

УДК539.216.2

Краткое сообщение

Моделирование ячеек адаптивного фазосдвигающего фильтра с оптическим управлением на основе многослойных структур фазоизменяемых материалов

А.В. Киселев, В.А. Михалевский, А.А. Невзоров, А.А. Бурцев, В.В. Ионин,
Н.Н. Елисеев, А.А. Лотин

ФГБУ «Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт»
123182, Россия, Москва, пл. Академика Курчатова, 1
murrkiss2009@yandex.ru

DOI: 10.26456/pcascnn/2024.16.651

Аннотация: В статье представлены результаты моделирования исследований фазового сдвига проходящего оптического пучка, обусловленного формированием слоистой структуры в элементарной управляемой ячейке из фазоизменяемого материала $Ge_2Sb_2Te_5$, подвергнутой управляющему воздействию импульсного лазерного излучения короткой и ультракороткой длительности. На основе термокинетического подхода анализируется кристаллизация тонкой пленки $Ge_2Sb_2Te_5$, учитываются кинетические свойства материала, энергия и длительность воздействующего лазерного излучения, аморфизация верхних слоев пленки при быстром нагреве и зависимость кинетических свойств от температуры. Для каждого воздействующего импульсного излучения построены графики толщины кристаллического слоя в материале пленки. На основе данных о расположении кристаллического слоя рассчитывается фазовый сдвиг проходящего оптического излучения. На основе данных моделирования исследованной элементарной ячейки можно построить фазовый вращатель для преобразования оптического пучка произвольной апертуры. Предложенный метод управления фронтом оптического пучка за счет изменения структурного состояния тонкой пленки может оказаться весьма перспективным, если требуется точная и быстрая перестройка оптической фазовой прозрачности.

Ключевые слова: фазовая модуляция, оптический фильтр, халькогениды, фазоизменяемые материалы, тонкие пленки, кристаллизация.

1. Введение

В последние годы наблюдается взрывной рост применения различных фазоизменяемых материалов (ФИМ) в сфере оптоэлектроники, фотоники, оптического хранения и обработки информации [1-3]. Их использование в энергонезависимых запоминающих устройствах впервые продемонстрировано более 40 лет назад, и продолжает демонстрировать неиссякаемый интерес, поскольку они предлагают возможную замену обычной флэш-памяти на кремниевой основе, используемой в настоящее время в USB-накопителях и других форматах памяти [4]. Другим важным приложением является создание архитектур устройств, отличающихся от традиционной схемы фон Неймана и позволяющих реализовать эффективные вычисления в памяти [5, 6].

Многочисленные применения ФИМ основаны на обратимом фазовом превращении халькогенидного сплава между аморфным и поликристаллическим состояниями с различными оптическими и

электрофизическими свойствами [7]. В долгосрочной перспективе открываются и демонстрируются возможности их эффективного применения для динамической модуляции света. Используя различие оптических свойств разных фаз, исследователи разработали настраиваемые модуляторы света на основе материала $Ge_2Sb_2Te_3$ (*GST*), оптические ограничители и поляризационные отражатели [8, 9]. Структуры на основе ФИМ продемонстрировали настраиваемое сингулярное поведение фазы световой волны в точке темноты при переходе слоя *GST* из аморфной в кристаллическую фазу [10]. Данный эффект лежит в основе таких явлений, как эффект Ааронова – Бома и фаза Бери. Соответственно, необходимо комплексное исследование управление фазой отраженного и проходящего света при переключении ячейки ФИМ.

Для отладки и оптимизации устройств на основе ФИМ необходимо иметь достоверную модель, описывающую влияние управляющего воздействия на состояние и динамику свойств таких устройств. Для эффективного описания модель должна учитывать параметры воздействия, свойства разных фазовых состояний материала, распределение энергии по поверхности и в глубине материала и кинетические свойства материала – преобладание зародышеобразования или роста кристаллитов, равномерность их распределения по размерам и по объему материала, гомогенность и гетерогенность процесса кристаллизации, зависимость кинетических свойств от температуры [1, 11-14].

