

Simulazioni atomistiche del processo di cristallizzazione in nanofili di GeTe

Edoardo Baldi

Relatore: Prof. Marco Bernasconi

Università di Milano–Bicocca — Dipartimento di Fisica

Sessione di Laurea Magistrale del
23 marzo 2015

Materiali a cambiamento di fase per memorie ottiche ed elettroniche

Memorie ottiche: **DVD-RW, Blu-ray Disc**



Memorie elettroniche non volatili:
memorie a cambiamento di fase
(PCM)



Leghe di calcogenuri: **GeTe, $\text{Ge}_2\text{Sb}_2\text{Te}_5$ (GST)**

Rapida e reversibile transizione tra cristallo e amorfo (~ 50 ns)

Materiali a cambiamento di fase per memorie ottiche ed elettroniche

Memorie ottiche: **DVD-RW, Blu-ray Disc**




Memorie elettroniche non volatili:
memorie a cambiamento di fase
(PCM)




Leghe di calcogenuri: **GeTe, $\text{Ge}_2\text{Sb}_2\text{Te}_5$ (GST)**

Rapida e reversibile transizione tra cristallo e amorfo (~ 50 ns)


Materiali a cambiamento di fase


Due stati della memoria  bit “0” o “1”

Grande differenza nelle proprietà tra le due fasi

Fase cristallina  metallica

Fase amorfa  isolante

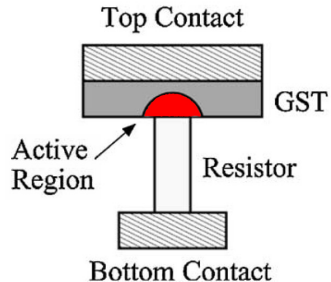
Variazione di resistività di 3 ordini di grandezza  PCM

Differenza della riflettività del 30%  memorie ottiche

La transizione è indotta per riscaldamento (impulsi laser/corrente)

Cella PCM

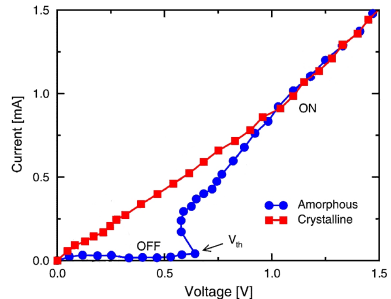
- Regione attiva: piccola porzione del film di materiale a cambiamento di fase che subisce la transizione
- Transizione indotta per effetto Joule



Caratteristica I-V di una cella PCM

- *Lettura*: eseguita a bassa tensione ($V < V_{th}$)
- Processi di *set/reset*: tensione applicata maggiore del valore V_{th})

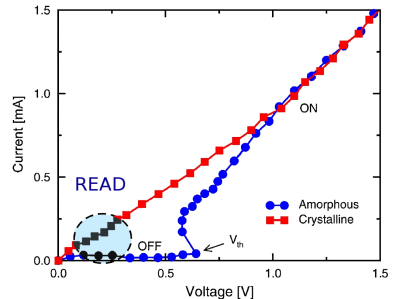
■ *Reset*: elevata intensità di corrente e impulso breve
cristallo \rightarrow amorfo
■ *Set*: bassa intensità e impulso più lungo
amorfo \rightarrow cristallo



Caratteristica I-V di una cella PCM

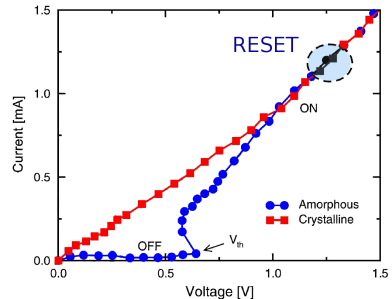
- **Lettura:** eseguita a bassa tensione ($V < V_{th}$)
- Processi di *set/reset*: tensione applicata maggiore del valore V_{th}

- ✱ *Reset*: elevata intensità di corrente e impulso breve
cristallo \rightarrow amorfo
- ✱ *Set*: bassa intensità e impulso più lungo
amorfo \rightarrow cristallo



