

共晶系材料における熱伝導の数値計算

石川県立大学 教養教育センター 稲葉 宏和

Abstract

To investigate crystallization in the eutectic materials, I calculated two-dimensional heat conduction equation. The two-dimensional heat conduction equation is numerically computed using the alternating direction implicit method (ADI method). The heat transfer in the eutectic materials is discussed.

Keywords: numerical calculation; ADI method; heat conduction equation; eutectic materials; phase change

1. はじめに

カルコゲン材料は加熱・冷却により非晶質から結晶構造もしくは結晶構造から非晶質への相変化を行うことが知られている。非晶質と結晶での光学的もしくは電気的特性の違いが相変化メモリーに利用されている。

相変化は、ストレージとして CD-RW、DVD-RW、DVD-RAM、Blu-ray disc などに利用されている。また、メモリーとして PCM (Phase Change Memory)、OUM (Ovonic Unified Memory) に利用されている。

相変化メモリーに利用される材料として、擬合金系の $\text{Ge}_2\text{Sb}_2\text{Te}_5$ 構造と共晶系の AgInSbTe 、 $\text{Ge}(\text{Sb}_7\text{Te}_3)+\text{Sb}$ 構造などが知られている。

擬合金系材料の結晶化は、結晶核生成とその結晶核からの結晶成長により行われる。非晶質径が小さくなっても結晶化時間は同じである。

それに対して、共晶系材料は結晶層と非晶質層との界面から結晶化が始まり、中心まで成長したとき結晶化が終わる。結晶化時間は非晶質径が小さくなると短くなる。そのため、共晶系材料の方がメモリーの高速化に有利であると考えられる (奥田, 2004)。

これまで、結晶化のメカニズムを検討するため共晶系材料での熱伝導の計算を行ってきた。特に、実験では検討困難な結晶化初期 ($\sim 1\mu\text{s}$) のメカニズムを 2 次元熱伝導方程式の数値計算により解析した (Okuda

et al., 2004, 2005)。そこでは注入エネルギーを円形の分布とし対称性を導入した。それにより 2 次元の計算を動径方向と角度方向に分離し、1 次元に還元して計算の簡略化を図った。

本研究では、2 次元熱伝導方程式を交互方向陰解法 (ADI 法) により計算する。注入エネルギーは対称形でない長方形とし、結晶化初期の加熱・冷却における 2 次元の熱伝導を計算する。潜熱の影響については今回の計算では省略する。

2. 熱伝導計算

潜熱を考慮しない共晶系材料における 2 次元の熱伝導の基本方程式は、

$$\rho C_p \frac{\partial T(x, y, t)}{\partial t} = \kappa \left[\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right] T(x, y, t) + J(x, y, t) - \Gamma [T(x, y, t) - T_0] \quad \dots (1)$$

である (Saarloos and Weeks, 1983; Kurtze et al., 1984)。ここで、 $T(x, y, t)$ は、点 (x, y) 時間 t での温度である。 κ は熱伝導係数、 $J(x, y, t)$ は、点 (x, y) 時間 t での注入エネルギー、 ρC_p は単位体積あたりの比熱、 $\Gamma [T(x, y, t) - T_0]$ は基板温度 T_0 での熱損失である。

注入エネルギーはレーザーや電流注入により供給される。注入エネルギーは一定時間注入され、その後注

入が停止されるとする。この場合の温度変化を計算する。初期条件を $T(x,y,0)=T_0$ とする。

(1) 式の偏微分方程式は放物型である。(1) 式を放物型方程式の陰解法である ADI 法 (alternating direction implicit method, 交互方向陰解法) (山崎, 1993) を用いて計算する。

ADI 法に従い、以下の手順で計算を行う。

(1) 空間変数と時間変数を差分化する。

x 方向の空間メッシュを dx とし、 $x = i*dx$ 、($i = 0,1,2,\dots,M$) とし、 y 方向の空間メッシュを dy とし、 $y = j*dy$ 、($j = 0,1,2,\dots,N$) とする。時間メッシュは dt とし、 $t = k*dt$ 、($k = 0,1,2,\dots$) とする。これにより、温度 $T(x,y,t)$ および注入エネルギー $J(x,y,t)$ を、 $T(x,y,t) \rightarrow T_{ijk}$ 、 $J(x,y,t) \rightarrow J_{ijk}$ と差分化する。

(2) 時間微分と空間微分を差分化する。

時間の 1 階微分を

$$\frac{\partial T(x,y,t)}{\partial t} \rightarrow \frac{T_{i,j,k+1} - T_{i,j,k}}{dt} \quad \dots (2)$$

