

UNIVERSIDAD DE GRANADA

FACULTAD DE CIENCIAS



Departamento de Electrónica y Tecnología de Computadores

**ESTUDIO, MODELADO Y
SIMULACIÓN DE MEMORIAS
RRAM**

Tesis Doctoral

Marco Antonio Villena Sánchez

Granada 2015

Los sueños sólo tienen sentido porque nos esforzamos en hacerlos realidad.
(Ghost in the Shell)

Agradecimientos

A veces es curioso cómo una cadena de acontecimientos que no puedes controlar te lleva a sitios en los que no esperabas estar. Una de estas circunstancias azarosas me ha llevado hasta aquí. Hasta esta experiencia investigadora en un campo apasionante que une todas mis pasiones: la ciencia, la tecnología y la programación.

Durante todo este camino he pasado por muchas experiencias y emociones: entusiasmo, duro trabajo, incertidumbre (mucho incertidumbre), orgullo, etc. En definitiva, ha sido una experiencia de aprendizaje, mucho aprendizaje. Todo esto no hubiera sido posible sin un grupo de personas que se merecen todo mi agradecimiento y respeto.

En primer lugar me gustaría dar las gracias a mis directores D. Juan Bautista Roldán Aranda y D. Francisco Jiménez Molinos por dedicarme su apoyo, su trabajo y considerarme siempre como un igual. Sin ellos esta tesis nunca hubiera llegado a término.

Agradezco especialmente la ayuda que me han prestado Dña. Francesca Campabadal Segura y Dña. Mireia Bargalló González, del IMB-CNM (CSIC) de Barcelona, por la fabricación y medida de dispositivos RRAM. La posibilidad de disponer de medidas experimentales en distintas condiciones de trabajo ha permitido desarrollar y ajustar el simulador que se presenta en esta tesis y plantear varias de las publicaciones a revista que han resultado. Igualmente estoy agradecido a D. Jordi Suñé Tarruella, de la Universidad Autónoma de Barcelona, por su ayuda en el desarrollo del simulador y por poner a mi disposición medidas experimentales de dispositivos fabricados en el *Laboratory of Nanofabrication and Novel Device Integration, Chinese Academy of Sciences*. Sin la estrecha colaboración de Jordi Suñé Tarruella, Francesca Campabadal Segura y Mireia Bargalló González este trabajo no hubiera sido posible.

También agradezco la colaboración de los miembros del grupo de investigación "Nanoestructuras, propiedades cuánticas y aplicaciones tecnológicas" y del Departamento de Electrónica y Tecnología de Computadores de la Universidad de Granada. Me gustaría también hacer mención a la colaboración de D. Pedro González Rodelas y D. Domingo Barrera Rosillo, miembros del Departamento de Matemática Aplicada, en algunas partes de este trabajo. También a D. Francisco Manuel Gómez Campos por su contribución en el desarrollo de videos para la divulgación de los resultados del simulador.

A mis padres, por apoyarme todos estos años de duro trabajo, desastres de horarios y malos humos. Gracias por haberme permitido llegar hasta aquí y haberme dado las herramientas para poder ser quien soy.

A mi hermano Víctor Manuel, por la ayuda que me has dado todos estos años como físico y como hermano.

A mi hermana Beatriz, por esas grandes traducciones de última hora y por la paciencia que tienes conmigo en alguna ocasión que otra.

A mis sobrinos Mavi y Pablo, por ser simplemente como sois. Por animarme cuando me ha hecho falta y por ser la alegría que sois.

A mis amigos, aunque ahora estemos dispersos por el mundo siempre estamos cerca. En particular a Mariángeles, sin tantas tardes de café esto no hubiera sido lo mismo.

A mi amigo Néstor García Extrabot, gracias por esos viajes y por esa gran cerveza.

Por último, no puedo olvidar una deuda pendiente con María y Miguel desde nuestros tiempos como estudiantes universitarios: a todos los profesores que he tenido, tanto a los buenos como a los malos. Porque si importante es que te enseñen la forma correcta de hacer las cosas, también lo es aprender (aunque sea a costa de malas experiencias) cómo no se deben hacer.

Índice General

Índice de figuras.	4
Prólogo.	17
1 Introducción.	20
1.1 Memorias no volátiles.	20
1.1.1 Tecnología actual. Memorias Flash.	21
1.1.2 Limitaciones de la tecnología Flash.	24
1.2 Dispositivos emergentes para memorias no volátiles.	25
1.3 Tipos de RRAM. Tecnologías.	34
1.4 Métodos de simulación. Estado del arte.	38
2 Fundamentos y modelado de la conmutación resistiva basada en filamentos conductores.	43
2.1 Fundamentos de la conmutación resistiva en dispositivos con óxidos metálicos.	43
2.2 Simulación de procesos <i>set/reset</i> en RRAMs.	46
3 Simulador <i>SIM²RRAM</i>.	53
3.1 Introducción.	53
3.2 Descripción de los módulos del simulador.	53
3.2.1 Bloque de configuración.	55
3.2.2 Bloque eléctrico.	59
3.2.2.1 Comportamiento lineal. Modelo óhmico.	61
3.2.2.2 Comportamiento no lineal. Modelo <i>Quantum Point Contact</i>	62

3.2.3	Bloque térmico.	67
3.2.4	Bloque cinético.	69
3.2.5	Interfaz gráfica.	71
4	Validación del simulador SIM²RRAM y análisis del proceso de <i>reset</i>. . . .	78
4.1	Introducción.	78
4.2	Celda tipo Cu/HfO ₂ /Pt.	79
4.2.1	Ciclos <i>reset</i> con un único filamento conductor. Dependencia de la tensión de <i>reset</i> con la resistencia del dispositivo.	81
4.2.2	Ciclos <i>reset</i> con múltiples filamentos conductores.	86
4.2.3	Ciclos con <i>reset</i> progresivos.	92
4.2.4	Fabricación del dispositivo.	96
4.3	Celda tipo Ni/HfO ₂ /Si-n ⁺	97
4.3.1	Efecto de la barrera túnel. Modelo <i>Quantum Point Contact</i> . . .	101
4.3.2	Fabricación del dispositivo.	103
5	Métodos de cálculo de la tensión de <i>reset</i>.	105
5.1	Introducción.	105
5.2	Métodos de extracción de la tensión de <i>reset</i>	106
5.3	Aplicación de los métodos de cálculo de la tensión de <i>reset</i>	111
6	Caracterización de los mecanismos de transporte. Tensión Umbral de <i>reset</i>.	119
6.1	Introducción.	119
6.2	Fundamentos y determinación de la Tensión Umbral.	120

