

令和 6 年 6 月 5 日現在

機関番号：53301

研究種目：基盤研究(C)（一般）

研究期間：2020～2023

課題番号：20K05373

研究課題名（和文）相変化光スイッチの相変化状態制御の理論解析と最適なデバイス構造・材料の探索

研究課題名（英文）Theoretical analysis of phase-change control in phase-change optical switches and research for optimal device structures and materials

研究代表者

佐野 陽之（Sano, Haruyuki）

石川工業高等専門学校・一般教育科・教授

研究者番号：80250843

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 3,400,000円

研究成果の概要（和文）：光スイッチ動作に関わる全ての物理現象を考慮したリアルなシミュレーションシステムを開発した。シミュレーションを通して、電圧パルスの印加によって相変化材料であるGSTの相状態を制御し、光スイッチがOn-Off動作することを示せた。また、GST薄膜の不均一加熱がGSTのアモルファス化を阻害し、光スイッチの消光比性能を劣化させることを明らかにした。この原因を解析し、温度むらが小さくなる新しいデバイス構造の提案を行った。光吸収の小さい相変化材料であるMnTeの光学応答の第一原理計算を行った。相から相への相転移による光学応答変化の仕組みを明らかにした。

研究成果の学術的意義や社会的意義

光通信ネットワークにおける重要なデバイスである光スイッチの高性能化のため、相変化光スイッチの研究開発が進められている。本研究で開発した相変化光スイッチシミュレーションシステムは、スイッチ動作に関わるあらゆる現象をリアルに再現し可視化できるため、試作デバイスの動作解析を行うことによって、問題点の発見と改善策の提案を行うことができた。これらの成果は相変化光スイッチの実用化に大きく貢献すると考えられる。また、本研究で開発した要素技術（相変化のモデル化と連成物理シミュレーション）は、相変化メモリや光記録などの他の研究分野にも応用可能である。

研究成果の概要（英文）：We constructed a simulation system that takes into account all physical phenomena associated with the operation of optical switches. Our simulations demonstrated that the optical switch can perform on-off operations by controlling the phase state of the phase-change material GST through the application of a pulse voltage. It was found that non-uniform heating of the GST thin film prevents the amorphization of GST, resulting in a decrease in the extinction ratio performance of the optical switch. Our analysis revealed the cause of this and we proposed a new device structure that reduces the temperature difference within the GST film. We performed first-principles calculations of the optical response of MnTe, a phase-change material with low optical absorption. The mechanism behind the change in optical response caused by the phase transition from the alpha phase to the beta phase was clarified.

研究分野：光物性、物理シミュレーション

キーワード：光スイッチ 相変化 シミュレーション 第一原理計算

様式 C - 19、F - 19 - 1、Z - 19 (共通)

1. 研究開始当初の背景

(1) 相変化光スイッチ技術の原理と特徴

データトラフィックの増大が続いている現在において、光通信ネットワーク・ノードで使われている光スイッチは非常に重要な装置となっており、「高速動作、低消費電力、装置の小型化」といった高性能化が強く求められている。これまで、様々な方法による光スイッチが考案されてきているが、近年、有望な技術として相変化光スイッチが開発されてきた。この相変化光スイッチは、Si 導波路の上に相変化材料薄膜とヒーター薄膜を乗せたシンプルな構造をしている。ヒーター薄膜へのパルス電圧印加によって温度を制御し、相変化材料をアモルファスまたは結晶にすると、両者の複素屈折率の違いによって導波路を通過する光の on-off 制御が可能となる。この動作原理により、「スイッチ切り替えが高速 (1 μ 秒以下)」、「スイッチ切り替えの時のみ電力が必要なので装置運用の電力消費が小さい」、「メカニカルな機構が無いので装置が小型になる」という特徴・利点を持つ。

(2) 相変化光スイッチの研究の問題点と解決に必要なこと

相変化のリアルなモデリングの必要性

実際に作成された相変化光スイッチが当初予想された消光比 (on と off の光強度の比) 性能を示さないことがあり、原因として相変化材料のアモルファス状態と結晶状態の制御がうまくいっていないと考えられている。デバイス動作中の相変化材料の状態を実験的に測定することが困難なため、相変化材料の状態 (アモルファスと結晶の存在比の空間分布) が分からず、この問題の詳細は不明である。このため、相変化をリアルにモデル化した光スイッチ・デバイス全体の物理シミュレーションによる、「光スイッチ動作の見える化」と「最適なデバイス構造の提案」が強く求められている。