Ранее авторами была разработана модель на основе термокинетического подхода с корректирующими параметрами, которые будут выбираться исходя из полученных экспериментальных данных [15]. Фазовые трансформации анализируются на основе данных просвечивающей электронной микроскопии образцов тонких пленок $Ge_2Sb_2Te_3$ (*GST*), облученных лазерными импульсами нано- и фемтосекундной длительности с разной плотностью энергии. В данной работе приводятся результаты моделирования по управлению оптической фазой проходящего пучка в тонких пленках ФИМ при разном структурном состоянии активных ячеек.

2. Методы теоретического анализа и математического моделирования

Разработанная модель кристаллизации тонкой пленки *GST* основана на рассмотрении небольшого участка пленки в приближение, что динамика кристаллизации на каждом участке пленки одинакова. Такой подход позволяет построить дискретную модель фазовых превращений в материале [15]. Элементарной ячейкой выбирается куб со стороной, сопоставимой с минимальным размером кристаллического зародыша. Далее при моделировании размер элементарной ячейки в модели

выбирался 1 нм. При решении уравнения теплопроводности неявным разностным методом учитывалось, что одна сторона параллелепипеда находится в идеальном тепловом контакте с подложкой, а на другую сторону падает лазерной излучение и она находится в контакте с воздухом. Термокинетическая теория разделяет процессы нуклеации и роста кристалла [16]. Каждой элементарной ячейке модели соответствует одно из двух состояний: 0 или положительное число. Нулевые значения соответствуют аморфному состоянию ячейки. Все ячейки с отличными от нуля значениями – кристаллические, остальные аморфны. После каждого шага по времени с расчетом динамики кристаллической фазы снова решается уравнение теплопроводности с учетом изменившихся тепловых коэффициентов. В случае, если каким-либо слоем пленки достигнута температура плавления, то все ячейки слоя приобретают значение 0 (соответствует процессу реаморфизации).

Предлагаемая модель довольно точно описывает как процесс кристаллизации, так и процесс реаморфизации, однако содержит некоторое случайные факторы (случайное расположение кристаллита в слое при нуклеации), влияние которых можно исключить простым усреднением результатов. Динамика доли кристаллической фазы, построенная по разработанной модели, сразу учитывает и перекрываемость кристаллических областей в процессе роста и разрастание кристалла по всем слоям пленки.

В качестве образца модели исследовалась тонкая пленка *GST* толщиной 100 нм и 180 нм на стеклянной подложке (SiO_2). Кристаллизация пленки проходила под воздействием двух лазерных импульсов, нано- и фемтосекундной длительности (15 нс и 45 фс). После облучения плёнка представляет собой чередующиеся слои аморфной и кристаллической фазы. Далее исследовалась фазовая модуляция проходящего через пленку излучения. Моделирование изменения оптических свойств слоистой структуры проводилось в среде Comsol MultiPhysics [17].

3. Результаты и обсуждение

В качестве управляющего параметра используется плотность энергии лазерных импульсов F . Ниже приводятся расчетные значения толщины кристаллического слоя в зависимости от плотности энергии. Можно заметить, что более низкое значение длительности импульсов обеспечивает энергетическую эффективность [15].

На основе данных о толщине кристаллического слоя и его расположения в материале пленки (верхний слой пленки претерпевает реаморфизацию) проводится расчет модуляции фазы проходящего излучения. Это позволяет построить зависимость изменения фазы в

зависимости от значения плотности энергии воздействующего излучения.