と差分化し、 x 方向空間の 2 階微分を

$$\frac{\partial^2 T(x,y,t)}{\partial x^2} \rightarrow \frac{T_{i+1,j,k} - 2T_{i,j,k} + T_{i-1,j,k}}{dx^2} \quad \dots (3)$$

y 方向空間の 2 階微分を

$$\frac{\partial^2 T(x,y,t)}{\partial y^2} \rightarrow \frac{T_{i,j+1,k} - 2T_{i,j,k} + T_{i,j-1,k}}{dy^2} \quad \dots (4)$$

と差分化する。

差分化後の (1) 式は、

$$\begin{aligned} & \rho C_p \frac{T_{i,j,k+1} - T_{i,j,k}}{dt} \\ & = \kappa \left(\frac{T_{i+1,j,k} - 2T_{i,j,k} + T_{i-1,j,k}}{dx^2} + \frac{T_{i,j+1,k} - 2T_{i,j,k} + T_{i,j-1,k}}{dy^2} \right) \\ & \quad + J_{i,j,k} - \Gamma(T_{i,j,k} - T_0) \end{aligned} \quad \dots (5)$$

となる。

初期条件を、 $t = 0$ の時の初期温度 $T_{i,j,0}$ ($i = 1,2,3,$

\dots, M)、($j = 1,2,3,\dots, N$) と定め、注入エネルギー分布より、注入エネルギー $J_{i,j,0}$ を定める。

(3) 時間発展

時間発展は、次に示す (a)、(b) の 2 段階 ($k \rightarrow k+1 \rightarrow k+2$) で行う。

(a) $k \rightarrow k+1$

$$\alpha = \rho C_p \quad , \quad \beta = \frac{1}{\kappa} \quad , \quad A_x = -(dx)^2 \left[\frac{\alpha}{dt} + \frac{2}{(dx)^2} \right] \quad ,$$

$$B_x = -\frac{(dx)^2}{(dy)^2} \quad , \quad C_x = -(dx)^2 \left[\frac{\alpha}{dt} - \frac{2}{(dy)^2} \right] \quad , \quad D_x = -(dx)^2 \beta \quad ,$$

$$U_{i,j,k} = B_x T_{i,j-1,k} + C_x T_{i,j,k} + B_x T_{i,j+1,k} + D_x J_{i,j,k}$$

とすると、(5) 式は、三重対角行列方程式

$$T_{i-1,j,k+1} + A_x T_{i,j,k+1} + T_{i+1,j,k+1} = U_{i,j,k} \quad \dots (6)$$

となる。(6) 式を解くことにより、時間 (k) の温度 T_{ijk} より、1 ステップ進んだ時間 ($k+1$) の $T_{ij,k+1}$ を得る。さらに、境界条件より、 $T_{0j,k+1}$ 、 $T_{Mj,k+1}$ 、 $T_{i0,k+1}$ 、 $T_{iN,k+1}$ を求める。

(b) $k+1 \rightarrow k+2$

同様に、

$$A_y = -(dy)^2 \left[\frac{\alpha}{dt} + \frac{2}{(dy)^2} \right] \quad , \quad B_y = -\frac{(dy)^2}{(dx)^2} \quad ,$$

$$C_y = -(dy)^2 \left[\frac{\alpha}{dt} - \frac{2}{(dx)^2} \right] \quad , \quad D_y = -(dy)^2 \beta \quad ,$$

$$W_{i,j,k+1} = B_y T_{i-1,j,k+1} + C_y T_{i,j,k+1} + B_y T_{i+1,j,k+1} + D_y J_{i,j,k+1}$$

とすると、(5) 式は、三重対角行列方程式

$$T_{i,j-1,k+2} + A_y T_{i,j,k+2} + T_{i,j+1,k+2} = W_{i,j,k+1} \quad \dots (7)$$

となる。(7) 式を解くことにより、時間 ($k+1$) の温度 $T_{i,j,k+1}$ より、1 ステップ進んだ時間 ($k+2$) の $T_{i,j,k+2}$ を得る。さらに、境界条件より、 $T_{0j,k+2}$ 、 $T_{Mj,k+2}$ 、 $T_{i0,k+2}$ 、 $T_{iN,k+2}$ を求める。

(a)、(b) を順次繰り返すことで、(1) 式の時間発展が計算できる。

3. 数値計算結果

注入エネルギー分布が長方形の場合の計算結果を示す。注入エネルギー分布は対称性のない長方形である。長方形の裾部分はガウス型で減少しているとする。

図1に、注入エネルギーの概形を示す。長方形の長辺 a と短辺 b の比 b/a が 0.75 の場合である。長辺 $a = 50\mu\text{m}$ ($50 \times 10^{-6}\text{m}$)、短辺 $b = 37.5\mu\text{m}$ ($37.5 \times 10^{-6}\text{m}$) とする。