光吸収の小さい相変化材料の探索

相変化材料として用いられている GST ($\text{Ge}_2\text{Sb}_2\text{Te}_5$) は、波長 1.5 μm における光吸収が大きい。そのため、光スイッチとして用いた場合に挿入損失が大きい。現在、GST に N や Se をドープすることによって光吸収を小さくする研究が行われているが、光吸収が小さくなるメカニズムの詳細は不明である。このため、第一原理計算による、「光吸収減少のメカニズム解明」と「光吸収の小さい相変化材料を得るため指針」が必要となっている。

2. 研究の目的

本研究では、高性能な相変化光スイッチを開発するため、光スイッチの動作の完全な理解と低損失な相変化材料の提案を行うことを目的とする。そのため、以下の研究項目を実施する。

(1) 相変化のモデル化と光スイッチの総合的な物理シミュレーションシステムの開発

(2) 光スイッチの最適なデバイス構造 (デザイン) の提案

(3) 第一原理計算による光吸収の小さい相変化材料の探索

3. 研究の方法

(1) 相変化のモデル化と光スイッチの総合的な物理シミュレーションシステムの開発

有限要素法に基づく連成物理シミュレーションソフトウェア COMSOL を用いて開発を行う。実際の光スイッチの構造をリアルに再現した 3 次元モデルを作成し、光スイッチ動作に関わる全ての物理現象 (パルス電圧によるジュール熱の発生、熱伝導、相変化材料 GST の相変化、導波路内の光の伝播) を考慮した計算が出来るようにする。特に、相変化材料 GST の相変化は、液体、固体アモルファス、固体結晶の全ての相を考慮し、相間の遷移に伴う潜熱 (融解熱や結晶化熱) の効果や熱力学的な遷移確率等をモデル化する。シミュレーションで用いるパラメーター (様々な材料の電気伝導率、熱伝導率、比熱など) の設定は計算結果の妥当性を大きく左右する。そのため、信頼できる文献データが無い場合は、本研究で実験的に測定し、その値を使う。

(2) 光スイッチの最適なデバイス構造の提案

項目 (1) で開発したシミュレーターを用いて、これまでに作成されてきた光スイッチの動作の理論解析を行い、相変化材料の相分布から消光比が悪くなる原因を明らかにする。また、ヒーター (ITO) 層や相変化材料 GST 層などの形状・大きさ・配置を様々に変えたシミュレーションを行い、パルス電圧印加による相制御が容易で、最も消光比が高くなるデバイス構造 (デザイン) を提案する。

(3) 第一原理計算による光吸収の小さい相変化材料の探索

本研究では、様々な物性計算で実績のある第一原理計算ソフトウェア VASP を使う。当初、実験的に光吸収の減少が確認されている「Se ドープ GST」を対象にした電子状態と光学応答の計算を行い、光吸収減少のメカニズムを明らかにする予定であった。しかし、「磁性半導体である MnTe が 400 以下の温度領域で異なる結晶構造への相変態が高速に起こり、波長 1000nm 以上で光吸収が非常に小さい」という光スイッチ用の材料として優れた特徴を持つことが分かったため、MnTe の電子状態と光学応答の第一原理計算を行い、相変化による光学応答変化のメカニズムを明らかにする研究を行うことにした。計算手法 (近似) として、MnTe の第一原理計算で良く用いられてきた GGA+U 法、比較的大きな計算コストが必要であるが正確なバンドギャップ値が期

待できる HSE06 法の 2 つを使用する。MnTe の 2 つの結晶相である 相と 相の電子状態、バンド図、光学誘電率などを計算する。

4. 研究成果

(1) 相変化のモデル化と光スイッチの総合的な物理シミュレーションシステムの開発

GST の相変化シミュレーションモデルの作成

相変化材料 GST を用いた光スイッチ動作を完全に理解するため、光スイッチ動作の時間スケール(数 10 ~ 数 100ns)での実験結果を正しく再現できる「リアルな GST 相変化シミュレーションモデル」を作成した。GST の相状態は、結晶密度ベクトルが「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 P_n 」と「結晶成長速度 V_g 」について、Burr と Peng の 2 つのモデルを用いた計算を行い比較検討した。GST 薄膜のレーザー光加熱による結晶化実験(文献データ)の連成物理シミュレーション(光伝搬、熱伝導、GST 相変化)を行ったところ、Burr モデルでは実験データに比べて著しく結晶化が早く起こるのに対し、Peng モデルはほぼ実験データを再現した(図 1)。これにより、Peng の P_n と V_g 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。また、「GST の過冷却的な振る舞いの考慮」と「シミュレーションにおいて安定に結晶成長させるための制御項の調整」の改良を行うことによって、レーザー光加熱による結晶化実験のシミュレーション結果を改善することができた。本研究で開発した GST の相変化シミュレーションモデルは、GST の相変化を利用した様々なデバイスのシミュレーションに使うことが可能である。