7	Influencia de la temperatura externa sobre las tensiones y corrientes de <i>reset</i>.	128
7.1	Introducción.	128
7.2	Resultados y análisis de la dependencia térmica del proceso de <i>reset</i>	128
8	Estudio del proceso de <i>set</i>.	138
8.1	Introducción.	138
8.2	Corriente de Poole-Frenkel.	139
8.3	Reconstrucción de la estructura de conducción. Intensidad de <i>compliance</i>	141
9	Modelado compacto para el estudio de procesos de <i>reset</i> en simuladores de circuitos.	146
9.1	Introducción.	146
9.2	Macromodelo para simulación de procesos de <i>reset</i>	148
9.2.1	Estimación de T_{reset}	152
9.2.2	Determinación del número de bloques necesarios para modelar un filamento conductor.	154
9.3	Validación del modelo y resultados.	155
10	Conclusiones.	164
	Apéndice A: Método de las diferencias finitas.	170
	Apéndice B: Método de Runge-Kutta-Fehlberg adaptativo.	174
	Bibliografía.	179
	Publicaciones y aportaciones a congresos relacionados con esta tesis.	190

Índice de Figuras

1	Ingresos y previsión de ingresos de la industria NAND [11].	20
2	Comparativa del tamaño y el precio de las memorias en 1980 y 2010 [14]. .	21
3	Esquema del transistor MOSFET con puerta flotante o también conocido como FAMOS (<i>Floating Gate Avalanche-injection MOS</i>).	21
4	Diagrama de las bandas de energía (parte inferior) referido a la estructura de un transistor MOSFET con puerta flotante (parte superior) [18]. (a) se corresponde con el estado lógico “1” del transistor donde la FG está descargada y en (b) tenemos el estado “0” al que se llega cargando la FG. .	22
5	Curvas I_D - V_{GS} de respuesta característica del transistor MOSFET con puerta flotante para los estados 1 y 0 lógicos. Al cargar o descargar la puerta flotante la tensión umbral del dispositivo varía.	23
6	Esquema del transistor ETOX usado en las memorias Flash actuales. El proceso de escritura se realiza mediante la inyección de electrones calientes desde el lado del drenador. El proceso de borrado se lleva a cabo mediante la extracción de los electrones de la FG por efecto túnel Fowler-Nordheim (FN) por el lado de la fuente.	24
7	Diagrama con los diferentes tipos de memorias existentes, los que están en fase de prototipado y los dispositivos emergentes que se están valorando en la actualidad como posibles alternativas [25].	26
8	Esquema de una celda FeFET en el estado lógico cero (a) y en el estado lógico uno (b). La polarización del material ferroeléctrico (FE) altera la distribución de cargas del canal. Figura obtenida de [26].	27
9	Geometría (a) y perfil del potencial electrostático (b) para dos orientaciones de polarización opuestas. La variación de la polarización del material ferroeléctrico produce una alteración en el nivel de la barrera de potencial que controla el efecto túnel. Figura obtenida de [31].	28
10	Esquema de la sección transversal de una celda tipo Mott. El canal está formado por dos fases: metal (zona naranja) y aislante (zona azul claro). La variación de la proporción de ellos altera la resistencia de la celda. Figura obtenida de [34].	28

11	Esquema de la distribución de los orbitales sp^2 (segmentos rojos) y sp^3 (segmentos grises) en la estructura de carbono durante dos ciclos <i>set/reset</i> . La creación de un camino formado por átomos con orbitales sp^2 entre los dos electrodos permite alcanzar el estado de LRS. Figura obtenida de [38].	29
12	Esquema transversal de una celda de memoria macromolecular tipo Al/parylene-C/W. En esta celda se ha usado como polímero el poly p-xylylene (parylene-C). Figura obtenida de [40].	30
13	Esquema de operación de una celda molecular. Alterando el estado de conducción de la molécula que une los dos electrodos mediante la aplicación de un voltaje, se puede almacenar información de manera permanente. El proceso de escritura y borrado se realiza invirtiendo la polaridad de la tensión aplicada. Figura obtenida de [43].	31
14	Esquema genérico de la estructura de una celda RRAM. Los filamentos conductores que se han formado dentro del aislante lo atraviesan cerrando el circuito entre los dos contactos metálicos creando así el estado de baja resistencia.	32
15	Esquema de la curva I-V característica de dos procesos de conmutación resistiva (RS): (a) RS unipolar tanto para tensiones positivas como negativas y (b) RS bipolar.	33
16	Comparativa del tamaño de dos memorias de 8GB usando tecnología de celdas NAND y celdas RRAM [45].	33
17	Ilustración del proceso <i>set/reset</i> bipolar para una celda de EMB [4].	35
18	Ilustración del proceso de oxidación/reducción que produce los cambios de conductividad en las celdas VCM [4].	36
19	Ejemplos de modelos microscópicos para dispositivos RRAM. (a) muestra el modelo 3D propuesto en [56] donde se crean vacantes de oxígeno dentro del óxido. (b) muestra el modelo propuesto en [57] análogo al anterior pero trabajando en 2D. En este tipo de esquemas se trata de encontrar caminos de percolación que corresponden a los CFs.	39
20	Esquema del modelo de RRAM propuesto por [58]. (a) Esquema del modelo de aislante formado por una red de interruptores interconectados. Los CFs se forman como resultado de los caminos que conectan los electrodos y forman todos los interruptores que se encuentren en ON. (b) Esquema del comportamiento de cada interruptor.	40
21	Representación esquemática de la operación de <i>forming</i>	44

- 22 Representación esquemática de la operación de *set/reset*. Existen muchos modelos para explicar estos procesos, entre ellos se cuentan los que consideran que el CF se destruye debido a la difusión térmica de la especie metálica que lo compone. El proceso químico de reducción vuelve a formar el CF durante el proceso de *set*. 45
- 23 Representación esquemática del proceso de *set/reset* para el modelo de CF actuando como “pistón”. El CF se alarga o se acorta arrastrado por el campo eléctrico. 46
- 24 Esquema de la estructura de una celda RRAM (a). En (b) se muestra esquemáticamente el modelo usado para la simulación de los dispositivos que presenta un comportamiento lineal a bajas tensiones. En (c) se representa el esquema del modelo incluyendo efectos cuánticos usados para la simulación de dispositivos no lineales a bajas tensiones. R_{setup} engloba todas las resistencias externas, CF_i representa el filamento conductor i , mientras que, por último, R_{Mti} y R_{Mbi} se corresponden con las resistencias de Maxwell del contacto superior e inferior respectivamente asociadas al filamento i 47
- 25 Representación de los distintos tipos de CFs considerados dentro del modelo macroscópico usado en esta tesis: (a) CF con perfil cilíndrico, (b) CF con perfil de tronco de cono y (c) CF con perfil gaussiano. 48
- 26 Imágenes TEM in-situ de dos tipos de celdas RRAM tras haberse formado el CF extraídas de [95]. En (a) tenemos un CF con perfil de aspecto gaussiano presente en una celda Cu/ZrO₂/Pt y en (b) se puede ver un CF con perfil de tronco de cono en una celda Ag/ZrO₂/Pt. 48
- 27 Esquema del flujo de corriente que circula entre los dos electrodos de la celda RRAM a través del cuello de botella que producen los CFs. Este agrupamiento de las líneas de corriente da como resultado la aparición de la resistencia de Maxwell [97, 98]. 49
- 28 Efecto del cambio de la energía libre estándar de activación para la oxidación y reducción. La figura de la derecha corresponde a la ampliación del cuadro gris de la figura de la izquierda [102]. 52
- 29 Diagrama de flujo de la estructura general simplificada del simulador SIM²RRAM. El parámetro k se corresponde con el tamaño del paso temporal el cual va variando según las necesidades de la simulación (ver sección 3.2.4). El parámetro t_{STEP} se corresponden con el tiempo durante el cual se aplica una misma tensión V_{app} . Este simulador también permite estudiar procesos transitorios debidos, por ejemplo, a la aplicación de pulsos. 54

