Borsa di studio attivata ai sensi di quanto disposto dal D.M. n. 1061 del 10/08/2021

Titolo del progetto: Studio dei materiali a cambiamento di fase per dispositivi a basso consumo energetico

La borsa sarà attivata sul seguente corso di dottorato accreditato per il XXXVII ciclo:
FISICA

Responsabile scientifico: Riccardo Mazzarello
Area per la quale si presenta la richiesta: GREEN
Numero di mensilità da svolgere in azienda: 6
Numero di mensilità da svolgere all'estero: 6 presso Università RWTH Aachen (Germania)
Azienda: STMicroelectronics, Via Camillo Olivetti 2, 20864 Agrate Brianza (MB)
Il Dipartimento è disponibile a cofinanziare per un importo pari a euro: 7000
Dipartimento finanziatore: DIPARTIMENTO DI FISICA con delibera del 20/9/2021

Progetto di ricerca:
L'attuale era della tecnologia dell'informazione si contraddistingue per l'aumento senza precedenti della domanda globale di memorizzazione ed elaborazione dei dati. Tale domanda è guidata da diversi settori in forte sviluppo, tra cui l'intelligenza artificiale e l'elettronica mobile. È ormai evidente che i dispositivi di calcolo tradizionali basati sull'architettura di von Neumann non sono in grado di far fronte in maniera sostenibile a questa domanda. A causa della separazione fisica delle unità di elaborazione e di memoria, questa architettura richiede un trasferimento continuo di dati tra le due unità attraverso un bus con velocità limitata. Ciò ha un impatto negativo sia sulle prestazioni che sull'efficienza energetica dei dispositivi: si calcola che lo spreco di energia che ne consegue sia pari al 40% dell'energia totale utilizzata dai computer. Lo sviluppo di nuove architetture di calcolo che risolvano questo problema alla radice è quindi di importanza fondamentale per la realizzazione di un'economia digitale green.
La computazione neuromorfica è un approccio estremamente promettente che emula il comportamento del cervello al fine di unificare la memoria e l'unità di elaborazione dati [1], rendendo pertanto inutili i bus per il trasferimento dati fra queste unità. Attualmente, ci sono molteplici tecnologie in fase di studio per l'implementazione della computazione neuromorfica. Fra queste, i prototipi basati sui materiali a cambiamento di fase (MCF) offrono vantaggi chiave [2,3], tra cui la non-volatilità e una scalabilità potenzialmente superiore a quella delle maggiori tecnologie concorrenti.
I MCF possono transire rapidamente e reversibilmente da una fase cristallina a una fase amorfa caratterizzate da resistenze elettriche molto diverse tra di loro. Queste proprietà sono già sfruttate nelle memorie a cambiamento di fase non volatili [4], in cui le fasi cristalline e amorfe corrispondono agli stati logici "1" e "0" e le transizioni sono indotte dall'applicazione di opportuni impulsi elettrici alle celle di memoria. Inoltre, è possibile creare stati intermedi in parte amorfi e in parte cristallini variando l'altezza e la larghezza degli impulsi [3]. Quest'ultima proprietà, in combinazione con la non volatilità, ha permesso di creare prototipi di dispositivi in cui l'elaborazione e la memorizzazione dei dati avvengono nello stesso spazio fisico [5], così come la creazione di chip neuromorfici che emulano il comportamento dei neuroni [6,7].
L'obiettivo di questo progetto è di sviluppare un nuovo tipo di cella a basso consumo energetico per dispositivi neuromorfici basata su eterostrutture di calcogenuri. Tali eterostrutture sono caratterizzate dall'alternanza di strati sottili di MCF e materiali di confinamento. In un recente lavoro pubblicato su Science [8], abbiamo mostrato che l'impiego di un'eterostruttura composta da strati ultrasottili di Sb2Te3 (un MCF) e TiTe2 in luogo di un MCF convenzionale porta a una riduzione dell'87% del consumo energetico necessario per cambiare lo stato del MCF da cristallino (stato di SET) ad amorfo (stato di RESET). Questa è la transizione energicamente più costosa, in quanto la

