缺陷形成的影响很大, 贫氧下则易于形成氧空位, 且不同配位价的氧空位形成的稳定性不同 [20, 22, 26].

对于高 k 材料作为俘获层, 能够明显提高 CTM 电荷俘获效率的产生原因, 是缺陷本身还是缺陷引入导致高 k 材料晶格结构变化, 至今没有一个明确的结论. 为此, 本文通过基于密度泛函理论的计算, 研究了高 k 材料 HfO_2 中的氧空位缺陷, 探讨了氧空位引入后, HfO_2 晶体结构的的变化情况, 及其对能带结构和 DOS, 以及电荷俘获情况的影响.

2 运算方法和模型

模型是以 $m\text{-HfO}_2$ 原胞 (SG: P121/C1, 12 个原子) 为基础 [27], 沿着三维晶向方向扩展 2 倍, 生成含有 96 个原子的 HfO_2 超胞, 氧空位缺陷是通过去除超胞中的氧原子形成. 选择 Vanderbilt 超软赝势 [28], 运用密度泛函理论 (density functional theory, DFT) 和广义梯度近似 (generalized gradient approximation, GGA) 相关函数 [29], 利用 VASP 代码执行计算 [30]. 赝势表示 Hf 原子电子结构为 $[\text{Xe}]4f^{14}5d^26s^2$, O 原子为 $[1s^2]2s^22p^4$, 其中方括号中为核电子. 对于 HfO_2 属性计算的结果与实验完好的一致, 且也适合计算带缺陷的 HfO_2 [20, 28]. 经过测试, 设置平面波总能收敛截断在 500 eV, 选择 $3 \times 3 \times 3$ 的 k 点网格, 固定超胞晶格常数优化使原子完全弛豫到相互之间库仑力小于 $0.0015 \text{ eV}/\text{\AA}$.

HfO_2 的晶格常数及其中氧空位缺陷形成能的计算和缺陷模型的选择, 采用前期的研究成果 [26]. 为描述缺陷体系的晶格变化, 对模型体系分别经过优化和不优化计算, 比较了两者的缺陷体系附近原子结构和原子间键长. 对缺陷体系的能带结构、电子态密度和带电体系的电荷分布也分别在两种方式下进行了计算, 对缺陷本身 (未经优化体系) 和由缺陷引起的晶格结构变化 (经过优化体系) 两者之间的计算结果进行比较, 说明各自的影响为了量化电荷俘获能力, 定义完美超胞电荷亲和力与缺陷超胞电荷亲和力差为电荷局域能 [31]:

$$\Delta E_q = (E_B^{nq} - E_B^0) - (E_D^{nq} - E_D^0),$$

其中, q 为带电荷属性, 可以为电子或空穴; n 表示带电荷量, 0 表示为不带电荷, 即为中性; B 和 D 分别表示完美超胞和缺陷超胞.

3 运算结果及讨论

HfO_2 超胞中的氧配位价有 3 价和 4 价两种, 经过优化后, 得到的原子间键长与没有优化的键长见图 1 所示可见, 经过优化后原子间键长总体上变长.

由于 HfO_2 中氧缺陷的形成与周围环境有关, 在相同条件下, 4 价配位的氧空位比 3 价的更容易形成 [20, 22, 26]. 因此, 后面的计算主要针对 4 价配位氧空位缺陷进行. 针对所选择的氧空位缺陷体系, 经过优化与未优化的体系如图 2 所示.

