

Neue Berechnungen erklären Eigenschaften innovativer Speichermaterialien

Erste Regel des "Kochbuchs für Phasenwechselnden Computerspeicher" gefunden

Jülich, 30. Januar 2006 - Kann eine in der Festkörperphysik sehr erfolgreiche Theorie dabei helfen, den Datenspeicher der Zukunft zu entwickeln? Ja! Die Kooperation zwischen den Arbeitsgruppen von Stefan Blügel vom Forschungszentrum Jülich und Matthias Wuttig von der RWTH Aachen hat gezeigt, wie dies möglich ist. In einer gemeinsamen Arbeit, die nun in der renommierten Fachzeitschrift Nature Materials veröffentlicht wird, erklären sie erstmals den Zusammenhang zwischen der Struktur und den elektronischen Eigenschaften des vielversprechenden elektronischen Speichermaterials, indem sie die Dichtefunktionaltheorie einsetzen.

Die sogenannten Phasenwechselmaterialien regen bereits seit einiger Zeit die Phantasie vieler Materialwissenschaftler an: Bestrahlt man einen Vertreter dieser Materialklasse (etwa $\text{Ge}_2\text{Sb}_2\text{Te}_5$) lokal mit einem Laserpuls, so ändern sich an der bestrahlten Stelle die optischen Eigenschaften des Materials. Beginnt man beispielsweise mit einem ungeordneten (amorphen) Zustand mit geringem optischen Kontrast, so besitzt das Material nach der laserinduzierten Kristallisation einen wesentlich höheren Kontrast. Diese Veränderung legt nahe, dass sich die atomare Anordnung in der ungeordneten und der kristallinen Phase deutlich unterscheiden. Trotz dieser strukturellen Unterschiede geschieht die Umwandlung zwischen den beiden Zuständen dennoch sehr schnell innerhalb von nur ca. 10 Nanosekunden.

Diese ungewöhnliche Kombination von Eigenschaften ermöglicht einen Einsatz der Phasenwechselmaterialien in der optischen Datenspeicherung, wo sie bereits heute - beispielsweise in wiederbeschreibbaren DVDs - zur Anwendung kommen. Da sich der elektrische Widerstand ebenfalls stark ändert, sollen die Materialien in Zukunft auch für elektronische Speicherkarten zur Datenspeicherung in Digitalkameras und Mobiltelefonen genutzt werden (PRAM, phasechange random access memory).

Trotz dieser interessanten kommerziellen Anwendungsmöglichkeiten sind die Ursachen für die starke Eigenschaftsänderung noch kaum verstanden. Erst vor kurzem konnte experimentell gezeigt werden, dass sich die lokale Struktur des Materials ändert: Weisen die Germaniumatome (Ge) in der kristallinen Phase noch sechs Bindungen auf, so reduziert sich die Anzahl der Bindungen in der amorphen Phase auf vier. Solch eine drastische Änderung der lokalen Ordnung ist beim Phasenübergang zwischen amorph nach kristallin bei anderen Halbleiterverbindungen unbekannt. Die Forscher aus Jülich und Aachen haben nun erstmals die Ursachen dieser strukturellen

len Änderung und ihre Auswirkungen auf die elektronischen Eigenschaften untersucht und geklärt.

Die Ausbildung zweier unterschiedlicher Nahordnungen in der amorphen und kristallinen Phase kann durch die ungewöhnlichen Bindungsverhältnisse in den Materialien erklärt werden. Während die Germaniumatome gerne eine Position mit vier nächsten Nachbarn einnehmen (Tetraederplatz), bevorzugen Antimon (Sb) und Tellur (Te) sechs nächste Nachbarn (Oktaederplätze). In der chemischen Verbindung muss also ein geeigneter Kompromiss gefunden werden, um allen Atomen geeignete Atompositionen zuzuweisen. Offensichtlich gibt es dabei zwei Kompromisse mit ähnlicher Energie, aber sehr unterschiedlicher Struktur. So besetzen die Germanium-Atome in der kristallinen Phase einen Oktaederplatz, während sie in der amorphen Phase einen Tetraederplatz bevorzugen. Eine solche Bindungsinstabilität kann man immer dann erwarten, wenn Atome in einem Festkörper Bindungen ausbilden, die sehr unterschiedliche Umgebungen bevorzugen.

Diese Änderung der Plätze führt weiterhin zu starken Veränderungen der elektronischen Energieniveaus. Insbesondere lässt sich so erklären, warum die amorphe Phase eine wesentlich größere Bandlücke - einen für Elektronen energetisch verbotenen Energiebereich - aufweist. Ein solches Phänomen wird bei den typischen Halbleitern wie Silizium oder GaAs nicht beobachtet. Das Öffnen der Bandlücke ist nun nicht nur aus wissenschaftlicher Sicht sehr bemerkenswert, sondern zusätzlich von großer Bedeutung für die Anwendung als elektronischer Datenspeicher.

Um mit elektrischen Pulsen bei geringen Spannungen von der amorphen in die kristalline Phase zu schalten, ist sogenanntes threshold switching erforderlich. Hierbei füllen Ladungsträger Defekte in der amorphen Phase auf. Dadurch entstehen im Halbleiter leitende „Pfade“, von denen die Phasenumwandlung zum kristallinen Zustand ausgeht. Die energetischen Niveaus dieser Defekte befinden sich gerade in der verbotenen Zone der Bandlücke. Eine ausgeprägte Bandlücke in der amorphen Phase ist somit von großer Bedeutung für die gewünschte Phasenumwandlung.

Die Rechnungen liefern somit wichtige Ergebnisse zum Verständnis von amorphen Halbleitern und stellen einen bedeutenden Schritt zur Entwicklung von Designregeln für elektronische Datenspeicher dar. Ziel ist es hierbei, abhängig von der chemischen Zusammensetzung des Materials wichtige Eigenschaften wie die Bandlücke, die Threshold-Spannung oder den elektrischen Kontrast zwischen amorpher und kristalliner Phase vorherzusagen und anhand dieser Daten den Datenspeicher angepasst auf die jeweilige Anwendung - quasi nach Rezept - zu entwerfen. Die gemeinsame Jülicher und Aachener Forschung hat nun die erste Regel des „Kochrezepts für Computerspeicher“ entdeckt: Man nehme gezielt Materialien, die im amorphen und kristallinen unterschiedliche Nahordnungen (Bindungen) aufweisen.

Lit.: Unravelling the interplay of local structure and physical properties in phase-change materials, W. Welnic et al, Nature Materials 5, 56-62, 2006

Pressekontakt:

Kosta Schinarakis, Wissenschaftsjournalist, Öffentlichkeitsarbeit, Forschungszentrum Jülich
Tel. 02461 61-4771, Fax 02461 61-4666, E-Mail: k.schinarakis@fz-juelich.de