- 30 Curvas I-V simuladas para un CF cilíndrico para distintas pendientes de la rampa de tensión usada en su simulación (el simulador usado se explicará en el Capítulo 3). El valor que tome la pendiente de la rampa influye en el valor de la tensión de *reset*. Este resultado también se ha comprobado en cuanto a tendencias experimentalmente en [103]. 57
- 31 Esquema de los parámetros de caracterización de los CFs. r_{CFmax} se corresponde con el radio máximo del CF. El parámetro C_{CF0} es una cantidad relativa que indica la reducción del radio menor respecto al mayor en tanto por ciento. Dado que los CFs ocupan todo el espesor del óxido, la altura del CF coincide con t_{ox} (ver Tabla 2). 58
- 32 Curvas de I-V de *reset* de dos tipos de celdas diferentes que muestran el comportamiento lineal (a) y no-lineal (b) de la intensidad que pueden presentar las celdas RRAM, como se ve en las zonas resaltadas. (a) se corresponden con una celda Cu/HfO₂/Pt fabricada por el *Laboratory of Nanofabrication and Novel Device Integration, Chinese Academy of Sciences*. (b) es una celda de Ni/HfO₂/Si-n⁺ fabricada por el departamento de micro y nanosistemas del IMB-CNM (CSIC) de Barcelona. 59
- 33 Esquema simplificado del bloque eléctrico del simulador SIM²RRAM. El Modelo óhmico es el usado para la simulación del comportamiento lineal mientras que el Modelo QPC es el usado para el comportamiento no lineal. 60
- 34 Esquema circuital utilizado para modelar el comportamiento eléctrico de la estructura de filamentos de una celda RRAM. R_{setup} es la resistencia externa de las pistas conductoras de medida, R_{Mi} se corresponde con la resistencia de Maxwell de cada filamento y R_{CFi} es la resistencia de los propios CFs. 61
- 35 Esquema de la estructura interna de la celda RRAM teniendo en cuenta los efectos cuánticos modelados mediante QPC. 63
- 36 Diagrama de la banda de energía en la constricción que controla los caminos cuánticos de conducción. 64
- 37 Esquema circuital para modelar el comportamiento eléctrico de los filamentos de una celda RRAM que presenta una respuesta no lineal. R_{setup} es la resistencia externa de las pistas conductoras de medida, R_{Mi} se corresponde con la resistencia de Maxwell de cada filamento, R_{CFi} es la resistencia de los propios CFs y R_{CTri} se corresponde con la resistencia asociada a las barreras del modelo QPC. 65

- 38 Diagrama de flujo del bloque cinético. Los valores de la concentración de la especie metálica son calculados usando aproximaciones de orden 4° y 5° del método *Runge-Kutta-Fehlberg* (Apéndice B). La diferencia de los resultados se corresponde con el error cometido que no deberá superar el error máximo permitido δ . Si este error máximo se supera, se reduce el paso temporal k y se vuelve a repetir el cálculo. 69
- 39 Captura de pantalla del menú principal del simulador SIM²RRAM en su versión literal. Esta captura se corresponde con la ventana de comandos del entorno de MATLAB necesaria para la ejecución del simulador. 71
- 40 Captura de pantalla de la ventana principal del simulador SIM²RRAM. A través de esta interfaz se pueden configurar todos los parámetros, ejecutar la simulación y mostrar todos los resultados obtenidos. 72
- 41 Esquema de los principales menús de configuración de SIM²RRAM que nos permiten trabajar sin la necesidad de manipular los distintos *scripts*. . . 72
- 42 Ventana de configuración de los parámetros físicos del óxido y los CFs que forman la celda de memoria. 73
- 43 Ventana de configuración de los parámetros físicos de los contactos metálicos así como de otros parámetros externos. 74
- 44 Ventana de configuración de la corriente de Poole-Frenkel que circula a través del óxido. 75
- 45 Ventana de configuración de cada uno de los CFs que componen la estructura de filamentos de la celda. En ella se puede indicar las dimensiones, forma y los correspondientes parámetros del modelo QPC. . . 75
- 46 Finalizada la simulación podemos representar en el área de gráficos todos los resultados. Además se pueden usar herramientas de análisis para extraer datos concretos del gráfico. En el área de resultados se muestran resultados globales de la simulación. 76
- 47 En la ventana “Export...” podemos guardar todos los resultados obtenidos en archivos de texto en los que se ordena la información que se desea incluir por columnas. 77
- 48 Curvas I-V experimentales de la celda Cu/HfO₂/Pt. En (a) se muestran curvas de varios ciclos de *reset* con una sola caída abrupta de la intensidad mientras que en (b) tenemos otros ciclos de *reset* de la misma celda en los que la intensidad cae formando varios escalones. 80

- 49 Curvas I-V de las celdas RRAM de Cu/HfO₂/Pt. Los resultados experimentales se muestran mediante símbolos mientras que las curvas simuladas se corresponden con las líneas. En todos los casos se consideró un único CF. 81
- 50 Dependencia de la resistencia inicial del CF con su forma para (a) CFs con un perfil Gaussiano, (b) CFs con forma de tronco de cono. En la gráficas interiores se muestra $C_{CF}(z)$ en función de la posición. 82
- 51 Tensión de *reset* en función de la resistencia inicial del CF con diferentes formas (sin tener en cuenta la resistencia serie por claridad). Las formas del CF son las usadas anteriormente en la Figura 34 donde G y C se corresponden con el perfil gaussiano y tronco de cono respectivamente [6]. 84
- 52 Resistencia inicial y de Maxwell en función del radio para filamentos perfectamente formados (cilíndricos). 84
- 53 (a) Tensión de *reset* en función de la resistencia total inicial de la celda ($R_{RRAM0} = R_{SETUP} + R_{Mt} + R_{CF0} + R_{Mb}$) para diferentes radios y (b) tensión de *reset* en función de la resistencia inicial del CF para distintos radios (la resistencias serie y de Maxwell no se han tenido en cuenta en este caso). En ambos caso los datos experimentales se han tomado de [112] y las simulaciones se corresponden a CFs cilíndricos (Sim. (100%)) y CFs con perfil gaussiano cuyo $C_{CF0} = 50\%$ (Sim. (50%)). 85
- 54 Curva I-V con varios escalones correspondientes a la celda RRAM de Cu/HfO₂/Pt. Las curvas experimentales se representan mediante símbolos mientras que las curvas simuladas se muestran con líneas. Cada escalón se corresponde con la ruptura de uno de los CFs que componen la estructura de conducción. 86
- 55 Simulación de la curva I-V de una celda RRAM con cuatro CFs con perfil gaussiano de diferentes tamaños. Las curvas I-V de cada uno de estos CFs por separado se han representado en la gráfica interior. 88
- 56 Comparación de una serie de curvas I-V experimentales, representadas por líneas discontinuas, con los resultados obtenidos mediante simulaciones. Cada simulación se ha realizado con diferentes estructuras de conducción variando tanto el número de CFs como su tamaño y forma [6]. 88
- 57 Definición de los puntos RESET 1 y RESET 2 para dos curvas I-V experimentales. Para las curvas que sólo presentan un único escalón se considera que sólo tienen RESET 1. 90

