

Р.М. Балабай, Д.В. Залевський

## Епітаксіальні плівки SiGe з дислокаціями для пам'яті з можливістю перемикування: точні розрахунки з перших принципів

*Криворізький державний педагогічний університет 50086, м. Кривий Ріг, balabai@i.ua, denys.zalevski@gmail.com*

Методами теорії функціоналу електронної густини і псевдопотенціалу із перших принципів отримані характеристики електронної підсистеми робочого шару RRAM (Resistive Random Access Memory), що побудований на основі епітаксіальних плівок  $\text{Si}_{0,9}\text{Ge}_{0,1}$  з дислокаціями та впровадженими в них атомами срібла. Розраховано просторові розподіли густини валентних електронів та їх перерізи в межах комірки, розподіл густини електронних станів, електричні заряди в околі осова атома кремнію при різних атомних оточеннях. Досліджено, як зміни в електронній підсистемі досліджуваних об'єктів впливають на зміну їх властивостей від непровідних до провідних.

**Ключові слова:** резистивна пам'ять довільного доступу, функціонал електронної густини, псевдопотенціал із перших принципів, електронна структура, густина електронних станів.

*Стаття поступила до редакції 14.06.2019; прийнята до друку 15.09.2019.*

### Вступ та постановка задачі

Особливістю індустрії інформаційних технологій є постійно зростаючі вимоги до компонентів персональних комп'ютерів, смартфонів, планшетів та інших комп'ютеризованих систем. Це, в свою чергу, виступає передумовою для дослідження нових технологій пам'яті з економічними рішеннями для зберігання даних. Серед нових технологій енергонезалежної пам'яті, призначених для використання в твердотільних накопичувачах, програмованих логічних інтегральних схемах і нейроморфних обчисленнях, резистивна пам'ять з довільним доступом (RRAM) останнім часом набуває все більшої популярності і стає все більш цікавою для спільноти дослідників [1-4].

RRAM (Resistive RAM) використовує зміну опору комірки для зберігання і зчитування з неї інформації. Типова структура комірок RRAM - проста сендвіч-конфігурація метал-ізолятор-метал: між двома електродами розташований шар діелектрика [3]. Спочатку він має високий опір. За певного впливу на нього (наприклад, прикладання напруги певного рівня), в ньому з'являються струмопровідні нитки, тобто, фактично, він перестав бути діелектриком. При зміні полярності прикладеної напруги ці струмопровідні лінії руйнуються [5, 6].

Технологія RRAM не так проста, як хотілося б, але процес виробництва хоч і має свої особливості, але є не надто складним. Процес виготовлення

RRAM полягає в тому, що на вже підготовлену пластину зі сформованим нижнім електродом наносяться шари комірок, здійснюється їх з'єднання і завершується виготовлення чіпа. Можна сказати, що основна проблема полягає не у виготовленні мікросхеми, а в забезпеченні її працездатності та досягненні потрібних характеристик [7].

Існує кілька різновидів такої пам'яті, що розрізняються застосуванням різних матеріалів для виготовлення комірок. Основними вважаються OxRAM (Oxide-based RRAM - метал-оксидна RAM) і CBRAM (conductive-bridging RAM). Об'єднує їх те, що використовуються два електроди, верхній і нижній, між ними знаходиться шар діелектрика, що змінює свої властивості, і ось в ньому-то якраз і полягають відмінності [8].

В CBRAM в робочий шар (наприклад, з аморфного кремнію) впроваджуються атоми активного металу (наприклад, міді або срібла) для створення струмопровідних містків. При цьому один з електродів зроблений з інертного металу (наприклад, вольфраму), а другий - з хімічно активного (наприклад, мідь або срібло). При появі на електродах напруги, іони металу вибудовуються в місток, по якому і проходить струм. CBRAM вимагає більш низької напруги для програмування комірок (рис 1).

У роботі [1] досліджувалася монокристалічна SiGe епітаксіальна пам'ять довільного доступу (epiRAM). Функціональність такої пам'яті

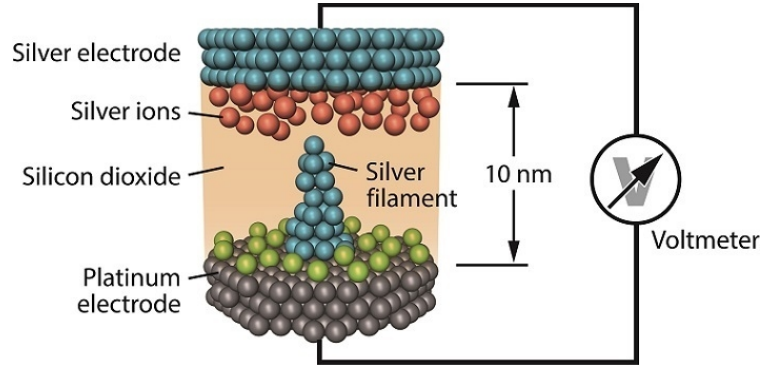


Рис. 1. Будова комірки CBRAM-пам'яті [7].

досягається за рахунок створення одновимірних провідних ниток Ag у дислокаціях у шарі SiGe. Шар  $\text{Si}_{0.9}\text{Ge}_{0.1}$  товщиною 60 нм містив достатню кількість дислокацій для забезпечення перемикання пристрою в масштабі десятків нанометрів [8-10].

Для визначення характеристик робочого шару RRAM, що побудований на основі епітаксціальних плівок  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$  з дислокаціями з впровадженням в них атомів активного металу, в даній роботі застосовувались методи теорії функціоналу електронної густини і псевдопотенціалу із перших принципів.

модельовала робочий шар RRAM, встановлювався шляхом самоузгодженого розв'язування рівнянь Кона-Шема. Згідно Кону і Шему, електронна густина записується у термінах зайнятих ортонормованих одночастинкових хвильових функцій:

$$r(\mathbf{r}) = 2 \sum_i |y_i(\mathbf{r})|^2, \quad (1)$$

Точка на поверхні потенціальної енергії в наближенні Борна-Оппенгеймера визначається мінімумом енергетичного функціоналу по відношенню до хвильових функцій:

## I. Методи та об'єкти обчислення

Основний стан електронно-ядерної системи, що

$$E[\{y_i\}, \{R_j\}, \{a_n\}] = \sum_i \int_{\Omega} d^3r y_i^*(\mathbf{r}) \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \right] y_i(\mathbf{r}) + U[\{r(\mathbf{r})\}, \{R_j\}, \{a_n\}], \quad (2)$$

де  $\{R_j\}$  – координати атомних остовів,  $\{a_n\}$  – усі можливі зовнішні впливи на систему.