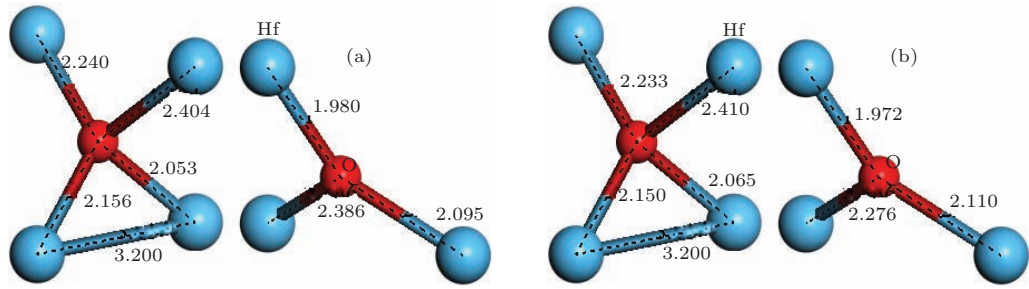


图1 (网刊彩色) HfO₂ 中不同配位价的 O 周围键长优化与未优化比较 (a) 优化; (b) 未优化

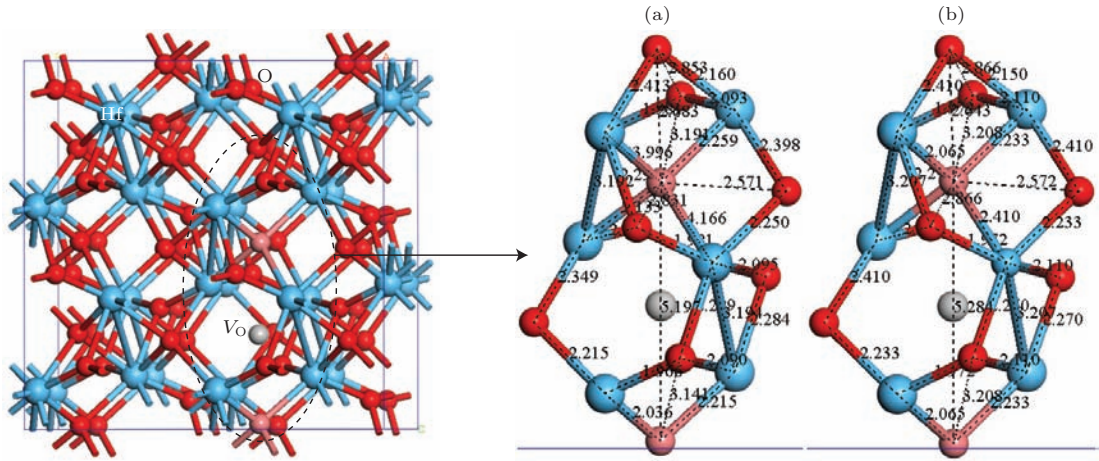


图2 (网刊彩色) HfO₂ 缺陷超胞中 V_O 周围晶格优化与未优化比较 (a) 优化; (b) 未优化

优化之后, 沿 C 方向的氧空位两边的最近邻氧原子之间的距离由 5.284 Å 缩减到 5.197 Å, 距离减小了 0.087 Å. 距离变化其次的是与氧空位次近邻的 O, 与 Hf 之间的键长变化达到 0.061 Å. 其余周围的原子间距离的变化都很小, 一般超过 0.02 Å. 可见, 氧空位缺陷对局部晶格产生了较明显的影响, 而对周围较远的晶格影响逐渐消失. 经过优化之后的晶格结构中, 氧空位引起了周围的原子偏离了原来的晶格位置, 从而形成了局部晶格结构变化 [32].

引入缺陷之后的体系, 经过优化后发生的晶格结构的变化必然对缺陷体系的能带结构、电子态密度和带电体系的电荷分布等产生影响. 为此, 首先对优化和未优化的两种体系进行了能带结构、电子态密度的计算.

优化后的 V_O 体系以价带顶为 0 点对齐后的能带和态密度见图 3 所示.

能带结构显示在禁带中央位置附近引入了深能级, 相对导带边沿能级深度为 1.7289 eV, 带隙宽度为 3.953 eV. 当然, 由于 GGA 近似计算的结构严重低估了带隙宽度, 为此, 采用了杂化泛函方法, 通过设置参数 HFSCREEN 为 0.2 选择 HSE06 进行修

正. 在对优化结果进行自洽计算得到波函数和电荷密度的基础之上, 使用了磨擦阻尼速度算法进行 HSE 自洽计算. 为修正 *k* 点能带顺序避免本征矢量问题, 又使用了 Davidson 方法作进一步的 HSE 自洽计算. 最后, 在上述计算结果基础上进行能带计算, 得到带隙为 5.45 eV, 与实验数据 5.68 eV [33] 非常接近. 为进一步说明氧空位及其引起的晶格结构变化产生的影响, 对优化后和未经优化的两种缺陷体系进行了局域态密度 (LDOS) 的计算, LDOS 结果如图 4 所示.

