

GST 相変化材料の電気的、光学的性質：解釈をめぐる問題点

Electrical and Optical Properties in GST Phase Change Materials:

On the Matters of Debate

岐阜大工 嶋川 晃一

Gifu Univ. Koichi Shimakawa

カルコゲン元素を含む 3 元系 Ge-Sb-Te (GST)などの相変化材料はアモルファス↔結晶相の転移に伴って光学反射率、電気伝導度は大きく変化する[1, 2]。これらの現象を示す相変化材料に特化した国内外の活発な研究会活動は良く知られるところである[3]。

光学反射率はその光学波長領域での複素誘電率、電気伝導度はその伝導形態（半導体あるいは金属的）で決定される。GST において、上記二つの現象をめぐり、明らかにしておかねばならない論点がある[4-10]。本講演では、1) 光学反射率、2) 電気伝導度の違いをもたらす主要因を議論する。これらは単に物理現象の解釈だけでなく、材料デザインを考える際にも重要であろう。以下に論点を要約する：

- 1) 結晶相の大きな光学反射率（大きな光学誘電率）は GST 結晶（p-結合）の特異性（共鳴バンド）で説明されてきた[4]。この説は直観的で受け入れやすいが、量子化学の分野で必ずしも定着した概念ではない[9]。バンドギャップ（結合強度の目安：バンドギャップではない）と強い相関があることが見いだされており、共鳴結合の概念を必要としない[6]。実際に共鳴結合の範疇に入らない $\text{Cu}_2\text{Ge}_1\text{Te}_3$ でも大きな光学変化が報告されている[11]。近年、共有結合と金属結合の間の性質をもつ *metavalent bonding* という用語も提案されているが[8]、GST は普通の共有結合半導体の性質をもつ[6, 9]。
- 2) アモルファス→結晶相の大きな電気伝導度の変化は、いわゆる非金属—金属転移である[4, 5, 7]。結晶相は p 形縮退半導体（金属伝導）の性質をもつ[12]。GST はいわゆる *dirty metal* の範疇に入り、縮退状態であっても電気伝導の温度依存性が半導体のようにふるまう場合がある[5, 13]。GST においてバンド端（価電子帯の上端）が局在するという“仮定”（実験的証拠はない）のもと、電気伝導の温度依存性の特徴から *variable-range hopping* (VRH) [13]のモデルが適用されているが[7]、キャリアのホッピングを確証づけるためのホッピング長や局在半径などの詳細な議論が必要であろう[5, 10]。上記議論には *grain boundary* の影響が含まれていない。GST（結晶状態）の THz 領域での伝導には *grain boundary* の効果がはっきり現れる[14]。直流法で得られる、伝導度、キャリア数、移動度などの重要パラメータの評価には注意が必要である[14]。

ここまでは主として GST 結晶相の電気、光学的性質に言及してきたが、アモルファス相における“抵抗ドリフト”（電気スイッチ）と呼ばれる不安定性をもつ[15]。種々の議論があるが、アモルファス相につきまとう熱力学的な準安定性と関係しそうである。

- [1] M. Wuttig and N. Yamada, *Nature Mater.* **6** (2007) 824.
- [2] M. Terao *et al.*, *Jpn. J. Appl. Phys.* **48** (2009) 080001.
- [3] PCOS 相変化研究会（日本）、European Phase-Change and Ovonic Symposium (EPCOS)(欧州)
- [4] K. Shportko *et al.* *Nature Mater.* **7** (2008) 653.
- [5] K. Shimakawa *et al.*, *J. Appl. Phys.* **114** (2013) 233105.
- [6] K. Shimakawa *et al.*, *APL Mater.* **3** (2015) 041801.
- [7] T. Siegrist *et al.*, *Nature Matter* **10** (2011) 202.; J. Volker *et al.*, *Adv. Func. Mater.* **23** (2015) 6390; .
- [8] M. Wuttig *et al.*, *arXiv: 1712.03588* (2017).
- [9] R.O. Jones, *J. Phys. Condens. Matter* **30** (2018) 153001.
- [10] 嶋川晃一、*固体物理（解説）* **53** (2018) 721.
- [11] Y. Saito *et al.*, *Appl. Phys. Lett.* **102** (2013) 051910.
- [12] J.-J. Kim *et al.*, *Phys. Rev. B* **76** (2007) 115124.
- [13] N.F. Mott, *Conduction in Non-Crystalline Materials* 2nd ed. (Clarendon, Oxford, 1993).
- [14] K. Shimakawa *et al.*, *Phys. Stat. Sol. RRL* **2020**, 2000411.
- [15] I.V. Kaprov *et al.* *J. Appl. Phys.* **102** (2007) 124503.