У загальноприйнятому формулюванні мінімізація енергетичного функціоналу (2) по відношенню до одночастинкових орбіталей при накладених на них додаткових умовах ортонормування приводить до одночастинкових рівнянь Кона-Шема:

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + \frac{\partial U}{\partial r(\mathbf{r})} \right\} y_i(\mathbf{r}) = e_i y_i(\mathbf{r}) \quad (3)$$

При розв'язуванні цих рівнянь використовується формалізм псевдопотенціалу, згідно з яким тверде тіло розглядається як сукупність валентних електронів та іонних остовів. У наближенні псевдопотенціалу оператор псевдопотенціалу  $V_{PS}$ , який описує взаємодію валентних електронів з остовом, – малий, а відповідна псевдо-хвильова функція – гладка. Псевдопотенціал повинен правильно представляти далекодіючу природу остова та давати змогу отримати рішення у вигляді псевдохвильових функцій, які співпадають з повною

хвильовою функцією за межами радіуса іонного остова  $r_c$ . Крім того, бажано, щоб псевдопотенціал був переносимим, це означає, що один і той же псевдопотенціал може бути використаний при розрахунках в різних хімічних оточеннях і давати результати обчислення з порівнянною точністю. Так, Бачелет, Хаманн і Шльотер запропонували аналітичний придатний вищезначеним умовам псевдопотенціал. Цей псевдопотенціал із перших принципів використовується нами.

Повний кристалічний потенціал будується як сума іонних псевдопотенціалів, які не перекриваються і пов'язані з іонами (ядрами + остовними електронами), розташованими на позиціях  $\mathbf{R}_S$ , які періодично повторюються для кристалів:

$$V_{круст}(\mathbf{r}) \rightarrow V_{PS}(\mathbf{r}) = \sum_P \sum_S V_S^{PS}(\mathbf{r} - \mathbf{p} - \mathbf{R}_S) \quad (4)$$

Для неперіодичних систем, таких як кристал із дефектом, тонка плівка або кластер, проблема відсутності періодичності обходиться методом суперґратки, в якому створюється суперкомірка ромбічного (тетрагонального) типу з атомним

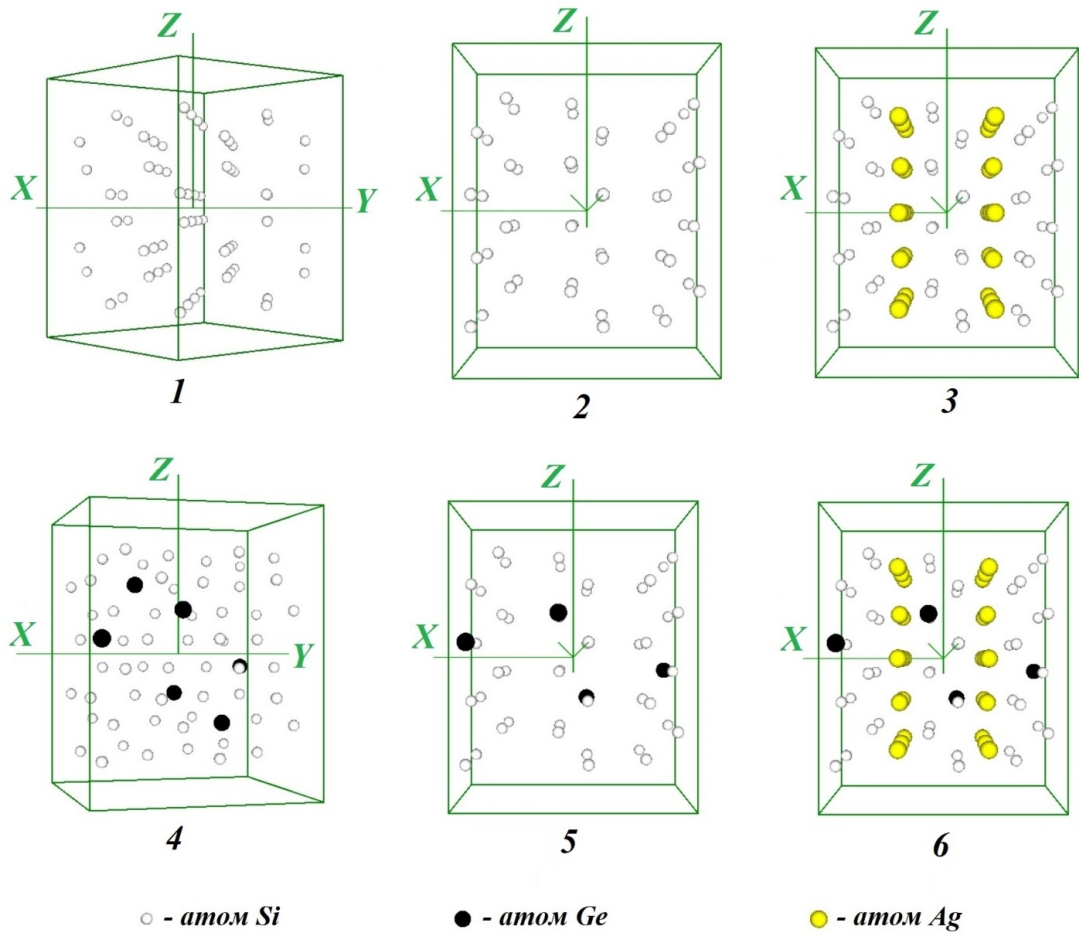


Рис 2. Суперкомiрки штучної суперрешiтки з атомними базами для рiзних об'єктiв обчислення.