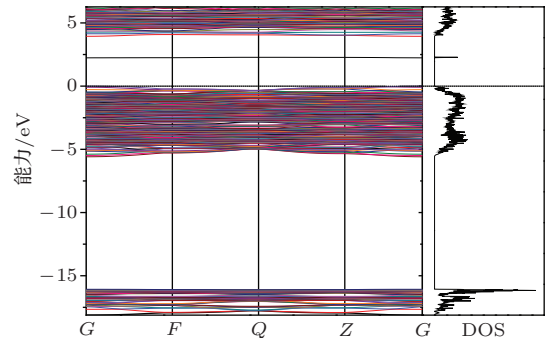


图3 (网刊彩色) 优化的 V_O 缺陷 HfO₂ 超胞能带和 DOS

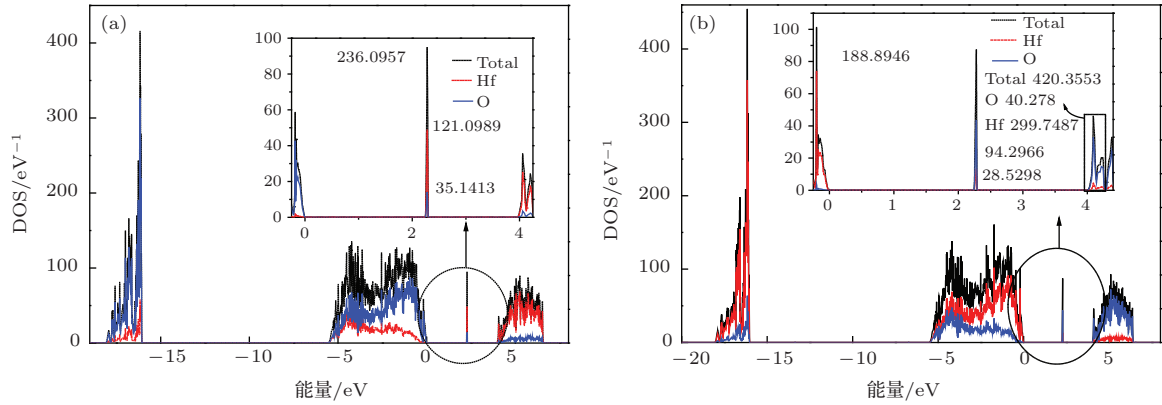


图4 (网刊彩色) 优化后和未经优化的两种缺陷体系进行了局域态密度 (LDOS)

深能级和导带DOS主要是由Hf原子贡献的, 而价带主要是由O原子贡献的. 注意到优化后的体系中各元素LDOS和TDOS都明显比未经优化体系的要大, 且单个元素的LDOS之和小于TDOS [34], (a)中LDOS比TDOS小79.8555, 而(b)中则小66.0882. 可见, 若以66.0882为未经优化的体系中 V_o 引入的DOS, 忽略优化对 V_o 的影响, 则晶格结构带来的变化很小, 只有13.7873. 因此, 可以认为对于含有 V_o 缺陷的 HfO_2 , 深能级的DOS主要是由 V_o 缺陷引起的. 此外, 未经优化的缺陷体系DOS中临近导带边缘还引入了大量的主要有Hf贡献的浅能级DOS, 相对于导带边缘只有0.019 eV. 因此, 俘获在这些电子态上的电子极易跃迁到导带成为自由电子, 而影响CTM存储性能.

V_o 及其引起的晶格结构的变化对电荷的俘获情况通过向缺陷体系中加入电子自洽后与中性缺陷体系做电荷密度差, 见图5所示.

优化后的缺陷体系俘获的电子主要集中在 V_o 缺陷周围, 与 V_o 相邻的氧原子上. 未经优化的缺陷

体系则不然, 电子几乎遍布在整个体系之中, V_o 周围相对较多. 引起这一结果的原因是一方面未经优化的体系相对优化的中性体系, 晶格结构上存在差异; 另一方面 V_o 缺陷引起的局部晶格变化对电子的俘获占主要作用. 优化和未经优化的 V_o 缺陷体系对空穴俘获的结果与上述情况类似, 见图6所示. 图6(b)中晶格下边沿的氧原子俘获的空穴, 根据晶格周期性被画在了上面, 如图中箭头表示.

为了量化晶格结构和 V_o 缺陷本身对电荷的俘获能力, 计算了优化和未经优化的缺陷体系中 V_o 对电荷的局域能, 并定义两者的差为晶格结构变化对电荷的俘获能. 计算的结果见图7所示, 优化后的缺陷体系对电荷局域能明显大于未优化体系, 且随着电荷量增加, 未优化体系电荷局域能明显减小, 优化体系则变化不大, 这样晶格结构变化对电荷局域的影响增大. 说明缺陷对电荷的局域存在饱和特性, 而晶格变化则不存在饱和特性, 因此更有利于电荷的俘获.

