

Introduzione

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)

I Materiali a Cambiamento di Fase sono di grande interesse tecnologico nella realizzazione di memorie non volatili ottiche, utilizzate in supporti come DVD e Blu-Ray, e memorie elettroniche di nuova concezione chiamate Memorie a Cambiamento di Fase.

Per le memorie elettroniche, i materiali più utilizzati sono alcune leghe di calcogenuri basate su tellurio, come il germanio-tellurio o il germanio 2 antimonio 2 tellurio 5 o GST, il quale è attualmente impiegato come materiale attivo nelle PCM.

Tutti questi materiali mostrano una veloce e reversibile transizione tra la fase amorfa e la fase cristallina, che dura qualche decina di nanosecondi.

Introduzione

Materiali a cambiamento di fase

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/currente)

The two states of these systems, that is crystal and amorphous, may be associated to zero and one bits. In fact these materials show a large difference in properties between the two phases, in particular, roughly speaking, the crystal is metallic and the amorphous is insulating. A resistivity change of three orders of magnitude is exploited in PCMs and a reflectivity change of about 30% is used in DVD-RAM. In these devices the phase transition is induced by heating using an electrical pulse in PCMs and a laser pulse in DVDs.

└ Introduzione

└ Nanofili nei dispositivi PCM

Vantaggi nell'utilizzo di nanofili

- Riduzione delle dimensioni della cella
- Riduzione della potenza dissipata nel processo di programmazione
- Effetti di confinamento del calore

Sono state proposte diverse architetture per ridurre la potenza dissipata nel processo di programmazione. Una di queste consiste nel sostituire al film di materiale attivo, un nanofilo, che permette un miglior confinamento del calore e in principio consente anche una riduzione delle dimensioni della cella.

Nanofili di GeTe

GeTe: struttura cristallina

GeTe: struttura cristallina

- Struttura cristallina trigonale (fase α) con cella elementare **romboedrica**
- Struttura cubica tipo NaCl allungata lungo la (111)
- Parametri strutturali
 $a = 4.21 \text{ \AA}$
 $\alpha = 57.9^\circ$
 $x = 0.2366$
 Ge: (x, x, x)
 Te: $(-x, -x, -x)$



I parametri strutturali della struttura trigonale sono il passo reticolare a , l'angolo tra una coppia di vettori di base α e il parametro x che assegna le posizioni nella cella elementare dei due atomi di Ge e Te.

Metodi computazionali

Potenziale *neural networks*

Potenziale *neural networks*

Energia totale come somma di energie atomiche: $E_{tot} = \sum_i E_i$

[1] Behler e H. P. Parrinello, PRL 98, 148301 (2007)

$$E_i = F(G_i)$$



Symmetry functions G_i

Informazioni sull'ambiente atomico
entro un certo raggio di cutoff
(terza shell di coordinazione)

E_i è funzione analitica delle
posizioni degli atomi

$$E_i = \sum_{j=1}^J w_j^{(1)} f_j \left(\sum_{k=1}^K v_{kj} G_k - \theta_j^{(1)} \right)$$

The neural network potential is built by writing the total energy as a sum of the atomic energies which depend on the atomic local environment. And the local environment is described by the symmetry functions G which depend on bond lengths and bond angles up to a certain cut-off distance that in our case include the third coordination shell.

The neural network is a scheme to assign an energy to a single atom given the local environment. The atomic energy is an analytic function of the atomic positions, so it is easy to calculate forces.

Metodi computazionali

Potenziale *neural networks*

Potenziale *neural networks*

Energia totale come somma di energie atomiche: $E_{tot} = \sum_i E_i$

[1] Behler e M. Parrinello, PRL 98, 148601 (2007)



This picture represent a simple scheme of a neural network. The symmetry functions are obtained from the atomic positions and are the input values of the network. We take a linear combination of the symmetry functions with these weights α to obtain these intermediate values y . Then we apply a non linear function f with this form to the y s and the results are again linearly combined to obtain the atomic energy. The weights α are the fitting parameters of the potential. In our case for GeTe the network has 8 thousand parameters fitted on 30 thousand configurations.

Conclusioni

Conclusioni

- Cinetica di cristallizzazione in nanofili di GeTe
- Riduzione di T_{ex} da 1001 K a ≈ 830 K
- Riduzione della velocità di cristallizzazione al più di un fattore 2, ben descritta dall'espressione classica (CNT) per la velocità di crescita
- Cinetica di cristallizzazione compatibile ad utilizzo di nanofili ultra-scalati nelle celle PCM

In questo lavoro di tesi abbiamo studiato la cinetica di cristallizzazione in nanofili di gete, osservando una riduzione della temperatura di fusione da 1000 kelvin del gete bulk a circa 830 kelvin nei nanofili. Questa riduzione è responsabile della minore velocità di cristallizzazione osservata nei nanofili, che risulta essere al più un fattore 2 inferiore alla velocità calcolata nel bulk. Inoltre, l'andamento della velocità di crescita in funzione della temperatura è ben descritto dall'espressione classica. Possiamo perciò concludere che i risultati osservati suggeriscono che nanofili ultra-scalati fino a 8 nm di diametro possano essere efficacemente impiegati nelle celle PCM.