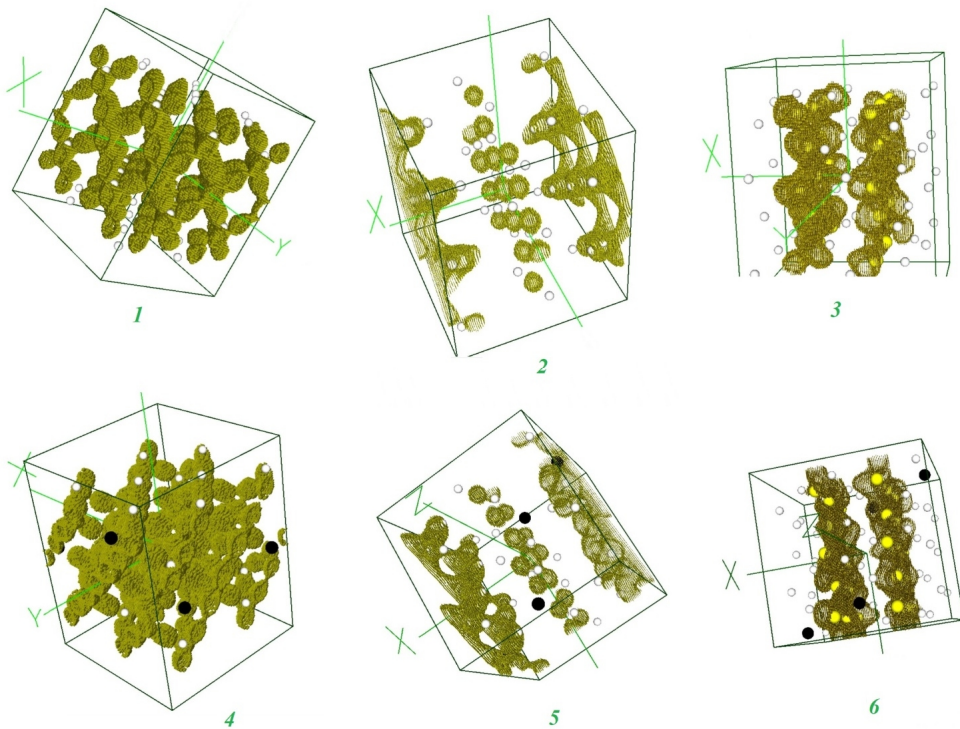
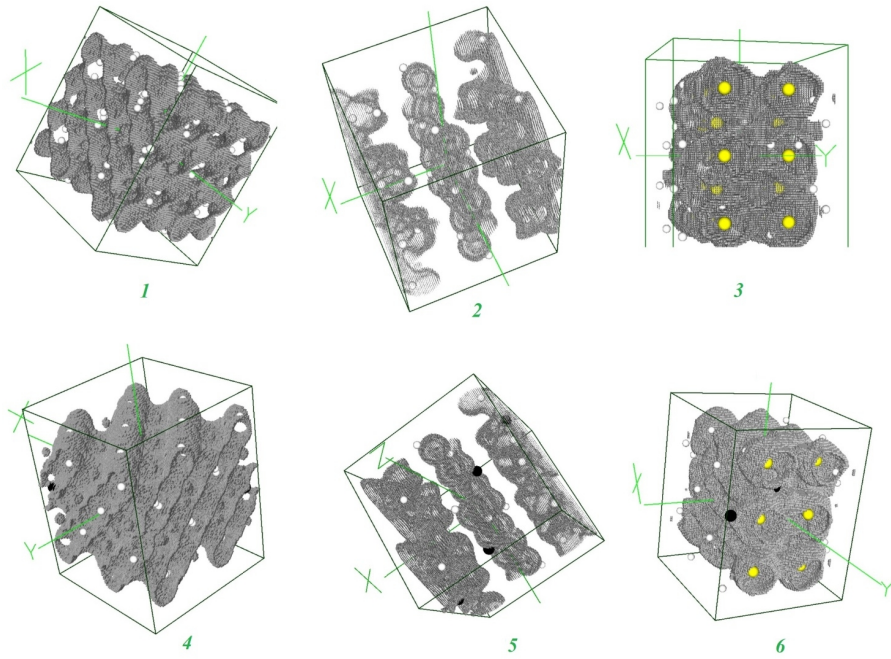
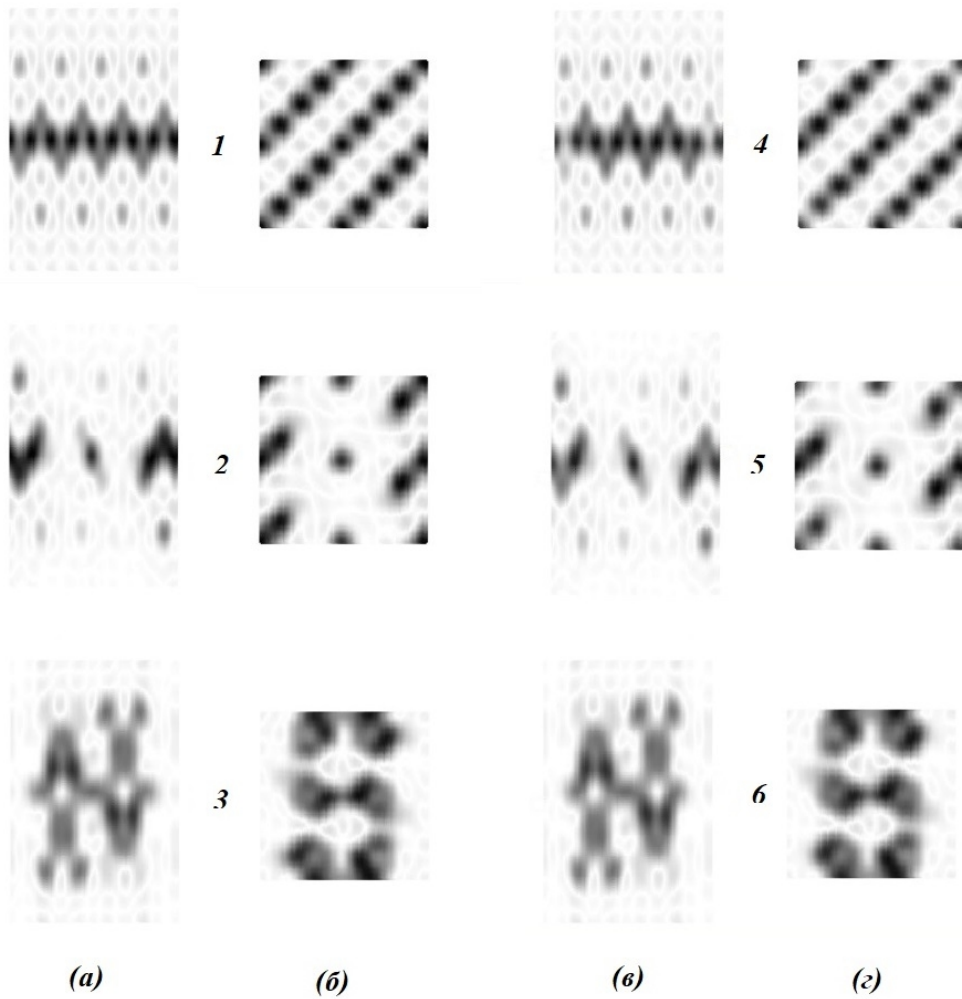