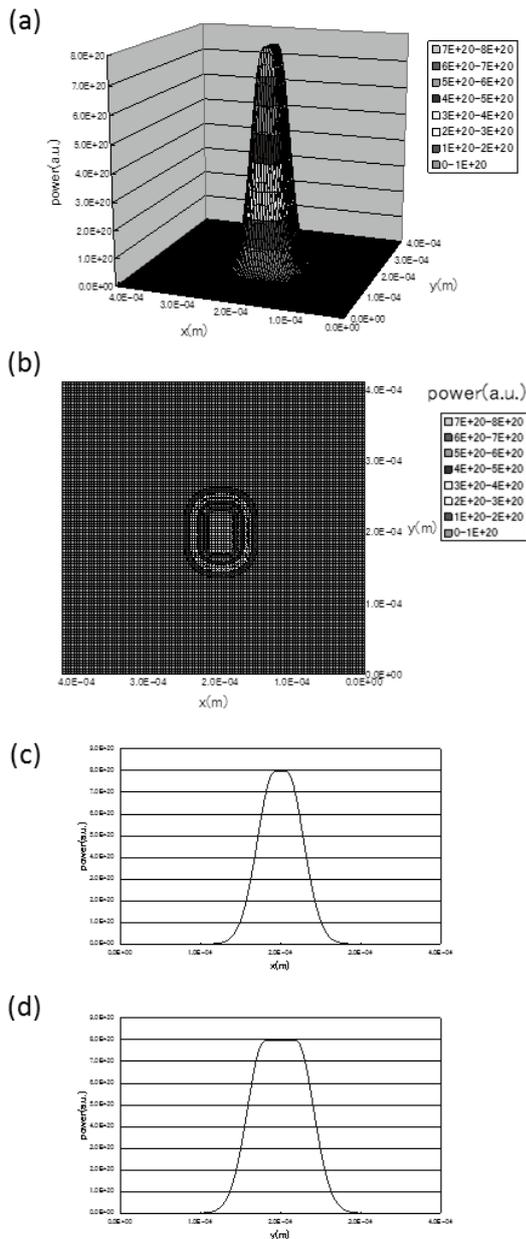


図1. 注入エネルギー分布。(a) 鳥瞰図、(b) 平面図、(c) x 方向 (短辺方向) から見た注入エネルギー分布 (断面図) (d) y 方向 (長辺方向) から見た注入エネルギー分布 (断面図)

図1 (a) は鳥瞰図、(b) は平面図である。(c) は x 方向 (短辺方向) から見た、(d) は y 方向 (長辺方向) から見た断面図である。

エネルギーの注入を 500ns ($500 \times 10^{-9}\text{s}$) 間行い、停止後の温度変化を計算する。

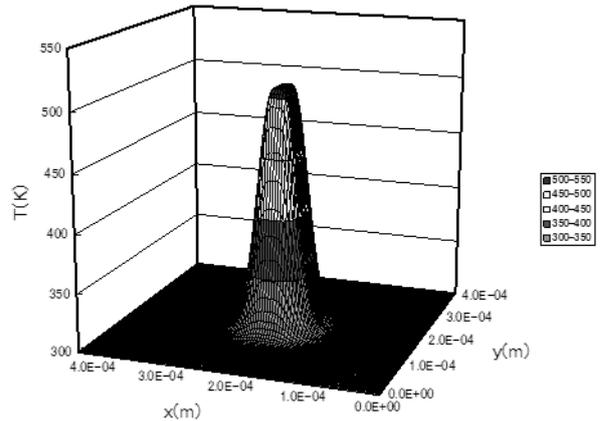


図2. 温度プロファイルの概形 (エネルギー注入開始から 500ns 後 (注入停止時))

図2に、エネルギー注入開始から 500ns 後 (注入停止時) の温度プロファイルの概形を示す。図3に、800ns 後 (注入エネルギーの停止後 300ns 経過) の温度プロファイルの概形を示す。全体の形を維持しながら、温度が低下している。拡散により冷却が行われていることがわかる。

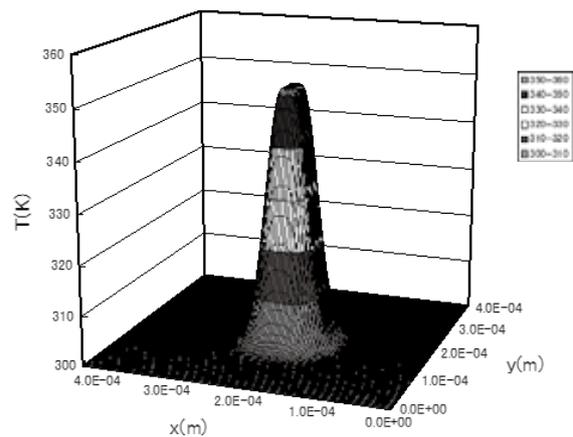


図3. 温度プロファイルの概形 (800ns の時、すなわち注入エネルギーを止めて 300ns 後)