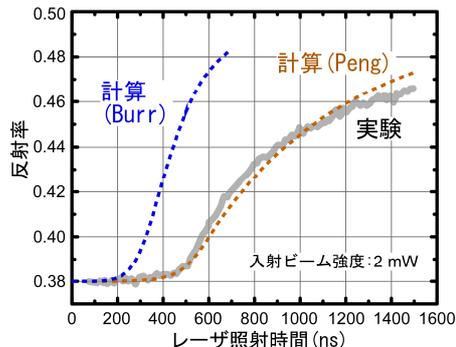


図 1: GST 薄膜の反射率の時間変化

光スイッチ全体の総合的な物理シミュレーションシステムの作成

相変化光スイッチのモデル構造を図 2 に示す。本研究で開発したシミュレーションシステムは、「ジュール加熱による GST の相変化シミュレーション」と「Si 導波路の光伝搬シミュレーション」の 2 つの部分によって構成されている。

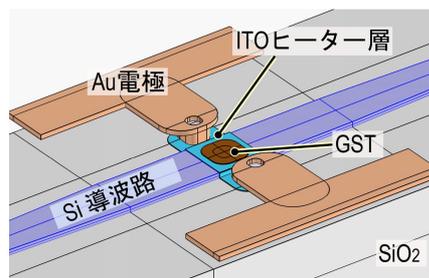


図 2: 相変化光スイッチのモデル構造

後者の光スイッチの光伝搬に関するシミュレーション方法の検討を行った。光スイッチの構造は、波長 $1.55 \mu\text{m}$ に対して数 10 ~ 100 倍程度の大きさであるため、電磁波の伝搬・散乱・吸収現象を厳密に計算することは、コンピューターの計算コスト(メモリ・計算時間)の観点から極めて困難である。そのため、散乱・吸収の起こる GST 付近では厳密な電磁波伝搬計算を行い、それ以外の領域ではほぼ単純な光伝搬なので「ビームエンベロープ法」を用いるハイブリッドな光伝搬シミュレーションシステムを開発した。大幅に計算コストを減らすことができ、現実的な計算コストで大規模な光スイッチ構造のシミュレーションが可能であることを確認した。

(2) 現行の光スイッチの動作解析と最適なデバイス構造(デザイン)の提案

まず、研究分担者等が試作した光スイッチの構造(図 1)を元にしたシミュレーションを行った。ITO ヒーター層に 2V-520ns のパルス電圧を印加すると、図 3 に示すように Au 電極に近い方から結晶化が進行し、約 500ns で GST 全体が結晶化することがシミュレーションによって確認できた。また、4V-90ns のパルス電圧を印加すると、融解後の急冷によって GST 層が概ねアモルファス化するが、GST 層の上側部分が再結晶化することが分かった(図 4)。アモルファス化のシミュレーションの詳細な解析から、GST 層の過熱が不均一であるため、急冷中に再結晶化が顕著に発生し、また、GST 層及び ITO 層に熱的損傷が生じる可能性があることが分かった。

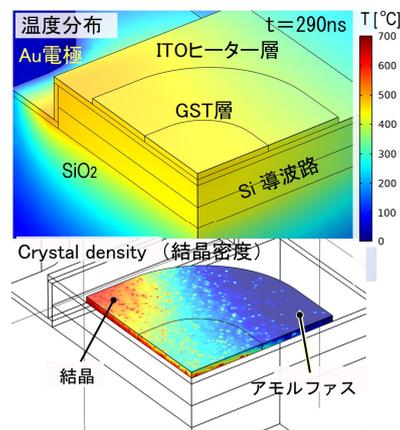


図 3: GST 結晶化の過程

この急冷中の再結晶化は光スイッチの消光比性能の劣化を引き起こす原因となる。そこで、不均一加熱の原因を調べるため、GST 加熱時の電流・電位分布を解析したところ、GST の乗っていないITO (ヒーター層) 領域の相対的な電気抵抗が大きくなり、その部分で発生するジュール熱が大きくなるのが不均一加熱の原因であることが分かった。この結果をもとに、GST 内の温度差を小さくするための検討を行い、「GST 膜の乗っていないITO 領域の膜厚を2倍にしたモデル構造」を提案した。このモデル構造のシミュレーションでは、GST 内の温度差が約半分になり、冷却後の再結晶化が大きく減少し、消光比性能が改善する結果を得た。