- 58 Corriente en función de la tensión de *reset* para una determinada celda RRAM en ciclos *set/reset* sucesivos. En (a) tenemos los resultados obtenidos a partir de curvas simuladas mientras que en (b) tenemos los resultados obtenidos a partir de los datos experimentales en línea con lo mostrado en [112, 6]. Parte de las curvas usadas para realizar ambas gráficas son las mostradas en la Figura 40. 90
- 59 Comparativa de la evolución de la tensión y la corriente de *reset* en una celda RRAM con un único CF cilíndrico que va aumentando su grosor. Para la línea verde se ha eliminado R_{serie} ($R_{serie} = R_{Maxwell} + R_{setup}$) con lo que desaparece la evolución en forma de “C”. 92
- 60 Corriente total que circula por la RRAM en función de la tensión aplicada. Los datos representados por símbolos se corresponden con las medidas experimentales de las celdas Cu/HfO₂/Pt descritas en la sección 4.2.4 y las líneas son resultados simulados. (a) Para la curva Sim 8, se han usado 8 CFs; para Sim 23, 1 CF; para Sim 34, 5 CFs; (b) para Sim 30, 6 CFs; para Sim 33, 4 CFs y para Sim 35, 4 CFs [122]. 92
- 61 Concentración de especie metálica $C_{CF}(z)$ a lo largo del CF en función de la tensión aplicada a una celda RRAM de Cu/HfO₂/Pt de radio máximo 10 nm (el CF es completamente cilíndrico). 94
- 62 Concentración de especie metálica $C_{CF}(z)$ a lo largo del CF en función de la tensión aplicada a una celda RRAM de Cu/HfO₂/Pt de radio máximo 0.5 nm (el CF es completamente cilíndrico). Para este tamaño de CF el proceso de *reset* es progresivo. 95
- 63 Corriente que circula por una celda RRAM en función de la tensión aplicada para varios dispositivos de un único CF cilíndrico para distintos grosores. Conforme aumentamos el radio del CF pasamos de un proceso de *reset* progresivo a uno abrupto [122]. 96
- 64 Esquema de la celda RRAM de Cu/HfO₂/Pt fabricada por *Laboratory of Nanofabrication and Novel Device Integration, Institute of Microelectronics, Chinese Academy of Sciences*. 96
- 65 Intensidad en función de la tensión aplicada a la celda RRAM Cu/HfO₂/Si-n⁺. Las líneas continuas se corresponden con los resultados obtenidos a partir de las simulaciones realizadas con SIM²RRAM mientras que las líneas discontinuas han sido obtenidas experimentalmente. En (a) se representan ciclos de *reset* con una única caída brusca de la intensidad y en (b) tenemos ciclos en los que aparecen varias caídas. 98
- 66 Comparación de las intensidades de *reset* en función de las tensiones de *reset* de las curvas I-V experimentales (símbolos rojos) y las curvas I-V obtenidas mediante simulación (símbolos verdes). 100

- 67 (a) Curva I-V simulada para un dispositivo con un solo CF. En (b) tenemos la resistencia del propio CF (R_{CF}) y la resistencia asociada a la interface QPC (R_{QPC}) en función de la tensión aplicada a la celda. 101
- 68 Temperatura punto a punto a lo largo del CF en función de la tensión aplicada para el CF usado en la Figura 51. La ruptura de este CF se produce en la región más caliente, que coincide con la zona más estrecha del mismo. 102
- 69 (a) Curvas I-V simuladas para dos dispositivos idénticos con distintos valores de α . En (b) se muestran sus correspondientes resistencias R_{CF} y R_{QPC} en ambos casos [122]. 103
- 70 (a) Esquema de la sección transversal de la celda Ni/HfO₂/Si-n⁺, (b) curvas I-V experimentales características obtenidas durante las medidas de los ciclos *set/reset*. En los ciclos *set* se empleó una intensidad de *compliance* de 100 μ A. 104
- 71 Corriente en función de la tensión aplicada para dos celdas RRAM simuladas con un único CF. Se han señalado las tensiones de *reset* según las definiciones de V_{RSO} y V_{RSF} . En el caso de la curva azul (correspondiente a un *reset* progresivo) estas dos tensiones se encuentran muy alejadas. Conforme el proceso se hace más abrupto, estas dos tensiones se van acercando. 107
- 72 Corriente en función de la tensión aplicada de una celda RRAM simulada. Se describen gráficamente los métodos numéricos utilizados para el Método 1 (círculos) y el Método 2 (rombos) para extraer V_{RESET} . Los datos mostrados son parte de una curva de *reset* completa (mostrada en la gráfica interior). Notar que la tensión V_{RESET} determinada como la primera caída negativa de la corriente (Método 1) coincide con el máximo de la curva I-V. En el procedimiento descrito por el Método 2 se establece la V_{RESET} como la primera caída de intensidad con una pendiente menor (más pronunciada) que la obtenida mediante la ecuación (27). 108
- 73 Corriente medida en función de la tensión aplicada en una celda RRAM. Se han añadido los resultados dados por los Métodos 1, 2 y 5 para los valores de V_{RESET} 113
- 74 Corriente medida en función de la tensión aplicada en una celda RRAM. Se han añadido los resultados para V_{RESET} dados por el Método 3 usando distintos valores del parámetro a 115
- 75 Corriente medida en función de la tensión aplicada en una celda RRAM. Se han añadido los resultados para V_{RESET} dados por el Método 4 usando distintos valores del parámetro b 117

