SiO_2に囲まれたナノスケール溶融塩の相変化シミュレーション

Molecular Dynamics Simulation of Phase Transition of Nanoscale Molten Salts Surrounded by SiO_2

早大理工　°西村 祐亮　山中 湧司　渡邉 孝信

Waseda Univ., °Y. Nishimura, Y. Yamanaka, and T. Watanabe

E-mail: yusukeskelton@toki.waseda.jp

【はじめに】メインメモリより低コストでストレージよりアクセス速度が大きいストレージクラスメモリとして、ゲルマニウムとアンチモン、テルルのカルコゲナイド合金 GST を記録層に用いる相変化メモリ(PCM)が注目されている。PCM では、異なる大きさの電気パルスを印加しジュール加熱を施すことでアモルファス相と結晶相の変化を可逆的に生じさせ、それに伴う電気抵抗変化を利用して情報を記録する。しかし、GST の相変化メカニズムや熱安定性を左右する要因については未だ不明な点が多い。本研究では、PCM を模擬した系として、SiO_2 で囲まれたナノスケール NaCl 構造を用い、融解や結晶化の様子を分子動力学(MD)シミュレーションで調査した。NaCl を用いた理由は、GST と SiO_2 が共存する系を表現できる原子間ポテンシャルがないためである。NaCl の融点は GST に比べると 150℃ほど高いが、SiO_2 の融点よりは十分低く、融解および結晶化温度の変化を定性的に議論することは可能と考えた。

【計算手法】Fig. 1 に計算に用いた構造モデルを示す。原子間ポテンシャル関数には Born-Mayer-Huggins ポテンシャルを用いた[1,2]。x-y 方向のサイズが 40Å×40Å、30Å×30Å、20Å×20Å、z 方向のサイズが 20Å の NaCl 構造を用意し、x-y 面内の外周囲を SiO_2 で囲んで 3 次元周期境界条件を適用した。周囲の SiO_2 が NaCl の結晶化温度へ与える影響を調べるため、NaCl 領域のみのモデルも用意した。MD シミュレーションでは、まず 1000K の高温状態にしたのち、異なる冷却速度で 300K まで急冷し、冷却後の構造の動径分布関数(2 体相関関数)g(r)を調べた。同一条件で初速度を発生させる乱数を変えて 20 回同じ計算を行い、$\int dr|g(r)-1|$ の値の大きさを結晶化の目安とした。

【結果】周囲を SiO_2 で囲まれていないモデルでは、単位構造のサイズに関わらず、冷却時間 300ps ですべて結晶化した。周囲を SiO_2 で囲まれている場合、40Å×40Å では冷却時間 2100ps で 16 回結晶化し、30Å×30Å では冷却時間 900ps で 13 回結晶化した。30Å×30Å の中モデルで冷却時間を 2100ps 以下に縮めると 1 回も結晶化しなかった。Fig. 2 に 50%以上の確率で結晶化するために必要な冷却時間を示す。NaCl 領域のサイズと結晶化のしやすさにシンプルな関係は見られなかったが、周囲を SiO_2 で囲まれた場合は結晶化に必要な冷却時間が大幅に伸びていることは歴然としている。つまり、SiO_2 と界面の存在が NaCl の結晶化の妨げとなっていることを示唆している。

【謝辞】本研究はキオクシア株式会社と早稲田大学理工総研の連携活動の一環として実施した。また本研究の一部は科研費(22H01530)の助成を受けている。

【参考文献】[1] F. G. Fumi, M. P. Tosi, Journal of Physics and Chemistry of Solids, vol. 25, issue 1, pp.31-43(1964). [2] K. Kawamura, Molecular Dynamics Simulations, ed. F. Yonezawa (Springer-Verlag, Berlin Heidelberg, 1990), Vol. 103, Chap. 3, p. 88.

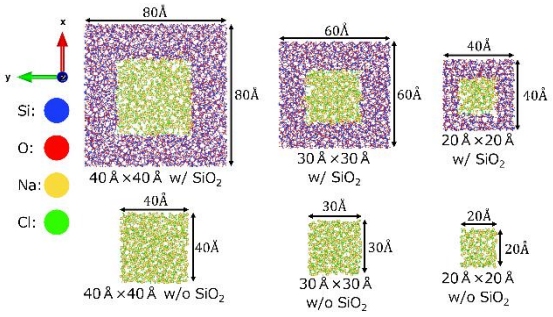

Fig. 1 Simulation models

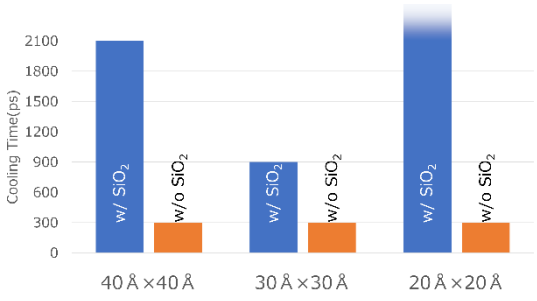

Fig. 2 Cooling time required for crystallization

© 2023年 応用物理学会