corrente deve essere sufficientemente alta da fondere il MCF tramite effetto Joule. La riduzione del consumo che si ottiene con le eterostrutture è dovuta in parte al fatto che solo gli strati del MCF transiscono e in parte alla capacità degli strati di TiTe2 di fungere da barriere termiche, sopprimendo la dispersione del calore lungo la direzione verticale. Queste caratteristiche sono vantaggiose non solo per applicazioni neuromorfiche, ma anche per memorie convenzionali a cambiamento di fase. Inoltre, l'utilizzo di queste eterostrutture elimina ulteriori ostacoli alla creazione di chip neuromorfici affidabili e di lunga durata, in quanto riduce le variazioni della resistenza fra cella e cella e il drift temporale della resistenza nella fase amorfa [8]. Questi benefici derivano dal fatto che gli strati di TiTe2 fungono anche da barriere di diffusione, impedendo la migrazione degli atomi del MCF. Quest'ultima provoca variazioni di composizione e segregazione di fase nelle celle convenzionali.
Questi risultati sono molto promettenti ma ulteriori studi sono necessari per ridurre ulteriormente il consumo energetico delle celle basate su queste eterostrutture, sia per quanto riguarda la transizione SET-RESET che la transizione inversa (che comporta la cristallizzazione del MCF). In questo progetto, la/lo studentessa/e effettuerà un'ampia gamma di simulazioni atomistiche basate sulla teoria del funzionale densità per identificare eterostrutture con proprietà di switching ottimali e appropriata conducibilità termica. Negli ultimi 15 anni, questo tipo di simulazioni cosiddette ab initio si è rilevato uno strumento prezioso nel campo dei MCF: in particolare, esse hanno dato un contributo fondamentale all'elucidazione della struttura dello stato amorfo dei più importanti MCF [9] e dei loro meccanismi di cristallizzazione [10]. Inoltre, hanno recentemente permesso di identificare nuovi MCF ultraveloci tramite uno screening computazionale su una vasta gamma di composti [11], nonché di progettare le eterostrutture Sb2Te3/TiTe2 stesse [8].
In questo progetto, particolare attenzione sarà data alle eterostrutture contenenti film sottili di leghe di GeSbTe alternati a calcogenuri opportuni, inclusi dicalcogenuri di metalli di transizione. Le leghe di GeSbTe sono attualmente impiegate nelle memorie a cambiamento di fase [4]. Saranno eseguite simulazioni di dinamica molecolare in combinazione con altre tecniche ab initio per determinare la velocità di cristallizzazione dei MCF e per valutare la capacità degli strati di confinamento di agire sia come barriere termiche che come barriere capaci di bloccare la diffusione degli atomi degli strati di MCF. Come già menzionato, la prima proprietà è fondamentale per la riduzione del consumo energetico durante lo switching. In particolare, la conducibilità termica delle eterostrutture verrà calcolata utilizzando un nuovo approccio teorico recentemente sviluppato all'Università Sapienza [12].
La/lo studentessa/e trascorrerà un periodo di 6 mesi nel gruppo sperimentale del Prof. Matthias Wuttig presso l'Università RWTH Aachen in Germania. Far parte di questo gruppo leader nel campo dei MCF permetterà alla/o studentessa/e di confrontare i risultati computazionali con esperimenti all'avanguardia sulle suddette eterostrutture cresciute con tecniche di epitassia da fasci molecolari e di sputtering, così come di ideare nuove simulazioni per rispondere alle questioni sollevate dagli esperimenti.
La/lo studentessa/e trascorrerà inoltre sei mesi presso l'azienda STMicroelectronics, che sviluppa dispositivi basati sui MCF da molti anni e che ha mostrato vivo interesse per questo tipo di eterostrutture. Più specificatamente, in questi sei mesi la/lo studentessa/e lavorerà a stretto contatto il Dr. Andrea Redaelli, direttore tecnico dell'architettura di processo MCF, e il suo team.