- 76 (a) Curva I-V simulada para un dispositivo RRAM tipo Ni/HfO₂/Si-n⁺ (línea continua). Las líneas discontinuas representan la curvatura que presenta la curva I-V antes (cóncava, línea roja) y después (convexa, línea azul) de la Tensión Umbral de *reset*, V_{TH_RESET} (símbolo naranja). (b) Derivada de la intensidad en función de la tensión aplicada. La tensión donde se alcanza el máximo de esta curva se define como Tensión Umbral de *reset*, V_{TH_RESET} (símbolo naranja). 119
- 77 Curvas I-V experimentales (línea continua) y sus correspondientes derivadas numéricas (línea discontinua) de un dispositivo RRAM tipo Ni/HfO₂/Si-n⁺ (ver sección 4.3). La tensión para la cual se presenta el máximo de cada derivada define la tensión umbral de *reset*, V_{TH_RESET} (símbolos cuadrados). 120
- 78 Curvas I-V correspondientes al circuito cuyo esquema se encuentra representado dentro del gráfico. Se han considerado los casos en los que la resistencia es constante, creciente o decreciente con la tensión aplicada. La evolución de la resistencia en función de la tensión aplicada se ha representado en la gráfica interna. 121
- 79 (a) Inversa de la resistencia total del dispositivo en función de la tensión aplicada. (b) Derivada de la inversa de la resistencia total en función de la tensión aplicada. V_{TH_RESET} (símbolo naranja) se puede definir como la tensión en la que se encuentra el máximo de la inversa de la resistencia total, el cual se corresponde con el máximo de la derivada de la corriente, o como la tensión a la que se produce el cambio de tendencia en la evolución de la resistencia. 122
- 80 Resistencia del CF (R_{CF}) y resistencia asociada a la corriente túnel definida en el modelo QPC (R_{QPC}) en función de la tensión aplicada. El balance de las variaciones de las resistencias antes y después de la V_{TH_RESET} da como resultado la variación de la curvatura de la curva I-V de *reset* (Figura 76). 123
- 81 Curvas I-V simuladas para un dispositivo RRAM tipo Ni/HfO₂/Si-n⁺ donde (a) cambia la dependencia térmica de la conductividad eléctrica del CF mediante la variación del coeficiente térmico α_T o (c) cambia la barrera de potencial variando el ancho de la barrera a través del parámetro α . En (b) se muestra las derivadas de las curvas de intensidad mostradas en (a). En (d) se representan las derivadas de las curvas de intensidad mostradas en (c). En todas las simulaciones se ha empleado una estructura de conducción de un solo CF con forma de tronco de cono de dimensiones iniciales $r_{CFmax}=30$ nm y $C_{CF0}=5\%$ 124

- 82 Tensión umbral (V_{TH_RESET}) en función del coeficiente térmico de la conductividad eléctrica del CF, α_T (líneas continuas) y del factor de forma del potencial parabólico, α (línea discontinua) para tres CFs diferentes. Para estas simulaciones se han empleado estructuras de conducción de un único CF con forma de tronco de cono cuyas dimensiones son ($r_{CFmax}=30, 20, 10$ nm, $C_{CF0}=1\%$). 125
- 83 (a) Distribución de V_{RESET} y V_{TH_RESET} extraída de 2000 curvas I-V de procesos de *reset* experimentales consecutivos para el dispositivo Ni/HfO₂/Si-n⁺ (sección 4.3). (b) V_{TH_RESET} en función de V_{RESET} para los 2000 ciclos. Se ha obtenido una relación lineal entre estas dos variables con un coeficiente de correlación R=0.956. 126
- 84 V_{RESET} (a) e I_{RESET} (b) en función del ciclo *set/reset* realizado. La serie de ciclos *set/reset* que se muestra se ha realizado aumentando la temperatura 30 °C cada 50 ciclos aproximadamente. Las medidas experimentales se corresponden con una celda RRAM tipo Ni/HfO₂/Si-n⁺ (ver sección 4.3.2) y se han representado con símbolos huecos mientras que los resultado simulados se han representado mediante símbolos rellenos. Para hacer más patente el descenso de V_{RESET} e I_{RESET} con los ciclos se ha añadido una línea morada que sigue el comportamiento medio de todos los ciclos. 129
- 85 V_{RESET} (a) y I_{RESET} (b) en función del ciclo *set/reset* realizado. Se han realizado 2500 ciclos *set/reset* manteniendo la temperatura externa fija a 300 K durante todo el proceso de medida. La línea roja indica el comportamiento medio de todos los resultados obtenidos que deja patente que no hay ninguna variación de comportamiento medio con el paso de los ciclos que se realicen a una RRAM. 130
- 86 Corriente en función de la tensión aplicada para dos celdas RRAM distintas variando la temperatura externa. Las líneas continuas se corresponden con una celda de un solo CF (con forma de tronco de cono) cuyo radio máximo es de 30 nm y 1.5 nm de radio mínimo. Las líneas discontinuas se corresponden con un CF con un radio máximo de 5nm cuya parte más estrecha tiene un radio de 1.75 nm. 131
- 87 (a) Corriente en función de la tensión aplicada manteniendo la temperatura externa fija ($T_{EXT} = 300$ K). (b) Temperatura máxima del CF en función de la tensión aplicada. La influencia de la difusión de la especie metálica (controlada por el parámetro k_{diff}) y la dependencia térmica de la conductividad eléctrica del CF (controlada por el parámetro α_T) en la forma y evolución de la corriente se pone de manifiesto. 132
- 88 Diferencia entre V_{RESET} y V_{TH_RESET} en función de la temperatura externa para tres celdas de un solo CF con forma de tronco de cono. Sim 1 se corresponden con una celda cuyo CF tiene $r_{CFmax}=30$ nm y $C_{CF0} = 5\%$, Sim 2 se corresponde con CF de $r_{CFmax}=10$ nm y $C_{CF0} = 15\%$ y Sim 3 se corresponde con $r_{CFmax}=5$ nm y $C_{CF0} = 35\%$ 133