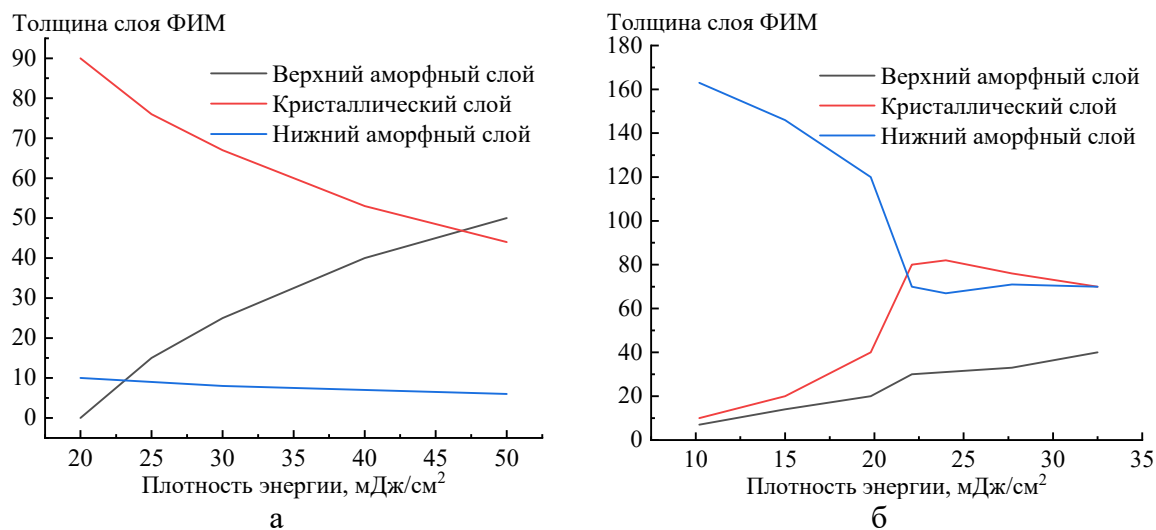


Рис. 1. Расположение кристаллического слоя в аморфной пленке *GST* при облучении двойным импульсом: а – наносекундной длительности, б – фемтосекундной длительности.

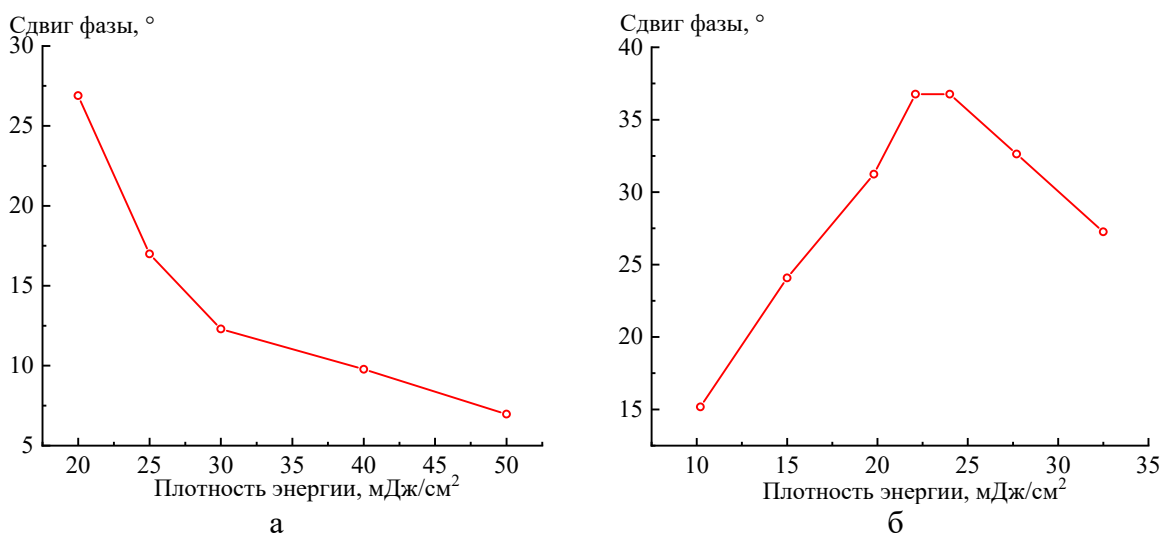


Рис. 2. Зависимость фазового сдвига, проходящего через пленку *GST*, излучения от плотности энергии управляющих лазерных импульсов: а – для наносекундных импульсов, б – для фемтосекундных импульсов.

4. Заключение

На основе данных математического моделирования были проанализированы особенности модуляции проходящего излучения при кристаллизации тонких пленок сплава *GST*. Показано, что можно подобрать оптимальную толщину и параметры воздействия лазерного излучения (энергию и длительность импульсов, диаметр пучка).

На основе исследованной элементарной ячейки можно построить эффективный фазовый вращатель для преобразования оптического пучка произвольной апертуры. Если требуется небольшая и быстрая перестройка

фазовой оптической прозрачности, то предложенный метод управления фронтом оптического пучка может оказаться весьма перспективным. Возможность изменять оптические свойства, сохраняя структурное состояние материала, позволит быстро и гибко настраивать оптические прозрачности. Преимущественными характеристиками этого устройства являются широкая полоса спектральной модуляции и способность быстро перенастраиваться под воздействием лазерного излучения.