図4に、温度プロファイルの概形の y 方向の中心 ($y = 2.0 \times 10^{-4}\text{m}$) の断面 (x 方向) の温度分布の時間変化

を示す。エネルギーが注入されている間温度が急激に上昇し、停止後温度が急激に減少していることがわかる。

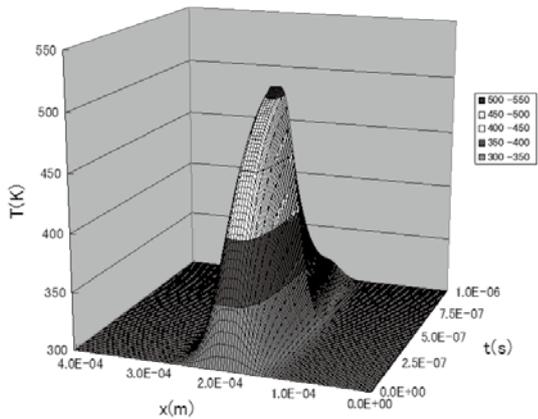


図4. 温度の時間変化 ($y = 2.0 \times 10^{-4} \text{m}$)

温度変化を詳しく見るため、図2に示す最高温度の分布の中心部 ($x = 2.0 \times 10^{-4} \text{m}$) と周辺部として、傾斜部 ($x = 1.7 \times 10^{-4} \text{m}$)、裾部 ($x = 1.5 \times 10^{-4} \text{m}$) の温度に注目する。図5に中心部 ($x = 2.0 \times 10^{-4} \text{m}$) と傾斜部 ($x = 1.7 \times 10^{-4} \text{m}$)、裾部 ($x = 1.5 \times 10^{-4} \text{m}$) の温度の時間変化を示す。

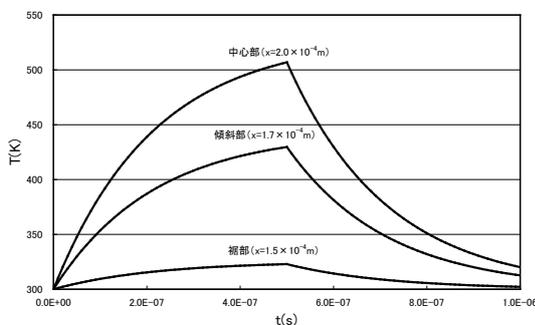


図5. 中心部と周辺部の温度の時間変化

温度はエネルギーが注入している間上昇している。温度上昇は、基板温度との温度差が大きくなるに従い拡散が大きくなるため上昇の割合が小さくなる。エネルギーの注入を停止した後、拡散により急速に温度が降下し、冷却する。降下する割合は基板温度に近づくに従い小さくなるという拡散による結果が計算できた。

4. おわりに

相変化メモリー材料として有望である共晶系材料の

結晶化初期の現象を検討するため、2次元熱伝導方程式の数値計算を行った。熱伝導方程式を放物型方程式の陰解法であるADI法(交互方向陰解法)を用いた。その結果、注入エネルギーによる温度上昇(加熱)は一様でなく、拡散の影響が見られた。また、エネルギーの注入停止後急速に温度が低下する。温度低下(冷却)も一様ではなく、温度と基板温度との差が小さくなるに従い低下の割合が小さくなるという拡散による結果が計算できた。

5. 謝辞

本研究全体を通して指導・助言いただいた奥田技術事務所奥田昌宏所長(大阪府立大学名誉教授)に感謝いたします。

参考文献

- Douglas A. Kurtze, Wim van Saarloos, John D. Weeks. 1984. Front propagation in self-sustained and laser-driven explosive crystal growth: Stability analysis and morphological aspects. *Physical Review B* 30(3): 1398-1415.
- 奥田昌宏(監修). 2004. *次世代光記録材料*. シーエムシー出版.
- Masahiro Okuda, Hirokazu Inaba, Shouji Usuda. 2004. Explosive Crystallization in Eutectic Materials of Phase Change Optical Memory. *Material Research Society Symposium Proceedings* 803: 225-232.
- Masahiro Okuda, Hirokazu Inaba, Shouji Usuda. 2005. Photo- and current-induced crystallization of optical and electrical memory in phase change materials. *Proceedings of SPIE* 5966: 596606.
- Wim van Saarloos, John D. Weeks. 1983. Surface Undulations in Explosive Crystallization: A Thermal Instability. *Physical Review Letters* 51(12): 1046-1049.
- 山崎郭滋. 1993. *偏微分方程式の数値解法入門*. 森北出版.