# 第一原理計算による合金 Ge-Sb-Te 相変化メモリの解析

### First principles study of Ge-Sb-Te alloy phase change memory

名大院工<sup>1</sup>, 名大未来研<sup>2</sup> <sup>O</sup>(M1)野原 弘晶<sup>1</sup>, 白川 裕規<sup>1</sup>, 洗平 昌晃<sup>2,1</sup>, 白石 賢二<sup>2,1</sup>

Nagoya Univ.<sup>1</sup>, IMaSS.<sup>2</sup>,

## <sup>°</sup>Hiroaki Nohara<sup>1</sup>, Shirakawa Hiroki<sup>1</sup>, Masaaki Araidai<sup>2,1</sup>, Shiraishi Kenji<sup>2,1</sup>

E-mail: nohara.hiroaki@c.mbox.nagoya-u.ac.jp

#### 1. 研究背景

合金 GeSbTe は次世代不揮発性メモリとし て期待されている物質の一つである。合金 GeSbTe は低抵抗である結晶状態(SET)と高抵 抗であるアモルファス状態(RESET)とで相変 化する性質を利用することで、メモリとしての データの読み書きを行なっている。この相変化 は電流の印加によって引き起こされるが、その 詳細なメカニズムはまだはっきりとはわかっ ていない。本研究の目的は合金 GeSbTe におい て相変化のおきる温度や時間に加え、相変化後 の構造を明らかにすることを目的とする。その ために、合金 GeSbTe における電流印加を第一 原理分子動力学計算によって模擬した。

2. 計算条件と計算モデル

本研究では、密度汎関数法に基づく第一原理 計算コードである VASP(Vienna Ab initio Simulation Package)コードを用いた[1-4]。交換・ 相関エネルギーの計算では、vdW 力を考慮す るために PBE-D2 汎関数を用いた[5]。原子核と 電子の相互作用には PAW(projector augmented wave)ポテンシャルを採用した。波動関数には 平面波展開を用い、カットオフエネルギーは 218.7eV とした。初期構造である合金 GeTeSb の構造はa = b = 12.6Å、c = 18.3Å、 $\alpha = \beta =$ 90°、 $\gamma = 120$ °とし、Ge 原子が 18 個、Sb 原子 が 18 個、Te 原子が 36 個のものを用意した。 第一原理分子動力学計算では、Fig.1(b)に示す 温度履歴で計算を行った。



Fig.1 (a) Calculation model of GeSbTe. (b) Temperature of Molecule dynamics calculation.

3. 結果

はじめに、RESET 変化について見ていく。 Fig.2 は RESET 変化を模擬した計算によって 得られた構造である。原子の並びが揃っていな いことからアモルファス状態であることがわ かる。したがって 15(K/ps)の速さで冷却するこ



Fig.2 (a) Atomic structure of RESET calculation. (b) Side view of the structure.



Fig.3 (a) Atomic structure of SET calculation. (b) Side view of the structure.

とで、合金 GeSbTe の RESET を再現すること ができた。

次に、SET 変化について見ていく。Fig.3 は SET 変化を模擬した計算によって得られた構 造である。この構造は原子の並びが揃っており、 結晶構造を取っている。したがって 0.5(K/ps)の 速さで冷却することで、合金 GeSbTe の SET を 再現することができた。

4. まとめ

本研究では、第一原理分子動力学計算によるシミュレーションによって合金 GeSbTeにおける相変化の温度と時間を明らかにすることができた。また、SET 変化は RESET 変化に比べ非常に長い時間がかかることを確認した。今後の展望として、電流印加による電荷状態の変化を考慮したシミュレーションを行っていきたい。

#### 文献

- [1] G. Kresse and J. Hafner, Phys. Rev. B 47, 558 (1993).
- [2] G. Kresse and J. Hafner, Phys. Rev. B **49**, 14251 (1994).
- [3] G. Kresse and J. Furthmüller, Comput. Mat. Sci. 6, 15 (1996).
- [4] G. Kresse and J. Furthmüller, Phys. Rev. B 54, 11169 (1996).
- [5] S. Grimme, J. Comp. Chem. 27, 1787 (2006).