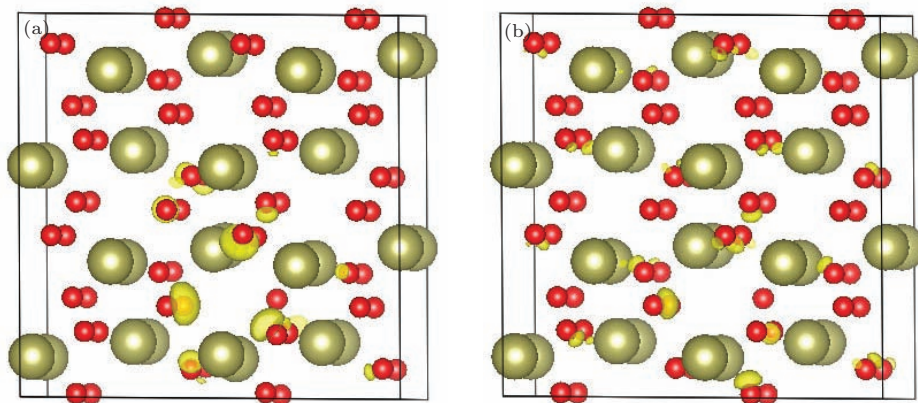


图5 (网刊彩色) 缺陷体系俘获电子 (a) 优化体系; (b) 未优化体系

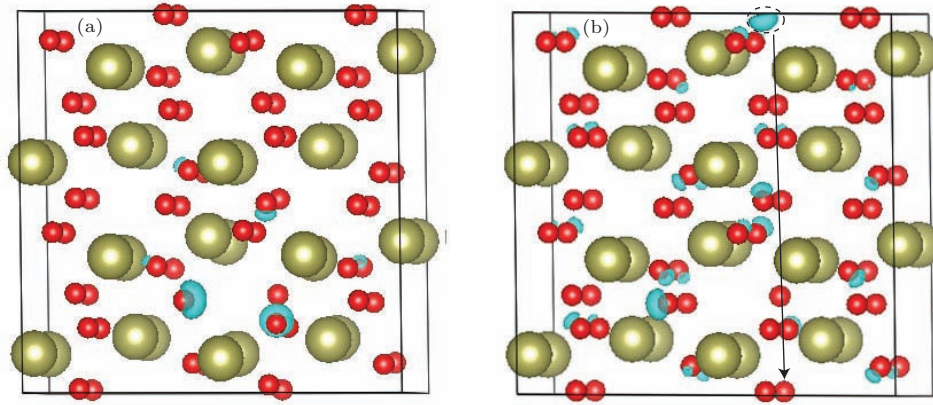


图6 (网刊彩色) 缺陷体系俘获空穴 (a) 优化体系; (b) 未优化体系

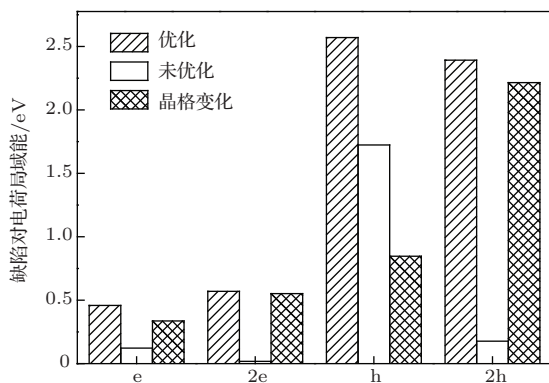


图7 缺陷体系电荷局域能

4 结 论

运用基于密度泛函理论的第一性原理计算对 HfO₂ 俘获层中 V_O 缺陷引起的晶格变化进行了研究, 结果显示优化后的氧空位引起最近邻氧原子之间距离明显减小, 次近邻及较远的原子间距则变化较小, 甚至可以忽略. 优化后氧空位对局部晶格产生了较明显的影响, 而对较远的晶格影响逐渐减弱, 引起了局部晶格结构变化深能级和导带的 DOS 主要由 Hf 原子贡献, 而价带则是由 O 原子贡献. 优化后的体系中各元素 LDOS 和 TDOS 都明显比未经优化体系的要大, 说明晶格结构带来的变化很小. V_O 缺陷的 HfO₂, 未经优化的缺陷体系 DOS 中临近导带边缘还引入了大量的主要有 Hf 贡献的浅能级 DOS, 俘获在这些电子态上的电子极易跃迁到导带成为自由电子, 而影响 CTM 存储性能. 优化后的缺陷体系俘获的电荷主要集中在 V_O 缺陷周围, 与 V_O 相邻的氧原子上, 而未经优化的缺陷体系中

电荷遍布在整个体系中. 优化后缺陷体系电荷局域能增大, 电荷量增加时未优化体系电荷局域能明显减小, 说明晶格结构变化对电荷局域的影响增大. 说明缺陷对电荷的局域存在饱和特性, 而晶格变化则不存在饱和特性.