Более широкое применение методов математического моделирования и анализа данных позволит найти более энергоэффективные устройства оптики и интегральной фотоники для модуляции, обработки и хранения информации, а также получать стабильные перестраиваемые метаповерхности. Физико-химические свойства и технологические операции получения тонких пленок халькогенидных фазоизменяемых материалов, а также методы управления действием лазерного излучения хорошо изучены и отработаны.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда по гранту № 23-29-00878.

Библиографический список:

1. Phase change materials: science and applications / ed. by S. Raoux, M. Wutting. – New York: Springer Science+Business Media, LLC, 2009. – 450 p. DOI: 10.1007/978-0-387-84874-7.
2. **Abdollahramezani, S.** Tunable nanophotonics enabled by chalcogenide phase-change materials / S. Abdollahramezani, O. Hemmatyar, H. Taghinejad et al. // Nanophotonics. – 2020. – V. 9. – I. 5. – P. 1189-1241. DOI: 10.1515/nanoph-2020-0039.
3. **Sarwat, S.G.** Materials science and engineering of phase change random access memory / S.G. Sarwat // Materials Science and Technology. – 2017. – V. 33. – I. 16. – P. 1890-1906. DOI: 10.1080/02670836.2017.1341723.
4. **Wuttig, M.** The science and technology of phase change materials / M. Wuttig, S. Raoux // Zeitschrift für anorganische und allgemeine Chemie. – 2012. – V. 638. – I. 15. – P. 2455-2465. DOI: 10.1002/zaac.201200448.
5. **Lian, C.** Photonic (computational) memories: tunable nanophotonics for data storage and computing / C. Lian, C. Vagionas, T. Alexoudi et. al. // Nanophotonics. – 2022. – V. 11. – I. 17. – P. 3823-3854. DOI: 10.1515/nanoph-2022-0089.
6. **Zhang, W.** Designing crystallization in phase-change materials for universal memory and neuro-inspired computing/ W. Zhang, R. Mazzarello, M. Wuttig, E. Ma // Nature Reviews Materials. – 2019. – V. 4. – I. 3. – P. 150-168. DOI: 10.1038/s41578-018-0076-x.
7. **Kolobov, A.V.** Chalcogenides: metastability and phase change phenomena / A.V. Kolobov, J. Tominaga. – Berlin, Heidelberg: Springer-Verlag, 2012. – XVI+284 p. DOI: 10.1007/978-3-642-28705-3.
8. **Guo, P.** A review of germanium-antimony-telluride phase change materials for non-volatile memories and optical modulators / P. Guo, A.M. Sarangan, I. Agha // Applied sciences. – 2019. – V. 9. – I. 3. – Art. № 530. – 26 p. DOI: 10.3390/app9030530.
9. **Cao, T.** Fundamentals and applications of chalcogenide phase-change material photonics / T. Cao, M. Cen // Advanced Theory and Simulations. – 2019. – V. 2. – I. 8. – Art. № 1900094. – 17 p. DOI: 10.1002/adts.201900094.
10. **Sreekanth, K.V.** New directions in thin film nanophotonics / K.V. Sreekanth, M. ElKabbash, V. Caligiuri et al. – Singapore: Springer, 2019. – X+172 p. DOI: 10.1007/978-981-13-8891-0.
11. **Zhou, G.F.** Materials aspects in phase change optical recording/ G.F. Zhou // Materials Science and Engineering: A. – 2001. – V. 304-306. – P. 73-80. DOI: 10.1016/S0921-5093(00)01448-9.
12. **Weidenhof, V.** Laser induced crystallization of amorphous Ge₂Sb₂Te₅ films / V. Weidenhof, I. Friedrich, S. Ziegler, M. Wuttig // Journal of Applied Physics. – 2001. – V. 89. – I. 6. – P. 3168-3176. DOI:

10.1063/1.1351868.

13. **Yang, I.** Effect of doped nitrogen on the crystallization behaviors of $\text{Ge}_2\text{Sb}_2\text{Te}_5$ / I. Yang, K. Do, H.J. Chang et al. // *Journal of The Electrochemical Society*. – 2010. – V. 157. – I. 4. – P. H483-H486. DOI 10.1149/1.3321759.

14. **Ashwin, P.** Fast simulation of phase-change processes in chalcogenide alloys using a Gillespie-type cellular automata approach / P. Ashwin, B.S.V. Patnaik, C.D. Wright // *Journal of Applied Physics*. – 2008. – V. 104. – I. 8. – Art. № 084901. – 8 p. DOI: 10.1063/1.2978334.