- 89 Resistencia para las tensiones de 0.5 V (símbolos rellenos) y 1.0 V (símbolos huecos) en función de la temperatura externa. En ambos casos se ha usado una estructura de conducción con un solo CF con forma de tronco de cono cuyas dimensiones son: (a) $r_{CFmax} = 23$ nm y $C_{CF0} = 12\%$ y (b) $r_{CFmax} = 10$ nm y $C_{CF0} = 30\%$. Se han representado las principales componentes de la resistencia total de la RRAM: resistencia del CF (R_{CF}), resistencia de los caminos cuánticos modelados mediante el modelo QPC (R_{QPC}) y la resistencia de Maxwell (R_M). 134
- 90 Corriente en función de la tensión aplicada para diferentes temperaturas externas. Los resultados experimentales (línea discontinua) y simulados (línea continua) que se muestran se corresponden con una misma celda RRAM en estado LRS, con la misma estructura de conducción en todos los casos. En la leyenda, junto a las líneas discontinuas se indican las temperaturas externas usadas en cada medida y junto a las líneas continuas los valores del parámetro α del modelo QPC usado en cada simulación. 136
- 90 Curvas I-V de *set* de una celda de Ni/HfO₂/Si-n⁺. Inicialmente la conducción se lleva a cabo a través del óxido ya que la estructura de conducción se encuentra cortada. Este proceso se ha modelado como una corriente de Poole-Frenkel. Simultáneamente la estructura de conducción se ha ido reconstruyendo produciendo un brusco incremento de la intensidad cuando ésta se reconstruye. 138
- 92 Conjunto de curvas I-V experimentales de *set* de una celda de Ni/HfO₂/Si-n⁺ correspondientes a 2000 ciclos *set/reset* consecutivos. Inicialmente esta celda se encuentra en estado de HRS con lo que la conducción de corriente que se observa hasta el salto abrupto de corriente, donde se vuelve a reconstruir el CF, no se puede producir través de los CFs sino a través de corrientes relacionadas con otros mecanismos. 139
- 93 Intensidad en función del ciclo para una tensión $V_{app} = 1.5$ V. Aunque los valores de la intensidad varían entre 10^{-6} y 10^{-8} A en la mayoría de los casos, la variación entre ciclos consecutivos tiene un carácter cuasi-aleatorio. En la figura interior se muestran los ciclos desde el 300 hasta el 450 por claridad. 140
- 94 (a) Curva I-V y (b) concentración de la especie metálica de la zona más estrecha del CF en función de la tensión aplicada para un proceso de *set*, obtenidas mediante simulación. Por encima de 2 V se refuerza la reacción química de reducción que inicia la reconstrucción del CF, que inicialmente se encuentra cortado. Una vez que el grosor mínimo del CF supere el valor del radio atómico, r_{at} (ver Tabla 2) vuelve a conducir. 142

- 95 (a) Curva I-V y (c) curva de temperatura del CF simuladas del proceso de *set* en el que se ha establecido una intensidad límite ($I_{compliance} = 0.1$ mA) a la cual se termina el proceso de medida. En (b) tenemos la evolución de la concentración de la especie metálica de la zona más estrecha del CF en función de la tensión aplicada. Una vez que el grosor mínimo del CF supere el valor del radio atómico, r_{at} (ver Tabla 2) el CF vuelve a conducir. 143
- 96 Intensidad de *set* en función de la tensión de *set* correspondientes con 2000 ciclos experimentales, para dispositivos basados en la estructura Ni/HfO₂/Si-n⁺. 144
- 97 Curvas I-V experimentales (símbolos) y sus correspondientes simulaciones (líneas continuas) correspondientes a la celda RRAM tipo Ni/HfO₂/Si-n⁺. Los resultados obtenidos mediante simulación son compatibles con las medidas experimentales. 145
- 98 Esquema de la estructura de conducción formada por la unión de diferentes bloques. En (a) se muestra un dispositivo con un solo filamento mientras que en (b) se representa una celda cuya estructura de conducción tiene forma de árbol con tres ramas. 147
- 99 (a) Modelo simplificado de la estructura de conducción de una celda RRAM. (b) Esquema de la aproximación de la estructura de conducción usada en el macromodelo circuital donde los CFs se modelan mediante unos bloques interconectados. En (c) se muestra el subcircuito basado en SPICE usado para modelar cada bloque. 149
- 100 T_{reset} en función del valor de la pendiente de la rampa de tensión que se aplica a la celda. Los datos mostrados en esta gráfica se han calculado a partir de la Ecuación (85). Los valores de los parámetros de caracterización de la celda RRAM tipo Cu/HfO₂/Pt son los que se muestran en la Tabla 5. . 155
- 101 Curvas I-V de *reset* obtenidas para distintos valores de la pendiente de la rampa de tensión aplicada. Para estas simulaciones se ha usado la celda RRAM tipo Cu/HfO₂/Pt descrita en la sección 4.2. Las líneas continuas se corresponden con los resultados obtenidos por el simulador SIM²RRAM mientras que las líneas discontinuas se han obtenido empleando el modelo circuital. 157
- 102 Curvas I-V de *reset* para estructuras de conducción de un único CF con distintos grosores. En todos los casos se ha usado una pendiente de la rampa de tensión fija de 0.1 V/s. Las líneas continuas se corresponden con los resultados obtenidos por el simulador SIM²RRAM mientras que las líneas discontinuas se han obtenido con el modelo circuital. 158

- 103 Curvas I-V experimentales obtenidas para un dispositivo RRAM unipolar [100] (símbolos) y su curva simulada asociada (línea). Los valores de los parámetros de caracterización de la celda se muestran en la Tabla 17 mientras que la pendiente de la rampa de tensión usada es de 1 V/s. En la figura interior se muestra la forma y composición de la estructura de conducción usada, cuyas dimensiones se muestran en la Tabla 18. 159
- 104 Temperatura a lo largo de toda la estructura de conducción calculada a partir de las simulaciones hechas con el simulador circuital. En (a) se muestra la distribución de temperaturas cuando $V_{app}=0.45$ V, en (b) cuando $V_{app}=0.55$ V, (c) a $V_{app}=0.65$ V y en (d) para $V_{app}=0.85$ V. La temperatura, en escala de colores, se da en grados Kelvin. 161
- 105 (a) Curva I-V de *reset* simulada para la estructura de conducción descrita en la Tabla 19. En (b) se muestra la distribución de temperaturas a lo largo de toda la estructura de conducción calculada a la tensión de 0.73 V. 162
- 106 Curvas I-V simuladas para la misma estructura descrita en la Tabla 18. El radio de la rama d varía desde 0.5 nm hasta 11.5 nm aplicando incrementos de 1 nm. 163
- 107 Línea en la que se define la función $f(z)$ con N puntos con una separación entre ellos de Δz . Para la resolución de la ecuación del calor (Ec. (A12)), los puntos Z_0 y Z_{N+1} se corresponden con los electrodos. 170

Prólogo

Actualmente uno de los nichos de mercado más importantes en la industria microelectrónica es el de memorias no volátiles. Los cambios producidos en las costumbres de los usuarios promovidos por la revolución de la tecnología portátil y el aumento de la cantidad de información que generamos y almacenamos han puesto estas memorias en primera línea de ventas e investigación.

En la última década, el mercado de las memorias no volátiles ha estado plenamente dominado por memorias de tipo Flash (ver sección 1.1.1), tanto en su arquitectura NOR como NAND. Sin embargo, en los últimos años se viene anunciando que el escalado de estas memorias pronto alcanzará límites a partir de los cuales se presentan efectos que dificultarán o impedirán por completo su operación: corriente SILC (*Stress Induced Leakage Current*), ruido de tipo telegráfico RTN (*Random Telegraph Noise*), atrapamiento de carga y desplazamiento de la tensión umbral [1] (ver sección 1.1.2). Además de los problemas de funcionamiento interno de cada celda, también están apareciendo otros de funcionamiento de las memorias debido al aumento de la integración de las celdas dentro de la matriz de la memoria, es decir, el aumento del número de celdas por unidad de superficie. Esto hace que aparezcan capacidades parásitas como consecuencia de acoplamientos de dos celdas adyacentes que ya se encuentran demasiado cercanas entre sí [2, 3]. A este tipo de efectos de acoplamiento se les conoce como *Cross-Talk*.