本文主要研究了 V_O 引起的 HfO₂ 晶格结构变化, 及其对 DOS 和电荷俘获产生的影响. 与以前的研究结果相比, 本文阐明了优化后的 V_O 缺陷引起的晶格结构变化对电荷俘获的主要起主导作用, 而不是 V_O 缺陷本身. 结果说明了 HfO₂ 中 V_O 缺陷引起的晶格结构变化, 对提高 CTM 的存储特性更有利. 通过改进工艺, 提高 HfO₂ 中 V_O 浓度, 以期更好地改善 CTM 存储性能.

感谢中科院合肥物理所提供的计算资源和李晓峰研究员的指导.

参考文献

- [1] Kim, Kinam 2005 *IEEE International Electron Devices Meeting* Washington, DC, American, Dec 5-5 2005 p323
- [2] Lu C Y, Hsieh K Y, Liu R 2009 *Microelectron. Eng.* **86** 283
- [3] Liu Q, Dou C M, Wang Y, Long S B, Wang W, Liu M, Zhang M H, Chen J N 2009 *Appl. Phys. Lett.* **95** 023501
- [4] Chen X, Zhu Z L, Liu M 2010 *Appl. Phys. Lett.* **97** 225513
- [5] Songpon P, Sirilux P, Supason P W 2011 *ACS Appl. Mater. Interfaces* **3** 3691
- [6] Liu J, Zhang M H, Huo Z L, Yu Z A, Jiang D D, Wang Y, Bai J, Chen J N, Liu M 2012 *China Tech. Sci.* **55** 888

- [7] Molas G, Bocquet M, Vianello E, Yu Z A, Jiang D D, Wang Y, Bai J, Chen J N, Liu M 2009 *Microelectron. Eng.* **86** 1796
- [8] Larcher L, Padovani A 2010 *Microelectron. Reliab.* **50** 1251
- [9] Lai C H, Chin A, Kao H L, Chen K M, Hong M, Kwo J, Chi C C 2006 *Symposium on VLSI Technology* Hawaii, American, June 13–15 2006 p54
- [10] Liu J, Wang Q, Long S B, Zhang M H, Liu M 2010 *Semicond. Sci. Technol.* **25** 055013
- [11] You H C, Hsu T H, Ko F H, Huang J W, Lei T F 2006 *IEEE Electron device letters* **27** 653
- [12] Hsieh C R, Lai C H, Lin B C, Lou J C, Lin K J, Lai Y L, Lai H L 2007 *Electron Device and Solid-State Circuits (EDSSC 2007)*, Taian, Tainan, China, Dec 20–22 2007 p629
- [13] Joo M S, Cho B J, Yeo C C, Chan D S H, Whoang S J, Mathew S 2003 *IEEE Trans. Electron Devices* **50** 2088
- [14] Wang Y Q, Gao D Y, Hwang W S, Shen C, Zhang G, Samudra G, Yeo Y C, Yoo W J 2006 *IEEE International Electron Devices Meeting* San Francisco, CA, American Dec 11–13 2006 p1
- [15] Tan Y N, Chim W J, Choi W K, Joo M S, Cho B J 2006 *IEEE Trans. Electron Devices* **53** 654
- [16] Robertson J, Xiong K, Clark S J 2006 *Thin Solid Films* **496** 1
- [17] Liu W, Cheng J, Yan C X, Li H H, Wang Y J, Liu D S 2011 *Chin. Phys. B* **20** 107302
- [18] Umezawa N, Sato M, Shiraishi K 2008 *Appl. Phys. Lett.* **93** 223104
- [19] Ramo D M, Shluger A L, Gabartin J L and Bersuker G 2007 *Phys. Rev. Lett.* **99** 155504
- [20] Zhang H W, Gao B, Yu S M, Lai L, Zeng L, Sun B, Liu L F, Liu X Y, Lu J, Han R Q, Kang J F 2009 *International Conference on Simulation of Semiconductor Processes and Devices* San Diego, CA, American Sept 9–11 2009 p155
- [21] Zhang W, Hou Z F 2013 *Phys. Status Solidi B* **250** 352
- [22] Foster A S, Lopez G F, Shluger A L, Nieminen R M 2002 *Phys. Rev. B* **65** 174117
- [23] Garcia J C, Scolfaro L M R, Leite J R, Lino A T, Freire V N, Farias G A, Da Silva Jr E F 2004 *Appl. Phys. Lett.* **85** 5022
- [24] Garcia J C, Lino A T, Scolfaro L M R, Leite J R, Freire V N, Farias G A, da Silva Jr E F 2005 *27th International Conference on the Physics of Semiconductors* Arizona, American, July 26–30 2005 p189
- [25] Cockayne E 2007 *Phys. Rev. B* **75** 094103
- [26] Dai G Z, Dai Y H, Xu T L, Wang J Y, Zhao Y Y, Chen J N, Liu Q 2014 *Acta Phys. Sin.* **63** 123101 (in Chinese) [代广珍, 代月花, 徐太龙, 汪家余, 赵远洋, 陈军宁, 刘琦 2014 物理学报 **63** 123101]
- [27] Whittle K R, Lumpkin G R, Ashbrook S E 2006 *J. Solid State Chem.* **179** 512
- [28] Kresse G, Joubert D 1999 *Phys. Rev. B* **59** 1758
- [29] Perdew J P, Burke K, Ernzerhof M 1997 *Phys. Rev. Lett.* **77** 3865
- [30] Kresse G, Furthmüller J 1996 *Comp. Mater. Sci.* **6** 15
- [31] Gritsenko V A, Nekrashevich S S, Vasilev V V, Shaposhnikov A V 2009 *Microelectron. Eng.* **86** 1866
- [32] Lee C K, Cho E, Lee H S, Hwang C S, Han S W 2008 *Phys. Rev. B* **78** 012102
- [33] Balog M, Schieber M, Michiman M, Patai S 1977 *Thin Solid Films* **41** 247
- [34] Chen G H, Hou Z F, Gong X G 2008 *Comp. Mater. Sci.* **44** 46