Bibliografia

1. D. Liu, H. Yu e Y. Chai, Adv. Intell. Syst. 3, 2000150 (2021).
2. S. Raoux, W. Wenic e D. Ielmini, Chem. Rev. 110, 240 (2010).
3. W. Zhang, R. Mazzarello, M. Wuttig e E. Ma, Nat. Mater. Rev. 4, 150 (2019)
4. Intel Corporation. Intel® Optane™ Technology.
5. A. Sebastian et al., Nat. Nanotechnol. 15, 529 (2020).
6. T. Tuma et al., Nat. Nanotechnol. 11, 693 (2016).
7. D. Kuzum et al., Nano Lett. 11, 693 (2012).
8. K. Ding, J. Wang, Y. Zhou, H. Tian, L. Lu, R. Mazzarello, C. Jia, W. Zhang, F. Rao e E. Ma, Science 366, 210 (2019).
9. J. Akola e R. Jones, Phys. Rev. B 76, 235201 (2007); Caravati et al., Appl. Phys. Lett. 91, 171906 (2007); R.

Mazzarello et al., Phys. Rev. Lett. 104, 085503 (2010).
10. I. Ronneberger, W. Zhang , H. Eshet e R. Mazzarello, Adv. Funct. Mater. 25, 6407 (2015).
11. F. Rao, K. Ding, Y. Zhou, Y. Zheng, M. Xia, S. Lv, Z. Song, S. Feng, I. Ronneberger, R. Mazzarello, W. Zhang e E. Ma, Science 358, 1423 (2017).
12. M. Simoncelli, N. Marzari e F. Mauri, Nat. Phys. 15, 809 (2019).

Titolo del progetto (inglese): Study of phase-change materials for low-energy devices

Progetto di ricerca (inglese):

The current information technology era is characterised by an unprecedented increase in global demand for data storage and processing. This demand is driven by several fast-developing fields, including artificial intelligence and mobile electronics. It is now clear that traditional computing devices based on the von Neumann architecture cannot sustainably cope with this demand. Due to the physical separation of the processing and memory units, this architecture requires continuous data transfer between the two units via a bus with limited speed. This has a negative impact on both the performance and energy efficiency of the devices: the resulting energy waste is estimated at 40% of the total energy used by computers. Devising new computing architectures that solve this problem at its roots is therefore of fundamental importance for the development of a green digital economy.

Neuromorphic computing is an extremely promising approach that emulates the behaviour of the brain to unify the memory and the data processing unit [1], thus making buses unnecessary for data transfer between these units. Currently, there are multiple technologies under investigation for the implementation of neuromorphic computing. Among these, devices based on phase change materials (PCMs) offer key advantages [2,3], including non-volatility and potentially greater scalability than major competing technologies.

PCMs undergo rapid and reversible transitions from a crystalline phase to an amorphous phase exhibiting very different electrical resistances. These properties are already exploited in non-volatile phase change memories [4], where the crystalline and amorphous phase correspond to the logical states "1" and "0" and transitions are induced by applying appropriate electrical pulses to the memory cells. In addition, it is possible to create partly amorphous, partly crystalline intermediate states by varying the height and width of the pulses [3]. This last property, in combination with non-volatility, has made it possible to create prototype devices in which data processing and storage take place in the same physical space [5], as well neuromorphic chips that emulate the behaviour of neurons [6,7].

The goal of this project is to develop a new type of low-energy phase change cell for neuromorphic applications based on chalcogenide heterostructures. Such heterostructures are characterized by alternating thin layers of PCMs and confinement materials. In a recent paper published in Science [8], we showed that the use of a heterostructure composed of ultrathin layers of Sb2Te3 (a PCM) and TiTe2, instead of a conventional PCM leads to an 87% reduction in the energy consumption required to change the state of the PCM from crystalline (SET state) to amorphous (RESET state). In general, this is the most energy-consuming transition, as the current must be high enough to melt the PCM via the Joule effect. The reduction in consumption offered by these heterostructures is partly due to the fact that only the thin PCM layers undergo structural transitions and partly due to the ability of the TiTe2 layers to act as thermal barriers, suppressing the heat loss along the vertical direction. These features are beneficial not only for neuromorphic applications, but also for conventional phase-change memory devices. In addition, the use of these heterostructures removes other obstacles to the creation of reliable neuromorphic chips, as it reduces the cell-to-cell resistance variations and the temporal drift of resistance in the amorphous phase [8]. These benefits stem from the fact that the TiTe2 layers also act as diffusion barriers, preventing the migration of PCM atoms, which is known to cause composition variations and phase segregation in conventional PCM cells.