相変化光スイッチの最適なデバイス構造の探索のため、ITO 層と GST 薄膜の上下配置を入れ替えた新しい構造モデルのシミュレーションを実施した。スイッチ動作が従来モデルより少し早くなるが、光スイッチの消光比性能が劣化することが分かった。

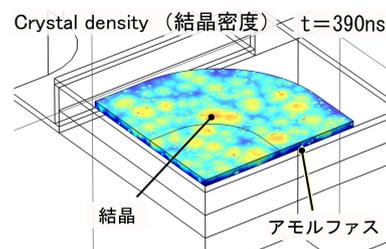


図4: アモルファス化過程後の GST 再結晶化の様子

(3) 第一原理計算による光吸収の小さい相変化材料の探索

計算手法(近似)の違いの評価を行った結果、GGA-U 近似を用いた場合、バンドギャップが実験値より30%程度小さくなったが、HSE06 近似を用いた場合、バンドギャップは実験値とほぼ同じ値になった。-MnTe と β -MnTe の屈折率虚部の計算結果と研究分担者等によって測定された実験結果を図5に示す。計算結果は概ね実験を再現した。屈折率虚部 k は、光吸収を表しており、

相から 相への相転移によって光吸収の立ち上がりが高エネルギー側に約1 eV シフトすることが分かった。

この変化は、結晶構造の変化によるものであり次のように解釈できる。Mn-Te の最近接原子間距離は、 α 相が2.97 Å、 β 相が2.78 Åであり、 β 相の方が短い。このため、 β 相の方が最近接原子間の相互作用が大きくなり、バンドギャップが増加することになる。

α 相への相転移でバンドギャップが増加すると、占有状態から非占有状態への光学遷移エネルギーが大きくなるため、光吸収の立ち上がりが、高エネルギー側に移動することになる。

光通信で用いられる波長 1.55 μm における複素屈折率の計算結果 (HSE06 法) は、 $3.09 + 0.01i$ (α 相) と $2.37 + 0.01i$ (β 相) であり、虚部の値と実部の変化の大きさから光吸収が極めて小さい相変化光スイッチが実現可能であることが分かった。

MnTe の光学応答計算とは別に、MnTe の α - β 相間の遷移過程における第一原理計算を行い、遷移過程におけるエネルギー障壁の値を得ることができた。これらの計算を基に、今後、MnTe の相変化シミュレーションモデルの開発を進めていく予定である。

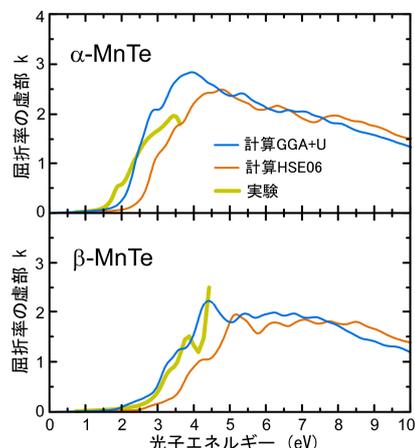


図5: α 相及び β 相 MnTe 結晶の屈折率虚部

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計0件

〔学会発表〕 計5件（うち招待講演 0件 / うち国際学会 2件）

1. 発表者名 佐野陽之、桑原正史
2. 発表標題 相変化材料を用いた光スイッチ動作のシミュレーション解析
3. 学会等名 応用物理学会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 H. Sano, M. Kuwahara
2. 発表標題 Realistic Simulation Model of Ge ₂ Sb ₂ Te ₅ Phase Change Alloys for Optical Device
3. 学会等名 International Symposium on Imaging, Sensing, and Optical Memory 2021 (ISOM '21) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 佐野陽之、桑原正史
2. 発表標題 相変化材料を用いた光スイッチ動作の連成物理シミュレーション
3. 学会等名 応用物理学会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 佐野陽之、桑原正史
2. 発表標題 GeSbTeのリアルな相変化シミュレーションモデルの開発
3. 学会等名 応用物理学会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 H. Sano, M. Kuwahara
2. 発表標題 Simulation Analysis of Optical Gate Switch Operation Using a Chalcogenide Phase-change Material
3. 学会等名 International Symposium on Imaging, Sensing, and Optical Memory 2023 (ISOM '23) (国際学会)
4. 発表年 2023年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

国立高専研究情報ポータル https://research.kosen-k.go.jp/plugin/rmaps/details/11/122/read0142223

6. 研究組織

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
研究分担者	桑原 正史 (Kuwahara Masashi) (60356954)	国立研究開発法人産業技術総合研究所・エレクトロニクス・製造領域・上級主任研究員 (82626)	

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
研究協力者	津田 裕之 (Tsuda Hiroyuki)		

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8 . 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関
---------	---------