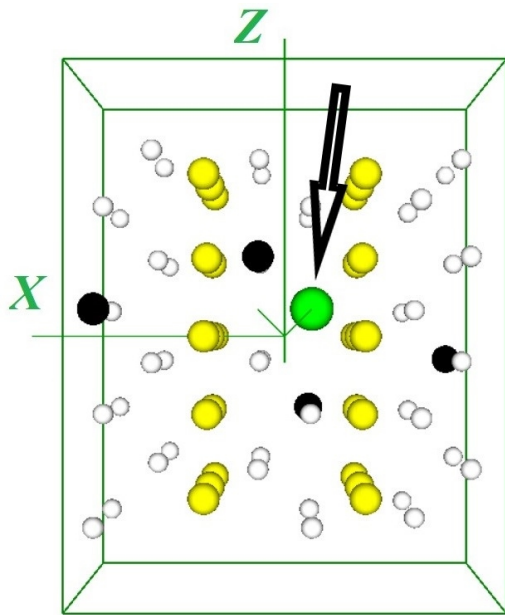
Рис. 3. Просторовi розподiли густини валентних електронiв в межах комiрки для iзозначення 0,5 - 0,6 вiд максимального для об'єктiв 1-6.



**Рис. 4.** Просторові розподіли густини валентних електронів в межах комірки для ізозначення 0 - 0,2 від максимального для об'єктів 1-6.



**Рис. 5.** Перерізи просторових розподілів густини валентних електронів в межах комірки: а – переріз площиною (110) для об'єктів 1-3, б – переріз площиною (100) для об'єктів 1-3, в – переріз площиною (110) для об'єктів 4-6, г – переріз площиною (100) для об'єктів 4-6.



**Рис. 6.** Положення атома кремнію, в околі якого розраховувався електричний заряд (положення атома вказано стрілкою).

базисом, який містить в собі всю інформацію про досліджуваний об'єкт, що транлюється у просторі.

Повсюдна періодичність кристалічної (або штучної) ґратки створює періодичний потенціал і

таким чином накладає таку ж періодичність на електронну густину (мається на увазі теорема Блоха). Потенціал Кона-Шема періодичної системи проявляє ту саму періодичність, що й ґратка, а орбіталі Кона-Шема можуть бути записані в формі Блоха:

$$y(\mathbf{r}) = y_i(\mathbf{r}, \mathbf{k}) = \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) u_i(\mathbf{r}, \mathbf{k}), \quad (5)$$

де  $\mathbf{k}$  є вектором із першої зони Бриллюена (ЗБ). Індекс  $i$  пробігає усі можливі електронні стани. Функція  $u_i(\mathbf{r}, \mathbf{k})$  має періодичність просторової ґратки і може бути розкладена в ряд за плоскими хвилями. Це обґрунтовує використання плоских хвиль як загальної бази, обраної нами, для розкладення періодичної частини орбіталей. Оскільки плоскі хвилі утворюють повний та ортонормований набір функцій, то використання їх для розкладення одночастинкових орбіталей має вигляд:

$$\Psi_j(\mathbf{k}, \mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{N_0} \sqrt{\Omega}} \sum_{\mathbf{G}} b_j(\mathbf{k} + \mathbf{G}) \exp(i(\mathbf{k} + \mathbf{G}) \cdot \mathbf{r}) \quad (6)$$

де  $\mathbf{G}$  є вектор оберненої ґратки,  $\Omega$  – об'єм елементарних комірок, котрі заповнюють кристал або штучну суперґратку у випадку неперіодичних об'єктів.

Рівняння (3) після Фур'є-перетворення має такий вигляд у оберненому просторі:

$$\sum_{\mathbf{G}} \left[ \left\{ \frac{\hbar^2}{2m} (\mathbf{k} + \mathbf{G})^2 - e_j \right\} d_{\mathbf{G}, \mathbf{G}'} + V_{KS}(\mathbf{k} + \mathbf{G}, \mathbf{k} + \mathbf{G}') \right] b_j(\mathbf{k} + \mathbf{G}) = 0 \quad (7)$$

де  $V_{KS}$  – потенціал Кона-Шема:

$$V_{KS}(\mathbf{k} + \mathbf{G}, \mathbf{k} + \mathbf{G}') = V_{ps}(\mathbf{k} + \mathbf{G}, \mathbf{k} + \mathbf{G}') + V_H(\mathbf{G}' - \mathbf{G}) + V_{XC}(\mathbf{G}' - \mathbf{G}) \quad (8)$$

$V_{XC}$  є обмінно-кореляційним потенціалом.

У загальному випадку вирази, що описують потенціали взаємодії, комплексні. Використання атомних базисів, що містять операцію інверсії в своїй групі точкової симетрії, призводить до того, що Фур'є-компоненти при розкладі всіх виразів є дійсними.

Основною величиною в формалізмі ФЕГ є густина електронного заряду. Вона оцінюється на основі самоузгодженого рішення рівнянь (7), яке повинно виконуватися в усіх точках неприводимої частини ЗБ:

$$r(\mathbf{G}) = \frac{2}{N_T} \sum_{\mathbf{k}} \sum_j \sum_{\mathbf{a} \in T} \sum_{\mathbf{G}'} b_j^*(\mathbf{k} + \mathbf{G}' + \mathbf{a}\mathbf{G}) b_j(\mathbf{k} + \mathbf{G}') \quad (9)$$

де індекс  $j$  пробігає усі заняті стани,  $\mathbf{k}$  є вектором із першої ЗБ,  $N_T$  є число операцій  $\mathbf{a}$  в точковій групі  $T$  атомного базису, множник 2 враховує виродженість за спіном [11, 12].

Результати розрахунків отримані за допомогою авторських комп'ютерних програм [13] у вигляді карт просторових розподілів густини валентних електронів та їх перерізів, густини електронних станів, ширини валентної і забороненої зони, заряду в околі атомних остовів.

