

# 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 ( $\sim 50$  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 ( $\sim 50$  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

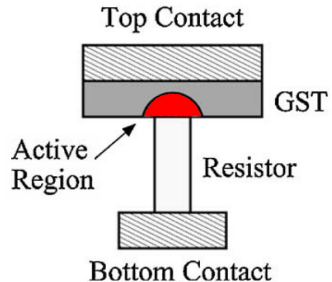
Variazione di resistività di 3 ordini di grandezza  PCM

Differenza della riflettività del 30%  memorie ottiche

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

# Cella PCM

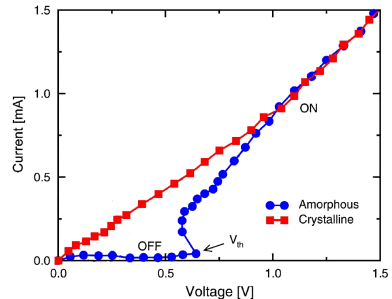
- Regione attiva: piccola porzione del film di materiale a cambiamento di fase che subisce la transizione
- Transizione indotta per effetto Joule



# Caratteristica I-V di una cella PCM

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

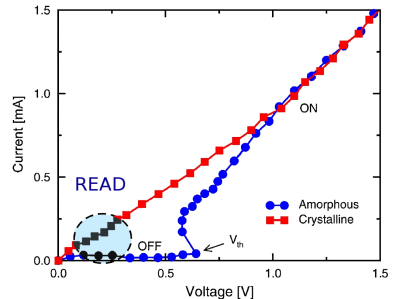
■ *Reset*: elevata intensità di corrente e impulso breve  
cristallo  $\rightarrow$  amorfo  
■ *Set*: bassa intensità e impulso più lungo  
amorfo  $\rightarrow$  cristallo



# Caratteristica I-V di una cella PCM

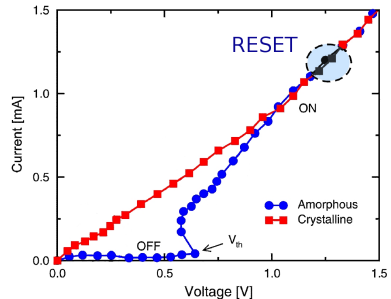
- **Lettura:** eseguita a bassa tensione ( $V < V_{th}$ )
- Processi di *set/reset*: tensione applicata maggiore del valore  $V_{th}$

- ✱ *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

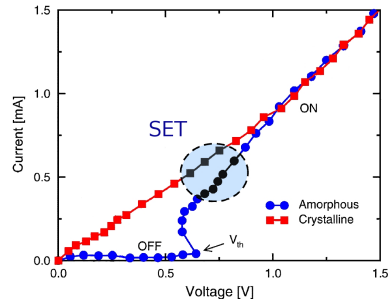
- *Lettura*: eseguita a bassa tensione ( $V < V_{th}$ )
- Processi di *set/reset*: tensione applicata maggiore del valore  $V_{th}$ 
  - *Reset*: elevata intensità di corrente e impulso breve  
**cristallo** → **amorfo**
  - *Set*: bassa intensità e impulso più lungo  
**amorfo** → **cristallo**





# 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

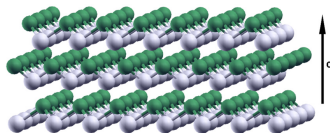
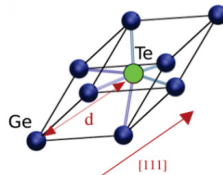
- Riduzione della potenza dissipata nel processo di programmazione
- Riduzione delle dimensioni della cella

# La cristallizzazione

La cinetica di cristallizzazione è di difficile approccio sperimentale

# Il GeTe

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

## ■ Parametri strutturali

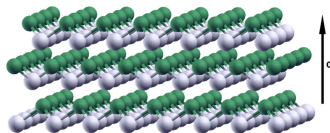
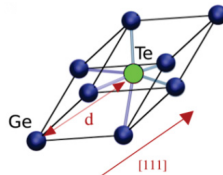
$$a = 4.31 \text{ \AA}$$

$$\alpha = 57.9^\circ$$

$$x = 0.2366$$

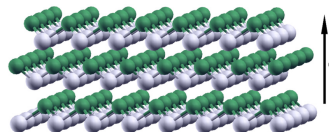
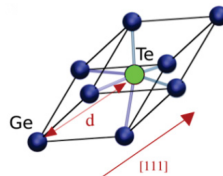
$$\text{Ge: } (x, x, x)$$

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



# Il GeTe

- Struttura cristallina trigonale (fase  $\alpha$ ):  
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*

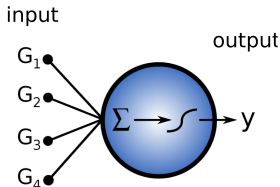
MD e potenziale NN

# 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 ( $3^{\text{rd}}$  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  $\sim 8000$  parametri