Effect of oxygen vacancy on lattice and electronic properties of HfO₂ by means of density function theory study*

Dai Guang-Zhen^{1)2)†} Jiang Xian-Wei²⁾ Xu Tai-Long²⁾ Liu Qi³⁾
Chen Jun-Ning²⁾ Dai Yue-Hua²⁾

1) (Anhui Provincial Key Lab of Detection and Automation, School of Electrical Engineering, Anhui Polytechnic University, Wuhu 241000, China)

2) (Anhui Provincial Key Lab of Integrated Circuit Design, School of Electronics and Information Engineering, Anhui University, Hefei 230601, China)

3) (Institute of Microelectronics of Chinese Academy of Sciences, Beijing 100029, China)

(Received 5 August 2014; revised manuscript received 19 September 2014)

Abstract

HfO₂, as a gate dielectric material for the charge trapping memory, has been studied extensively due to its merits such as high k value, good thermal stability, and conduction band offset relative to Si, etc.. In order to understand the reason why the charge trapping efficiency is improved by high k capture layer with respect to charge trapping type memory, the variation of HfO₂ crystal texture induced by oxygen vacancy and the influences of it are investigated using the first principle calculation based on density functional theory. Results show that the distance of the nearest neighbor oxygen atom from oxygen vacancy is markedly reduced after optimization, whereas the decrease of distances between the next nearest neighbor oxygen atom from oxygen vacancy and hafnium is less. The change of local crystal lattice is caused by optimized oxygen vacancy for it significantly changes the local lattice, but rarely influences the far lattice. Deep energy level and density of electron states in conduction band are contributed by Hf atoms, while the density of electron states in valence band is contributed by O atoms. The local density of electron states in each element and the total density of electron states in the optimization system are all larger than those in the system without optimization, and the sum of the local densities of electron states is less than the total density of electron states. The trapped charges are moving mainly around the oxygen vacancy and the adjacent atoms of oxygen in the optimization system, but the charges are without optimization throughout the system. The local energy of charge is increased in optimized defect system, while the local energy of charge is conspicuously reduced in the system without optimization, i.e. lattice variation without saturation characteristic has a large effect on the local energy of charge. Results further prove that the change of crystal lattice induced by oxygen vacancy has strong ability to capture charge, which helps improve the features of memory.

Keywords: density function theory, the first-principle, oxygen vacancy, charge trapping

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

DOI: 10.7498/aps.64.033101

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 61376106).

† Corresponding author. E-mail: gzDai2014@163.com