En los últimos años se están proponiendo algunas alternativas para sustituir la arquitectura Flash por otra que solucione estos problemas (ver sección 1.2). Un grupo de trabajo perteneciente al comité que elabora el conocido ITRS (*Internacional Technology Roadmap for Semiconductor*) se encargó de evaluar diferentes tipos de memorias en desarrollo y sus prestaciones para discernir cuáles presentarían mejores condiciones para sustituir a las memorias Flash para su fabricación en masa con fines comerciales [4]. Destacaron dos tecnologías como las candidatas más firmes: memorias de tipo magnetorresistivo con transferencia de spin mediante unión túnel magnética (STT-MRAM, *Spin-Transfer Torque-Magnetoresistive RAM*) y memorias de tipo resistivo, RRAMs (*Resistive Random Access Memory*) [4]. No obstante, muchas personalidades en el contexto de la industria han pronosticado el futuro auge de la tecnología RRAM:

En el IEDM de 2010 el vicepresidente sénior de Hynix Semiconductor Inc. Sung Joo Hong declaró: “*RRAM can be one of the suitable candidates for a storage application due to its possibility of multi-stackable crosspoints.*”

Durante la *Flash Summit* de 2011 el vicepresidente ejecutivo de SanDisk Corp. dijo: “*3D RRAM technology development shows the best promise for a scalable post- NAND technology.*”

En el ISSCC (International Solid-State Circuits Conference) de 2013, el ingeniero de diseño de SanDisk Corp. Tz-Yi Liu afirmó en uno de los trabajos que presentaron [5]: “RRAM has been considered one of the potential technologies for the next generation nonvolatile memory, given its fast access speed, high reliability, and multi-level capability.”

El interés que han despertado estas memorias se refleja también en el elevado número de publicaciones¹ que han aparecido en los últimos años. Además, en las últimas ediciones del congreso de referencia mundial en el campo de los dispositivos electrónicos IEDM (*International Electron Device Meeting*), los dispositivos con más contribuciones asociadas fueron las RRAM. Por último, numerosas empresas privadas como Crossbar, Sony, Panasonic, HP, Towerjazz... han puesto también su mirada, y su dinero, en esta nueva tecnología.

Las memorias RRAM (también conocidas como ReRAM) basan su funcionamiento en la conmutación entre estados de diferente resistencia (*Resistive Switching, RS*) (ver Capítulos 2 y 8). Hay varios tipos de memorias RRAM, según el mecanismo físico-químico involucrado en la conmutación entre los estados de alta y baja conductividad (ver sección 1.3). En la mayoría de los casos los dispositivos son extremadamente simples de fabricar (consisten en dos contactos metálicos o semiconductores con un óxido en medio) y con una alta compatibilidad con la tecnología CMOS. Con dos niveles de tensión diferentes se pueden forzar las transiciones entre los estados de alta y baja resistividad. La sencillez de funcionamiento y fabricación les da unas perspectivas extremadamente atractivas para abordar con éxito las necesidades de escalado a las que se enfrentarán en el contexto tan competitivo de la industria electrónica actual. Además, su alta velocidad de conmutación también las postula como buenas candidatas para nuevos nichos tecnológicos. Sin embargo, los principios físicos y químicos involucrados en las transiciones todavía no han sido del todo clarificados.

Con el fin de contribuir al desarrollo de esta prometedora tecnología, en el contexto de esta tesis doctoral se ha desarrollado un simulador macroscópico para este tipo de dispositivos al que hemos llamado SIM²RRAM (ver Capítulo 3) [6, 7]. A partir de los resultados obtenidos, y su comparación con resultados experimentales, se ha realizado un modelado y análisis del funcionamiento interno desde el punto de vista estructural, térmico y eléctrico. Estos estudios se han hecho sobre dos tipos de celdas de memoria RRAM: Cu/HfO₂/Pt (ver sección 4.2) fabricados por el *Laboratory of Nanofabrication and Novel Device Integration, Chinese Academy of Sciences* que presentan un comportamiento lineal a bajas tensiones, y la celda Ni/HfO₂/Si-n⁺ (ver sección 4.3) fabricada en el *Departamento de Micro y Nanosistemas del IMB-CNM (CSIC) de Barcelona* cuyo comportamiento es no lineal en el mismo rango de tensiones.

¹ Número de resultados obtenido, por año, de la búsqueda del término “RRAM” en:

Google Académico: 542 (2008), 381 (2009), 1330 (2010), 840 (2011), 1600 (2012), 1230 (2013) y 1250 (2014).

IEEE Xplore: 22 (2008), 35 (2009), 63 (2010), 119 (2011), 137 (2012), 169 (2013) y 193 (2014).

ScienceDirect: 14 (2008), 22 (2009), 25 (2010), 52 (2011), 43 (2012), 93 (2013) y 98 (2014).

Además del estudio de los mecanismos físicos que definen procesos de RS también se ha analizado su dependencia con la temperatura externa al dispositivo (ver Capítulo 6) [8]. Del mismo modo, para la RRAM tipo Ni/HfO₂/Si-n⁺ se ha estudiado en detalle la relación existente entre las dos componentes resistivas que dan lugar al comportamiento no lineal de este tipo de celdas. En este estudio se ha definido un nuevo parámetro, al que hemos llamado Tensión Umbral del proceso de *reset* (V_{TH_RESET}), accesible experimentalmente y que permite obtener información sobre la relación de las dos componentes resistivas (ver Capítulo 6).

Desde el punto de vista de la implementación de estas celdas RRAM dentro de una estructura mayor, es necesario contar con herramientas eficaces tanto para la detección de la tensión a la que se produce la conmutación resistiva (ver Capítulo 5) como para el desarrollo de estos sistemas electrónicos. Unas de las plataformas más usadas para el diseño de estos sistemas es SPICE. Por este motivo, también hemos iniciado el desarrollo de modelos compactos circuitales [9], para la simulación en esta plataforma, usando como base algunos de los modelos implementados también en el simulador SIM²RRAM (ver Capítulo 9).