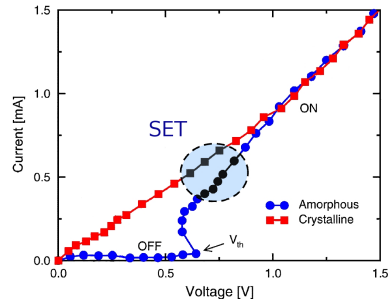
Caratteristica I-V di una cella PCM

- *Lettura*: eseguita a bassa tensione ($V < V_{th}$)
- Processi di *set/reset*: tensione applicata maggiore del valore V_{th}
 - *Reset*: elevata intensità di corrente e impulso breve
cristallo → **amorfo**
 - *Set*: bassa intensità e impulso più lungo
amorfo → **cristallo**



Caratteristica I-V di una cella PCM

- *Lettura*: eseguita a bassa tensione ($V < V_{th}$)
- Processi di *set/reset*: tensione applicata maggiore del valore V_{th}
 - *Reset*: elevata intensità di corrente e impulso breve
cristallo → **amorfo**
 - *Set*: bassa intensità e impulso più lungo
amorfo → **cristallo**



Nanofili nei dispositivi PCM

Vantaggi nell'utilizzo di nanofili

- Riduzione della potenza dissipata nel processo di programmazione
- Riduzione delle dimensioni della cella

Nanofili nei dispositivi PCM

Vantaggi nell'utilizzo di nanofili

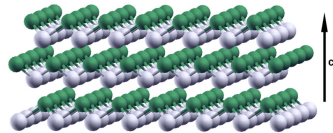
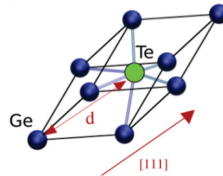
- Riduzione della potenza dissipata nel processo di programmazione
- Riduzione delle dimensioni della cella

La cristallizzazione

La cinetica di cristallizzazione è di difficile approccio sperimentale

Il GeTe

- Struttura cristallina trigonale (fase α): cella elementare romboedrica
- Struttura cubica tipo NaCl elongata lungo la $\langle 111 \rangle$
- Parametri strutturali
 - $a = 4.31 \text{ \AA}$
 - $\alpha = 57.9^\circ$
 - $x = 0.2366$
 - Ge: (x, x, x)
 - Te: $(-x, -x, -x)$



Il GeTe

- Struttura cristallina trigonale (fase α):
cella elementare romboedrica
- Struttura cubica tipo NaCl elongata lungo la $\langle 111 \rangle$

■ Parametri strutturali

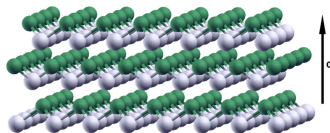
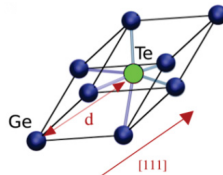
$$a = 4.31 \text{ \AA}$$

$$\alpha = 57.9^\circ$$

$$x = 0.2366$$

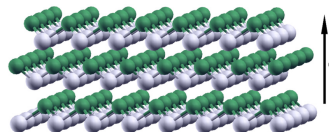
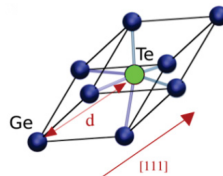
$$\text{Ge: } (x, x, x)$$

$$\text{Te: } (-x, -x, -x)$$



Il GeTe

- Struttura cristallina trigonale (fase α): cella elementare romboedrica
- Struttura cubica tipo NaCl elongata lungo la $\langle 111 \rangle$
- Parametri strutturali
 - $a = 4.31 \text{ \AA}$
 - $\alpha = 57.9^\circ$
 - $x = 0.2366$
 - Ge: (x, x, x)
 - Te: $(-x, -x, -x)$



Nanofili: il modello

Nanofili: il modello

Dinamica molecolare con potenziale *neural networks*

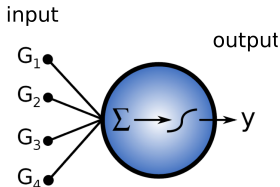
MD e potenziale NN

Potenziale *neural networks*

Total energy as a sum of the atomic energies: $E_{\text{tot}} = \sum_i E_i$

[Behler J. and Parrinello M., Phys. Rev. Lett. 2007]

$$E_i = F(\{G(\bar{x})\})$$



Symmetry functions $\{G\}$

Information on the atomic environment up to a certain cut-off radius (3^{rd} coordination shell)

E_i analytic function of the atomic positions

Potenziale *neural networks* per il GeTe

- E_i è calcolata con il metodo *neural networks*
- Il potenziale per il GeTe è ottenuto interpolando un database di energie calcolate *ab initio*
- 30 000 configurazioni e ~ 8000 parametri