These results are very promising but further studies are needed to further reduce the energy consumption of the cells based on these heterostructures, both with regard to the SET-RESET transition and the reverse transition (which involves the crystallisation of the PCM). In this project, the student will perform a wide range of atomistic simulations based on density-functional theory to identify heterostructures with optimal switching properties and appropriate

thermal conductivity. Over the last 15 years, such ab initio simulations have proven to be a very valuable tool in the field of PCMs. In particular, they have made a fundamental contribution to the elucidation of the structure of the amorphous state of the most important PCMs [9] and of their crystallisation mechanisms [10]. In addition, they have recently made it possible to identify new ultrafast PCMs through computational screening over a wide range of compounds [11], as well as to design the Sb2Te3/TiTe2 heterostructures [8].

Particular attention will be given to heterostructures containing thin films of GeSbTe alloys alternating with appropriate chalcogenides, including transition metal dichalcogenides. GeSbTe alloys are currently used in phase change memories [4]. Molecular dynamics simulations in combination with other ab initio techniques will be performed to determine the crystallisation rate of the PCM layers and to evaluate the ability of the confinement layers to act both as barriers blocking the diffusion of the atoms of the PCMs and as thermal barriers. As already mentioned, the latter property is fundamental for the reduction of energy consumption during switching. In particular, the thermal conductivity of the heterostructures will be calculated using a new theoretical approach recently developed at Sapienza University [12].

The student will spend a period of 6 months in the experimental group of Prof. Matthias Wuttig at RWTH Aachen University (Germany). Joining this leading group in the field of PCMs will enable the student to compare his/her computational results with state-of-the-art experiments on the above-mentioned heterostructures grown by molecular-beam-epitaxy and sputtering techniques, as well as to devise new simulations to address the questions posed by the experiments.

The student will also spend six months at STMicroelectronics, a company that has been developing PCM-based devices for many years and has shown great interest in this type of heterostructure. More specifically, during these six months the student will work closely with Dr. Andrea Redaelli, technical director of the PCM process architecture, and his team.

References

1. D. Liu, H. Yu e Y. Chai, Adv. Intell. Syst. 3, 2000150 (2021).
2. S. Raoux, W. Wenic e D. Ielmini, Chem. Rev. 110, 240 (2010).
3. W. Zhang, R. Mazzarello, M. Wuttig e E. Ma, Nat. Mater. Rev. 4, 150 (2019)
4. Intel Corporation. Intel® Optane™ Technology.
5. A. Sebastian et al., Nat. Nanotechnol. 15, 529 (2020).
6. T. Tuma et al., Nat. Nanotechnol. 11, 693 (2016).
7. D. Kuzum et al., Nano Lett. 11, 693 (2012).
8. K. Ding, J. Wang, Y. Zhou, H. Tian, L. Lu, R. Mazzarello, C. Jia, W. Zhang, F. Rao e E. Ma, Science 366, 210 (2019).
9. J. Akola e R. Jones, Phys. Rev. B 76, 235201 (2007); Caravati et al., Appl. Phys. Lett. 91, 171906 (2007); R. Mazzarello et al., Phys. Rev. Lett. 104, 085503 (2010).
10. I. Ronneberger, W. Zhang , H. Eshet e R. Mazzarello, Adv. Funct. Mater. 25, 6407 (2015).
11. F. Rao, K. Ding, Y. Zhou, Y. Zheng, M. Xia, S. Lv, Z. Song, S. Feng, I. Ronneberger, R. Mazzarello, W. Zhang e E. Ma, Science 358, 1423 (2017).
12. M. Simoncelli, N. Marzari e F. Mauri, Nat. Phys. 15, 809 (2019).