15. **Nevzorov, A.A.** Discrete thermokinetic computational model of laser-induced phase transitions in phase-changing materials / A.A. Nevzorov, V.A. Mikhalevsky, N.N. Eliseev et al. // *Applied Physics Letters*. – 2023. – V. 122. – I. 19. – Art. № 191106. – 7 p. DOI: 10.1063/5.0147844.

16. **Orava, J.** Classical-nucleation-theory analysis of priming in chalcogenide phase-change memory / J. Orava, A.L. Greer // *Acta Materialia*. – 2017. – V. 139. – P. 226-235. DOI: 10.1016/j.actamat.2017.08.013.

17. **Abdelghfar, A.** Electrostatically tuned optical filters based on hybrid plasmonic-dielectric thin films for hyperspectral imaging / A. Abdelghfar, M.A. Mousa, B.M. Fouad et al. // *Micromachines*. – 2021. – V. 12. – I. 7. – Art. № 767. – 14 p. DOI: 10.3390/mi12070767.

References:

1. *Phase change materials: science and applications*, ed. by S. Raoux and M. Wutting. New York, Springer Science+Business Media, LLC, 2009, 450 p. DOI: 10.1007/978-0-387-84874-7.

2. Abdollahramezani S., Hemmatyar O., Taghinejad H. et al. Tunable nanophotonics enabled by chalcogenide phase-change materials, *Nanophotonics*, 2020, vol. 9, issue 5, pp. 1189-1241. DOI: 10.1515/nanoph-2020-0039.

3. Sarwat S.G. Materials science and engineering of phase change random access memory, *Materials Science and Technology*, 2017, vol. 33, issue 16, pp. 1890-1906. DOI: 10.1080/02670836.2017.1341723.

4. Wuttig M., Raoux S. The science and technology of phase change materials, *Zeitschrift für anorganische und allgemeine Chemie*, 2012, vol. 638, issue 15, pp. 2455-2465. DOI: 10.1002/zaac.201200448.

5. Lian C., Vagionas C., Alexoudi T. et al. Photonic (computational) memories: tunable nanophotonics for data storage and computing, *Nanophotonics*, 2022, vol. 11, issue 17, pp. 3823-3854. DOI: 10.1515/nanoph-2022-0089.

6. Zhang W., Mazzarello R., Wuttig M., Ma E. Designing crystallization in phase-change materials for universal memory and neuro-inspired computing, *Nature Reviews Materials*, 2019, vol. 4, issue 3, pp. 150-168. DOI: 10.1038/s41578-018-0076-x.

7. Kolobov A.V., Tominaga J. *Chalcogenides: metastability and phase change phenomena*. Berlin, Heidelberg, Springer-Verlag, 2012, XVI+284 p. DOI: 10.1007/978-3-642-28705-3.

8. Guo P., Sarangan A. M., Agha I. A review of germanium-antimony-telluride phase change materials for non-volatile memories and optical modulators, *Applied Sciences*, 2019, vol. 9, issue 3, art. no. 530, 26 p. DOI: 10.3390/app9030530.

9. Cao T., Cen M. Fundamentals and applications of chalcogenide phase-change material photonics, *Advanced Theory and Simulations*, 2019, vol. 2, issue 8, art. no. 1900094, 17 p. DOI: 10.1002/adts.201900094.

10. Sreekanth K.V., ElKabbash M., Caligiuri V. et al. *New directions in thin film nanophotonics*, Singapore, Springer, 2019, X+172 p. DOI: 10.1007/978-981-13-8891-0.

11. Zhou G.F. Materials aspects in phase change optical recording, *Materials Science and Engineering: A*, 2001, vol. 304-306, pp. 73-80. DOI: 10.1016/S0921-5093(00)01448-9.

12. Weidenhof V., Friedrich I., Ziegler S., Wuttig M. Laser induced crystallization of amorphous $\text{Ge}_2\text{Sb}_2\text{Te}_5$ films, *Journal of Applied Physics*, 2001, vol. 89, issue 6, pp. 3168-3176. DOI: 10.1063/1.1351868.