Для проведення обчислень були створені моделі робочої області  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$  епітаксіальної RAM. Оскільки алгоритм обчислень передбачає

присутність у системі трансляційної симетрії створювалася комірка суперґратки тетрагонального типу з параметрами  $a, b = 10,86 \text{ \AA}$ . При підборі параметра примітивної комірки в кристалографічному напрямку  $c$  враховувалася необхідність уникнення взаємодії між атомами базису, що транлюються. Було обрано параметр  $c = 13,57 \text{ \AA}$ . Атомний базис суперкомірки створювався залежно від об'єкту обчислення. За рахунок трансляції комірки отримувалася нескінченна півка  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ , паралельна до кристалографічних осей  $a, b$ . Наведемо опис модельних об'єктів (рис. 2):

Об'єкт 1: нескінченна півка кремнію, товщиною

10,86 Å; атомний базис суперкомірки містив 64 атоми Si;

Об'єкт 2: нескінченна плівка кремнію з дислокаціями, перпендикулярними площині (100); атомний базис суперкомірки містив 48 атомів Si;

Об'єкт 3: нескінченна плівка кремнію з дислокаціями, які повністю заповнені сріблом з розташуванням атомів, як у кристалі; атомний базис

суперкомірки містив 48 атомів Si та 26 атомів Ag;

Об'єкт 4: нескінченна плівка твердого розчину  $Si_{0,9}Ge_{0,1}$  (механічно напруженого за рахунок застосування до твердого розчину кристалографічних параметрів, що притаманні кристалу кремнію); атомний базис суперкомірки містив 58 атомів Si та 6 атомів Ge;

Об'єкт 5: нескінченна плівка твердого розчину

Таблиця 1

Електричні заряди в околі остова атома кремнію радіусом 1,32 Å при різних атомних оточеннях

Номер та назва об'єкта	Заряд в околі остова атома кремнію, вказаного на рисунку, $e$
Об'єкт 1: нескінченна плівка кремнію, товщиною 10,86 Å; атомний базис суперкомірки містив 64 атоми Si;	-3,8829
Об'єкт 2: нескінченна плівка кремнію з дислокаціями, перпендикулярними площині (100); атомний базис суперкомірки містив 48 атомів Si;	-0,0089
Об'єкт 3: нескінченна плівка кремнію з дислокаціями, які повністю заповнені сріблом з розташуванням атомів, як у кристалі; атомний базис суперкомірки містив 48 атомів Si та 26 атомів Ag;	-7,9858
Об'єкт 4: нескінченна плівка твердого розчину $Si_{0,9}Ge_{0,1}$ (механічно напруженого за рахунок застосування до твердого розчину кристалографічних параметрів, що притаманні кристалу кремнію); атомний базис суперкомірки містив 58 атомів Si та 6 атомів Ge;	-3,8325
Об'єкт 5: нескінченна плівка твердого розчину $Si_{0,9}Ge_{0,1}$ (механічно напруженого за рахунок застосування до твердого розчину кристалографічних параметрів, що притаманні кристалу кремнію) з дислокаціями, перпендикулярними площині (100); атомний базис суперкомірки містив 44 атоми Si та 4 атоми Ge;	0,3036
Об'єкт 6: нескінченна плівка твердого розчину $Si_{0,9}Ge_{0,1}$ (механічно напруженого за рахунок застосування до твердого розчину кристалографічних параметрів, що притаманні кристалу кремнію) з дислокаціями, перпендикулярними площині (100), які повністю заповнені сріблом з розташуванням атомів як у кристалі; атомний базис суперкомірки містив 44 атоми Si, 4 атоми Ge та 26 атомів Ag;	-7,7102

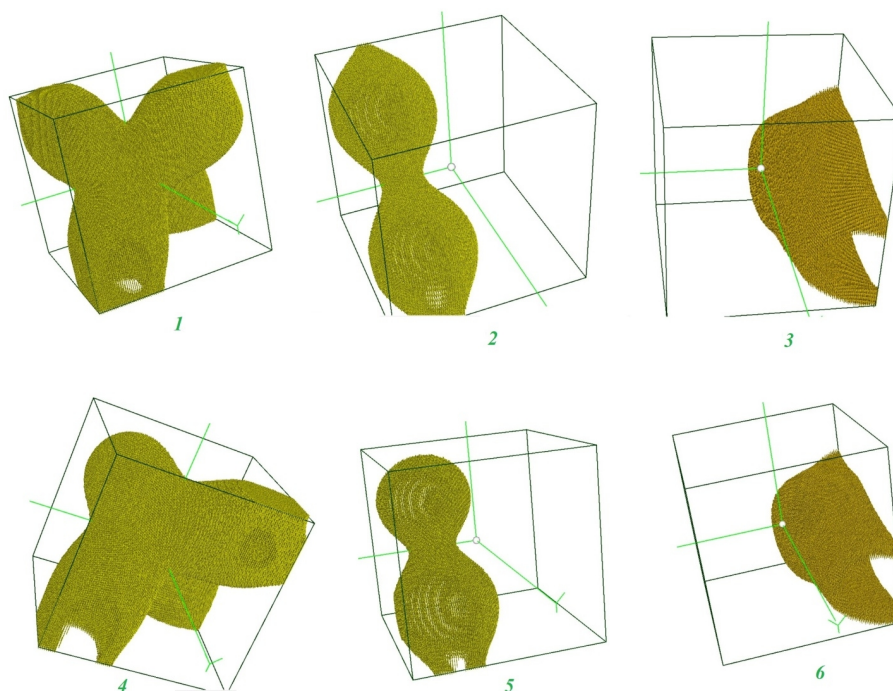


Рис. 7. Просторовий розподіл густини валентних електронів в околі атома кремнію, для якого розраховувався електричний заряд, для ізозначення 0,5-0,6 від максимального в об'єктах 1-6.

