

分子動力学法を用いた $\text{Ge}_2\text{Sb}_2\text{Te}_5$ の熱伝導率計算Calculation of Thermal Conductivity of $\text{Ge}_2\text{Sb}_2\text{Te}_5$ by Molecular Dynamics早大理工¹ ○滝澤 諄弥¹ 富田 基裕¹ 山中 湧司¹ 渡邊 孝信¹Waseda Univ.¹, °J. Takizawa¹, M. Tomita¹, Y. Yamanaka¹, and T. Watanabe¹

E-mail: junya.t1008@suou.waseda.jp

【はじめに】次世代の不揮発性メモリ技術として、Ge-Sb-Te 系化合物を利用した相変化メモリが注目を集めている。熱によってアモルファス相/結晶相間の相変化を引き起こすことで電気抵抗値を書き換える相変化メモリは、メインメモリとして使用される DRAM より大きい容量と、ストレージより速いアクセス速度を持つことから、メインメモリとストレージの処理速度の差を埋める役割を持つストレージクラスメモリ(SCM)として期待されている。一方、相変化に熱を伴うことから外的要因による熱変化に弱く、熱流の制御は相変化メモリの構造設計において重要な課題となっているが、準安定相の特性や界面における原子の挙動など、未解明な点が多く残っている。そこで、分子動力学法(MD)を用いて、ナノスケールにおける Ge-Sb-Te 系化合物の熱特性の評価を行った。本研究では、最近開発された $\text{Ge}_2\text{Sb}_2\text{Te}_5$ 用の原子間ポテンシャルが熱設計に必要な物性を再現できるかを確認するため、準安定相の岩塩型構造およびアモルファス相の熱伝導率を、MD シミュレーションを用いて評価した。

【計算方法】使用するポテンシャルは、ガウス近似ポテンシャル(Gaussian Approximation Potential: GAP)[1] という機械学習フレームワークを用いて DFT-MD のデータから開発された $\text{Ge}_2\text{Sb}_2\text{Te}_5$ 用のポテンシャル[2]である。Fig.1 に熱伝導率計算に使用した $\text{Ge}_2\text{Sb}_2\text{Te}_5$ 構造の立方体モデルを示す。 $\text{Ge}_2\text{Sb}_2\text{Te}_5$ の準安定相は、Te サイトと空孔を 20%含む Ge/Sb サイトで構成される岩塩型構造として、密度が結晶の実測値 6.28g/cm^3 [3]と等しくなるように作成した。続けて、密度がアモルファスの実測値と等しい 5.86g/cm^3 [3]となるように作成した結晶を 1250K で熔融し、15.8K/ps の速度で 300K まで冷却することでアモルファス化した構造を作成した。熱伝導率の計算は、それぞれの構造を 300K で安定させた後、Green-Kubo 法で実施した。

【結果】Fig.2 に得られた熱伝導率の結果を示す。熱伝導率は準安定相が $0.365 \pm 0.008\text{W/mK}$ 、そしてアモルファスが $0.153 \pm 0.017\text{W/mK}$ と算出された。準安定相、アモルファスについて、それぞれ第一原理計算によって得られた熱伝導率 0.42W/mK [4]、 0.15W/mK [5]と、薄膜の測定値 0.6W/mK 、 0.2W/mK [6]に近い値が得られている。加えてポテンシャルがサンプリングしたデータには結晶とアモルファスが含まれており、これらすべて DFT-MD と同様の局所的な構造が既に得られていることから、非経験的なデータによる熱伝導率の計算は正しく行われたと考えられる。今後は、熔融・徐冷プロセス中の構造における熱伝導率の計算を解析することで、熔融・徐冷時の熱流の挙動について、より詳細な調査を進めていく。

【謝辞】本研究は JST-CREST (JPMJCR19Q5)の補助を受けて実施された。また一部はキオクシア株式会社と早稲田大学との組織連携活動の一環として実施された。

[1] A.P. Bartók et al., Int. J. Quantum Chem., 115 (16) (2015), pp.1051-1057 [2]F. C. Mocanu et al., J. Phys. Chem. B 122 (2015) 38 8998–9006 [3]T. Nonaka et al., Thin Solid Films, 370 (2000), pp. 258-261 [4]Y. Pan et al., Crystals, 9(3) (2019) 136 [5] T.Q. Duong et al., RSC Adv, 11 (2021) 10747-10752 [6] K.S.Siebert et al., Rep. Prog. Phys. 78 (2015) 013001

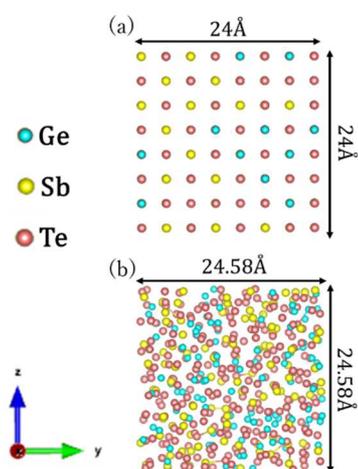


Fig.1 Schematic of calculated model.
(a)Meta-stable (b)Amorphous

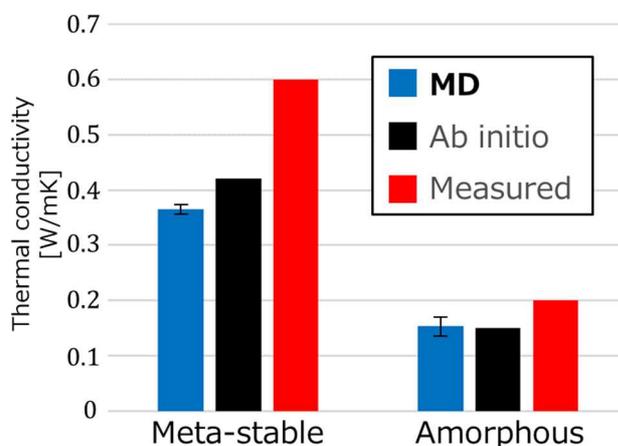


Fig.2 Results and reference values of thermal conductivity.