

GeSbTe のリアルな相変化シミュレーションモデルの開発

Development of a realistic simulation model for the phase change of GeSbTe

石川高専¹, 産総研², °佐野 陽之¹, 桑原 正史²

NIT Ishikawa College¹, AIST², °Haruyuki Sano¹, Masashi Kuwahara²

E-mail: h-sano@ishikawa-nct.ac.jp

Ge₂Sb₂Te₅ (GST) は、相変化メモリ (PCM)、光メモリ、光スイッチなどの動作のキーとなる相変化材料である。実際のデバイス中では、GST は数 10～数 100ns の時間スケールで相変化がおこるが、その詳細 (結晶化密度の空間分布とその時間変化) は良く分かっておらず、物理シミュレーションによる解析 (見える化) が強く求められている。本研究では、実デバイスの動作シミュレーションに使えるリアルな GST 相変化シミュレーションモデルの開発を行った。

GST の相状態は、結晶密度ベクトル $\overline{CD}$ が「結晶核生成」「結晶成長」「融解によるアモルファス化」の 3 つの機構によって時間変化する (Woods^[1] の多結晶モデル) として表現した。GST のリアルな物性を表すため、結晶化熱と融解熱を考慮し、熱伝導、電気伝導、誘電率などの物性変化を温度と結晶化度などの関数として考慮した。また、相変化の重要因子である「結晶核生成確率 Pn」と「結晶成長速度 Vg」について、Burr^[2] と Peng^[3] の 2 つのモデルを用いた計算を行い比較検討した。

GST 相変化モデルの妥当性を確認するため、GST 薄膜のレーザー光加熱による結晶化実験^[3] のマルチフィジックス・シミュレーション (光伝搬、熱伝導、GST 相変化) を行った。Fig.1 は、GST 薄膜にレーザー光照射したときの反射率変化である。紫実線は実験結果^[3] であり、400ns まではアモルファス状態のため反射率は小さいが、その後急速に結晶化が進み反射率が増加している。青破線と赤破線は、それぞれ Pn と Vg に Burr と Peng のモデルを用いたときの計算結果である。Burr モデルの計算では実験に比べ反射率増加が早く起こっているが、Peng モデルの計算は実験をばば再現している。計算結果の解析から、400ns で GST 中心温度は 400℃に達して結晶核生成が起こり始め、その後、中心付近から周囲に向かって結晶成長が進むことが分かった。これらの結果より、Peng の Pn と Vg を用いた GST 相変化モデルは実デバイスの相変化シミュレーションに使えることが確認できた。

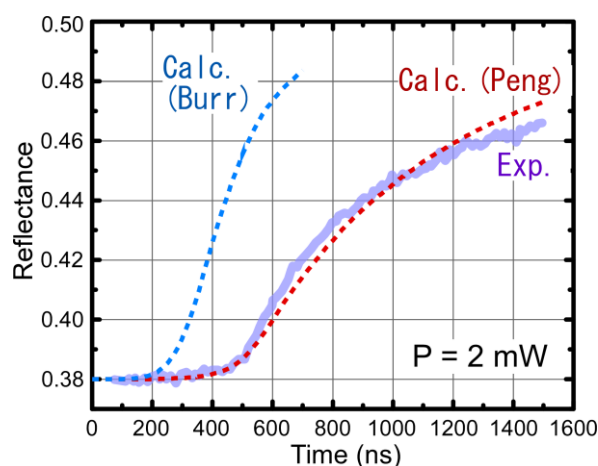


Fig. 1: Reflectance of GST thin film as a function of laser light irradiation time. The solid line shows experimental data measured by Peng. et al. ^[3] The red and blue dashed lines show the results calculated by different models.

- [1] Z. Woods et al., IEEE Trans. Electron Devices 64, 4472 (2017).
- [2] G. W. Burr et al., J. Appl. Phys. 111, 104308 (2012).
- [3] C. Peng et al., J. Appl. Phys. 82, 4183 (1997).