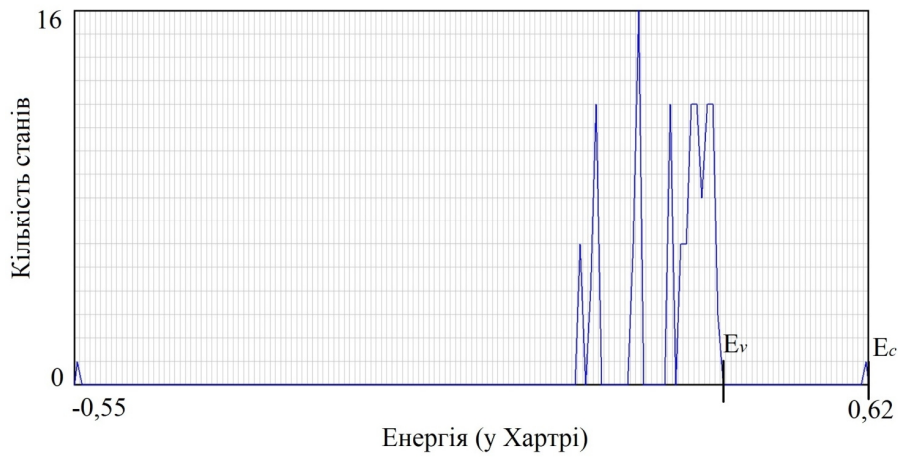


Рис. 8. Густина електронних станів з вказуванням валентної та зон провідності кристала кремнію.

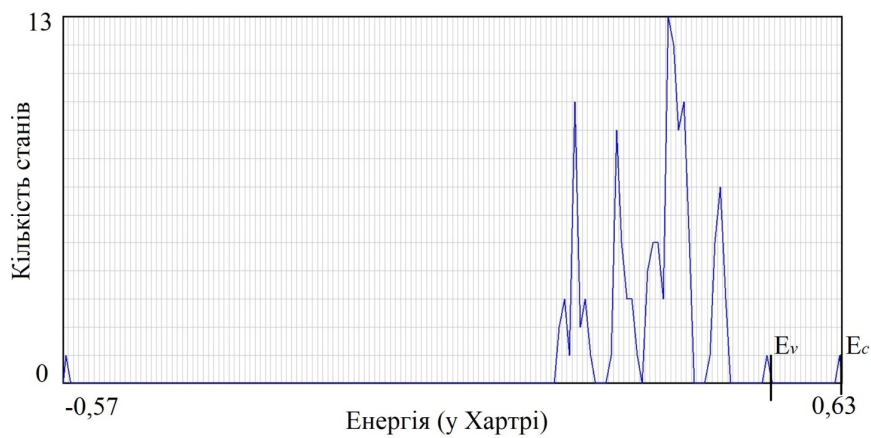


Рис. 9. Густина електронних станів з вказуванням валентної та зон провідності твердого розчину Si<sub>0,9</sub>Ge<sub>0,1</sub>.

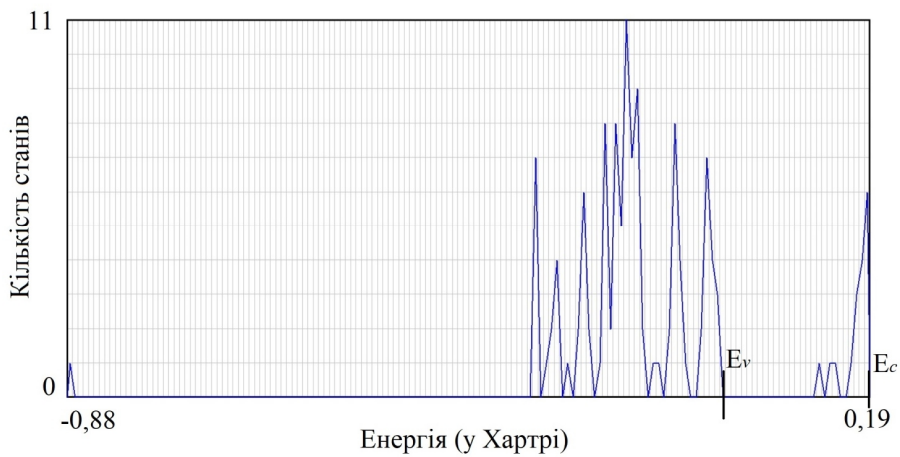


Рис. 10. Густина електронних станів з вказуванням валентної та зон провідності для плівки кремнію.

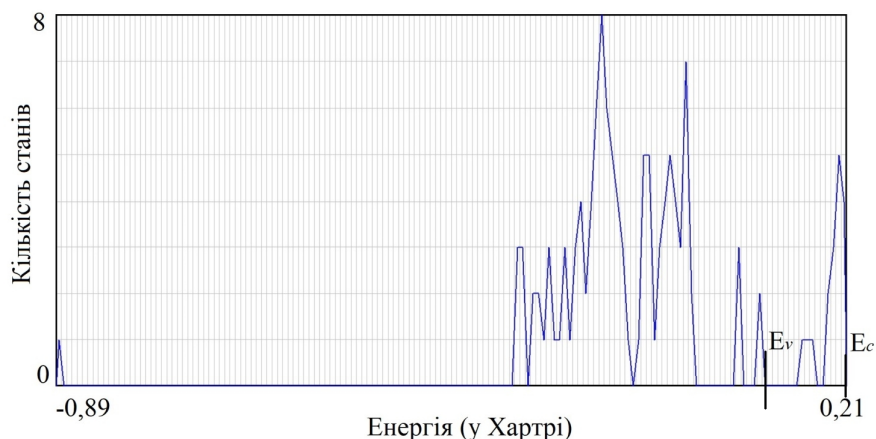
Si<sub>0,9</sub>Ge<sub>0,1</sub> (механічно напруженого за рахунок застосування до твердого розчину кристалографічних параметрів, що притаманні кристалу кремнію) з дислокаціями, перпендикулярними площині (100); атомний базис суперкомірки містив 44 атоми Si та 4 атоми Ge;

Об'єкт 6: нескінченна плівка твердого розчину Si<sub>0,9</sub>Ge<sub>0,1</sub> (механічно напруженого за рахунок застосування до твердого розчину кристалографічних параметрів, що притаманні кристалу кремнію) з дислокаціями, перпендикулярними площині (100),