13. Yang I., Do K., Chang H.J. et al. Effect of doped nitrogen on the crystallization behaviors of $\text{Ge}_2\text{Sb}_2\text{Te}_5$, *Journal of The Electrochemical Society*, 2010, vol. 157, no. 4, pp. H483-H486. DOI 10.1149/1.3321759.

14. Ashwin P., Patnaik B.S.V., Wright C.D. Fast simulation of phase-change processes in chalcogenide alloys using a Gillespie-type cellular automata approach, *Journal of Applied Physics*, 2008, vol. 104, issue 8, art. no 084901, 8 p. DOI: 10.1063/1.2978334.

15. Nevzorov A.A., Mikhalevsky V.A., Eliseev N.N., et al. Discrete thermokinetic computational model of laser-induced phase transitions in phase-changing materials, *Applied Physics Letters*, 2023, vol. 122, issue 19, art. no. 191106, 7 p. DOI: 10.1063/5.0147844

16. Orava J., Greer, A.L. Classical-nucleation-theory analysis of priming in chalcogenide phase-change memory, *Acta Materialia*, 2017, vol. 139, pp. 226-235. DOI: 10.1016/j.actamat.2017.08.013.

17. Abdelghfar A., Mousa M.A., Fouad B.M. et al. Electrostatically tuned optical filters based on hybrid plasmonic-dielectric thin films for hyperspectral imaging, *Micromachines*, 2021, vol. 12, issue 7, art. № 767, 14 p. DOI: 10.3390/mi12070767.

Modelling of adaptive phase-shifting filter cells with optical control based on multilayer structures of phase-change materials

A.V. Kiselev, V.A. Mikhalevsky, A.A. Nevzorov, A.A. Burtsev, V.V. Ionin, N.N. Eliseev, A.A. Lotin
National Research Centre «Kurchatov Institute», Moscow, Russia

DOI: 10.26456/pcascnn/2024.16.651

Abstract: The paper presents the results of modelling the phase shift of a passing optical beam caused by the formation of a layered structure in a controllable cell made of the phase-change material $Ge_2Sb_2Te_5$ induced by the controlling influence of pulsed laser radiation of short and ultrashort duration. The crystallization of a thin film of $Ge_2Sb_2Te_5$ is analyzed on the basis of the thermokinetic approach, taking into account the kinetic properties of the material, the energy and duration of the applied laser radiation, the amorphization of the upper layers of the film during rapid heating and the temperature dependence of the kinetic properties. Graphs of the thickness of the crystalline layer in the film material were plotted for each influencing pulsed radiation. From the data on the position of the crystalline layer, the phase shift of the transmitted optical radiation is calculated. Based on the modelling data of the investigated cell, a phase shifter can be constructed to transform an optical beam of arbitrary aperture. The proposed method of controlling the optical beam front by changing the structural state of a thin film can be very promising when accurate and fast tuning of the optical phase transparency is required.

Keywords: *phase shift, optical filters, chalcogenides, phase change materials, thin films, crystallization.*

Киселев Алексей Владимирович – научный сотрудник ФГБУ «Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт»

Михалевский Владимир Александрович – научный сотрудник ФГБУ «Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт»

Невзоров Алексей Алексеевич – к.ф.-м.н., научный сотрудник ФГБУ «Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт»

Бурцев Антон Андреевич – научный сотрудник ФГБУ «Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт»

Ионин Виталий Вячеславович – научный сотрудник ФГБУ «Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт»

Елисеев Николай Николаевич – младший научный сотрудник ФГБУ «Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт»

Лотин Андрей Анатольевич – к.ф.-м.н., заместитель руководителя отделения, ФГБУ «Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт»

Alexey V. Kiselev – Researcher, National Research Centre «Kurchatov Institute»

Vladimir A. Mikhalevsky – Researcher, National Research Centre «Kurchatov Institute»

Alexey A. Nevzorov – Ph. D., Researcher, National Research Centre «Kurchatov Institute»

Anton A. Burtsev – Researcher, National Research Centre «Kurchatov Institute»

Vitaly V. Ionin – Researcher, National Research Centre «Kurchatov Institute»

Nikolay N. Eliseev – Junior Researcher, National Research Centre «Kurchatov Institute»

Andrey A. Lotin – Ph. D., Deputy Head of the branch, National Research Centre «Kurchatov Institute»

Поступила в редакцию/received: 11.08.2024; после рецензирования/revised: 29.08.2024; принята/accepted 02.09.2024.