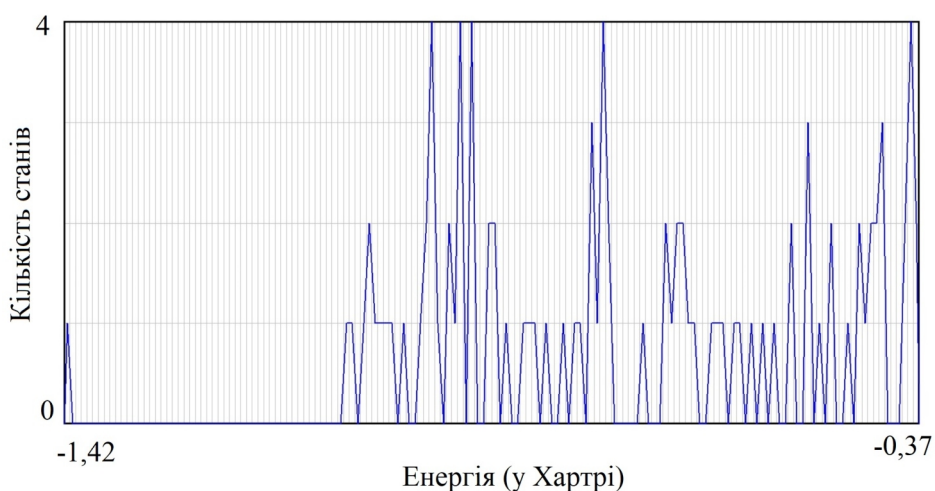
які повністю заповнені сріблом з розташуванням атомів як у кристалі; атомний базис суперкомірки містив 44 атоми Si, 4 атоми Ge та 26 атомів Ag;

## II. Результати обчислення та їх обговорення

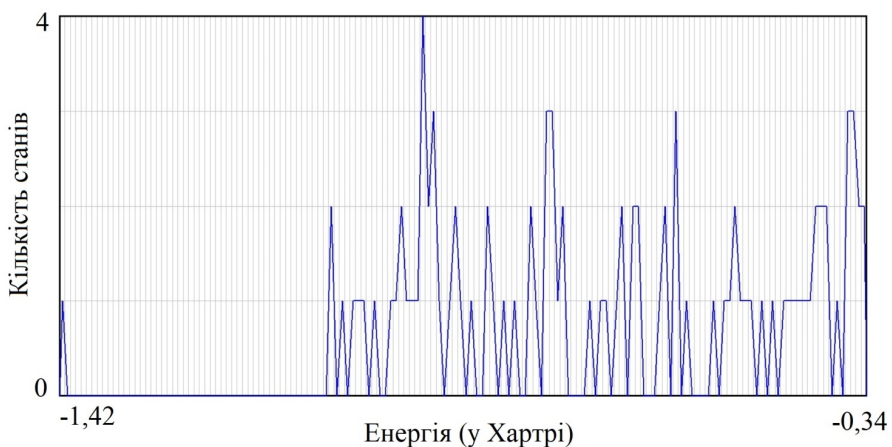
На рис 3, 4 наводяться розраховані просторові розподіли густини валентних електронів та їх перерізи (рис. 5) в межах комірки. Також були



**Рис. 11.** Густина електронних станів з вказуванням валентної та зон провідності для плівки твердого розчину  $\text{Si}_{0,9}\text{Ge}_{0,1}$



**Рис. 12.** Густина електронних станів для плівки кремнію з дислокаціями.



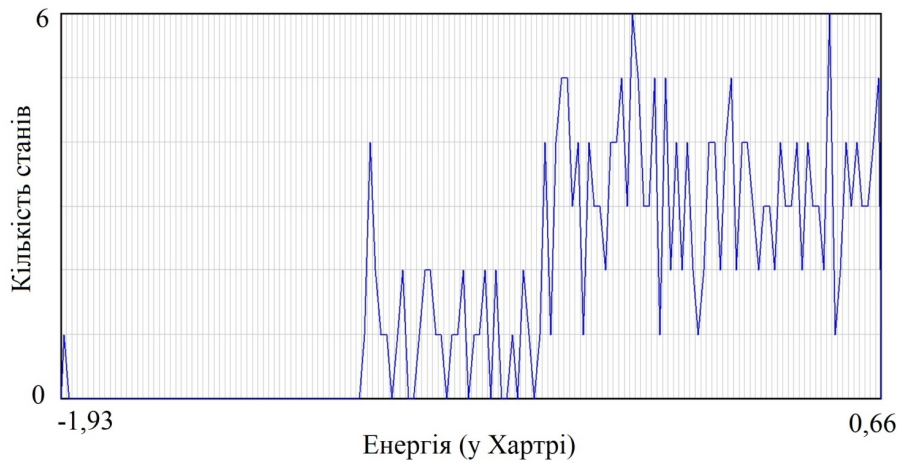
**Рис. 13.** Густина електронних станів для плівки твердого розчину  $\text{Si}_{0,9}\text{Ge}_{0,1}$  з дислокаціями.

обчислені електричні заряди в околі остова атома кремнію радіусом  $1,32 \text{ \AA}$  при різних атомних оточеннях (табл. 1), а саме: в оточенні власних атомів у плівці, в оточенні власних атомів та атомів Германію в плівці твердого розчину  $\text{Si}_{0,9}\text{Ge}_{0,1}$ , на межі з дислокацією та на межі з дислокацією, що заповнена атомами срібла (положення атома кремнію показано на рис. 6). Видно характерну для алмазоподібного типу хімічного зв'язку організацію розподілу валентних електронів з максимумом

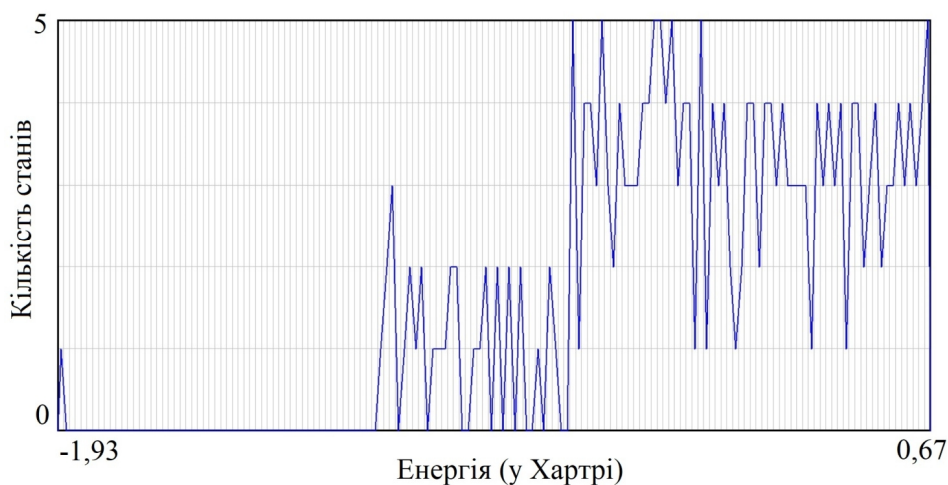
вздовж напрямку [111]. Введення в кристал кремнію атомів германію або видалення із масиву плівки частини атомів при формуванні дислокації, або внесення в пустоти дислокації атомів срібла відбивається відповідно в картах розподілу густини валентних електронів та значень електричних зарядів.

Аналізуючи розподіл густини електронних станів для досліджуваних об'єктів можна вказати, що зміни в організації атомної будови об'єктів приводять до





**Рис. 14.** Густина електронних станів для плівки кремнію з дислокаціями, що заповнені атомами срібла.



**Рис. 15.** Густина електронних станів для плівки твердого розчину  $\text{Si}_{0,9}\text{Ge}_{0,1}$  з дислокаціями, що заповнені атомами срібла.

появи змін у організації розподілів.

Наведений на рис. 8 розподіл для кристала Si демонструє характерну організацію, при якій чітко виділяється стеля валентної зони, дно зони провідності, що дає можливість зафіксувати наявність забороненої зони. При цьому видно, що валентна зона складається із 4-х підзон, що відповідає  $sp^3$ -гібридації.

Проте, механічно напружений твердий розчин  $\text{Si}_{0,9}\text{Ge}_{0,1}$  має особливу будову валентних підзон – можна виділити 6 підзон, на відміну від бездефектного кристала кремнію (рис. 9). При цьому заборонена зона чітко фіксується та має ширину, майже наполовину меншу, порівняно з кристалом кремнію.

Для плівок кремнію демонструється поява станів у забороненій зоні (рис. 10), що пов'язано з наявністю незавершених зв'язків у поверхневих атомах плівки. Для атомного базису, що використовувався при моделюванні плівок, що обмежені двома поверхнями типу (100), 16 атомів були поверхневими, для яких по 2 електрони не брали участь у створенні ковалентних зв'язків, тобто, формувалися 32 незавершених зв'язки, через що з'явилися 16 станів у забороненій зоні

(неврахування спінів дозволяло розташування двом електронам на одному енергетичному рівні). Ці 16 станів, що відповідають обірваним зв'язкам, розташовані поблизу дна зони провідності (див. рис. 10). При цьому ширина забороненої зони майже збігається зі значенням, отриманим для кристала.

Щодо плівки твердого розчину  $\text{Si}_{0,9}\text{Ge}_{0,1}$ , то енергетичні стани, пов'язані з незавершеними зв'язками, аналогічно плівкам кремнію, з'являються в забороненій зоні (рис. 11).

При наявності в плівках дислокацій спектр розподілу електронних станів стає лінійчатим, що характерно для молекул (рис. 11, 12). Таку трансформацію розподілу станів, при якій більшість дозволених станів можуть заповнюватися двома електронами при умові неврахування спіна в розрахунках, можна пояснити тим, що при внесенні в модель плівки кремнію чи твердого розчину  $\text{Si}_{0,9}\text{Ge}_{0,1}$  дислокацій створюється сімейство паралельно розташованих нанодротів, для яких подібна картина розподілу електронних станів є характерною.

При заповненні дислокацій сріблом характер розподілу густини електронних станів вказує на те, що досліджуваний об'єкт має металічні властивості, оскільки заборонена зона відсутня (рис 13, 14).

Отже, трансформація плівок кремнію або плівок твердого розчину в плівки з дислокаціями з наступним заповненням їх атомами срібла супроводжується значною зміною їх електронних властивостей: від непровідних до провідних.

## Висновки

Методами теорії функціоналу електронної густини і псевдопотенціалу із перших принципів отримані характеристики електронної підсистеми робочого шару RRAM (Resistive Random Access Memory), що побудований на основі епітаксialьних

плівок  $\text{Si}_{0.9}\text{Ge}_{0.1}$  з дислокаціями та впровадженими в них атомами срібла.

Трансформація плівок кремнію або плівок твердого розчину в плівки з дислокаціями з наступним заповненням їх атомами срібла супроводжується значною зміною їх електронних властивостей: від непровідних до провідних, що дозволяє керувати станом комірки резистивної пам'яті.

**Балабай Р.М.** – , професор, д.ф.-м.н.;  
**Залевський Д.В.** – аспірант кафедри фізики та методики її навчання.

- [1] Shinhyun Choi et al., Nature Materials 17, 335 (2018).
- [2] Y. Burt et al., Nat. Mater. 16, 414 (2017).
- [3] Z. Wang et al., Nat. Mater. 16, 101 (2016).
- [4] K.-H. Kim et al., Nano Lett. 12, 389 (2012).
- [5] Y. Yang et al., Nat. Commun. 5, 377 (2014).
- [6] S.H. Jo, K.H. Kim, W. Lu, Nano Lett. 9, 870 (2009).
- [7] Y. Yang et al., Nat. Commun. 3, 732 (2012).
- [8] K. Krishnan, T. Tsuruoka, C. Mannequin, & M. Aono, Adv. Mater. 28, 640 (2016).
- [9] D.C. Houghton, J. Appl. Phys. 70, 2136 (1991).
- [10] F. Rollert, N.A. Stolwijk, & H. Mehrer, J. Phys. D 20, 1148 (1987).
- [11] N. Yakovkin, P.A. Dowben, Surface Review and Letters 14(3), 481 (2007).
- [12] E. S. Kryachko, E.V. Ludeña, Physics Reports 544, 123 (2014).
- [13] Ab initio calculation [E-resource] – Mode access to the resource:  
<http://sites.google.com/a/kdpu.edu.ua/calculationphysics>.

R.M. Balabai, D.V. Zalevskyi

## SiGe Epitaxial Films with Dislocations for the Switchable Memory: the Accurate First-Principle Calculations

*Kyryvi Rih State Pedagogical University, Kyryvi Rih, 50086, Ukraine, balabai@i.ua, denys.zalevski@gmail.com*

The methods of the theory of the functional of electron density and pseudopotential from the first principles obtained the characteristics of an electronic subsystem of the RRAM (Resistive Random Access Memory) layer constructed on the basis of epitaxial films  $\text{Si}_{0.9}\text{Ge}_{0.1}$  with dislocations and embedded in them silver atoms. The spatial distributions of the density of valence electrons and their cross sections within the cell, the distribution of the density of electronic states, and electric charges in the vicinity of the silicon atoms in different atomic environments are calculated. It is investigated how changes in the electronic subsystem of investigated objects influence the change of their properties from non-conducting to conducting ones.

**Keywords:** resistive random access memory, the electron density functional, ab initio pseudopotential, electron structure, density of states.