Aunque esta tesis se centra en el estudio de las RRAM como memorias, estos dispositivos también forman parte de un grupo mayor que han despertado un gran interés en los últimos años: los memristores. Los memristores son básicamente resistencias que tienen memoria, es decir, que es posible alterar sus características de manera contralada y posteriormente revertir este proceso hasta llegar a su estado inicial. Su existencia fue predicha por L. Chua a finales de los años sesenta. Este investigador desarrolló el análisis matemático de los memristores que sigue vigente a día de hoy. No obstante, hasta el año 2008 no se había podido fabricar ningún dispositivo que cumpliera las características de un memristor. Fue entonces cuando científicos de HP, que se encontraban trabajando en aislantes basados en óxido de titanio, encontraron este comportamiento en sus nuevos dispositivos. Desde entonces se han fabricado muchos tipos de memristores diferentes y se han estudiado sus características. En particular el mismo L. Chua describió en una publicación el por qué se puede considerar una RRAM como un memristor [10]. Estos dispositivos son especialmente interesantes para aplicaciones en circuitos neuromórficos, emulando el funcionamiento de algunos procesos biológicos, como por ejemplo, los que tienen lugar en las uniones sinápticas neuronales. Los circuitos neuromórficos abren un nuevo universo en el campo de la computación, en su vertiente analógica. Además, pueden favorecer la fabricación de sistemas inteligentes distribuidos, a diferencia de los esquemas actuales donde existe un procesador y una memoria definidos claramente en la arquitectura de los sistemas. En la comunidad científica actual hay esperanza de que la computación basada en memristores necesite mucha menos energía que la consumida hoy día por las arquitecturas actuales. En este reto, donde la investigación y el desarrollo irán de la mano en los próximos años, las RRAM jugarán un papel esencial.

1

Introducción

1.1 Memorias no volátiles.

La actual tecnología de memorias NAND Flash es una de las fuentes de ingresos más importantes a nivel mundial en el contexto de la industria de los semiconductores. Los beneficios de este sector superaron los 20.000 millones de dólares en 2013 y se prevé que no dejen de aumentar en los próximos años (ver Figura 1) según las consultoras IHS Technology [11] y Gartner, Inc [12]. Estos beneficios vienen principalmente impulsados por la venta de dispositivos portátiles (*Smartphone, tablets, wearables,...*) y, en el último año, por el auge de los SSD (*Solid-State Drive*) como soportes de memoria masiva en los PCs domésticos.

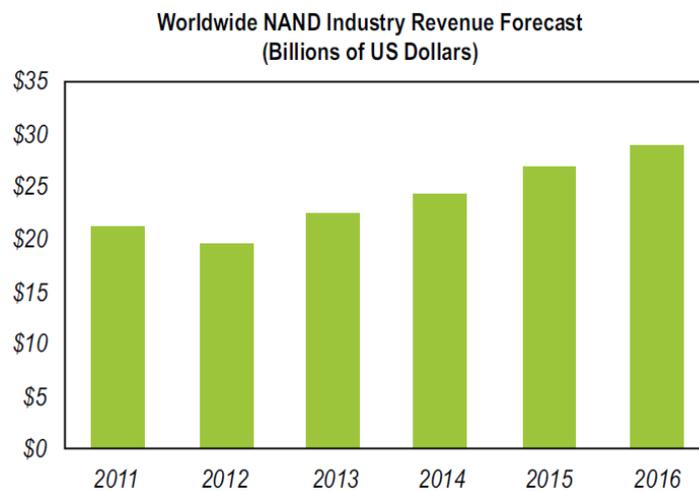


Figura 1: Ingresos y previsión de ingresos de la industria NAND [11].

Este éxito se debe a que se ha hecho posible el transporte y el manejo de información en las dos últimas décadas de una forma sin precedentes gracias a esta tecnología. El tamaño de celda de las memorias Flash ha disminuido en un factor dos cada año, siguiendo la conocida Ley de Moore, con una reducción considerable del precio [13]. Una clara muestra de la evolución de la capacidad, el tamaño y el precio de las memorias en los últimos 20 años se puede ver en la Figura 2.



Figura 2: Comparativa del tamaño y el precio de las memorias en 1980 y 2010 [14].

1.1.1 Tecnología actual. Memorias Flash.

La celda de memoria Flash, creada por Fujio Masuoka para Toshiba en los años 80 [15], fue una evolución de las memorias EEPROM (*Electrically-Erasable Programmable Read Only Memory*) ya existentes en esos años. La gran mejora de la tecnología Flash frente a su predecesora es la posibilidad de escribir o borrar bloques de celdas enteros al mismo tiempo en lugar de hacerlo celda a celda. De este modo se pudieron mejorar las velocidades de escritura/borrado lo que las hizo muy versátiles.

Esta tecnología está basada en el transistor MOSFET con puerta flotante o también conocido como transistor FAMOS (*Floating Gate Avalanche-injection MOS*). Este dispositivo no es más que un transistor MOSFET convencional al que se ha añadido una puerta adicional, conocida como Puerta Flotante (FG, *Floating Gate*), debajo de la Puerta de Control (CG, *Control Gate*) como se puede ver en la Figura 3.

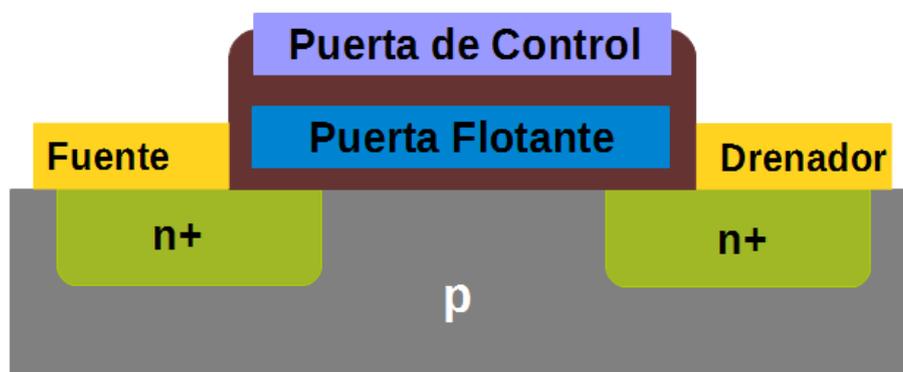


Figura 3: Esquema del transistor MOSFET con puerta flotante o también conocido como FAMOS (*Floating Gate Avalanche-injection MOS*).

Esta puerta flotante se encuentra aislada eléctricamente de los demás terminales debido a que está incrustada dentro del óxido. Al inyectar electrones calientes desde el canal en la puerta flotante mediante la inducción de un fuerte campo eléctrico entre la puerta de control y el drenador, se produce una alteración de la tensión umbral² del transistor (V_T) [16, 17]. Esto es posible debido a que la carga almacenada en la puerta flotante apantalla el efecto de la puerta de control sobre el canal del transistor (ver Figura 4). Es decir, la carga almacenada cancela parcialmente el campo que se genera al aplicar una tensión a la puerta de control haciendo necesario un potencial mayor (V_{T2}) para formar el canal de conducción dentro del transistor [18]. Al estar la puerta flotante aislada eléctricamente una vez que se han inyectado los electrones en ella éstos permanecen allí de forma permanente. Estrictamente hablando, los electrones permanecen en la puerta flotante alrededor de unos 10 años, lo que se considera un tiempo suficientemente largo como para considerar que el almacenamiento de la información es permanente.

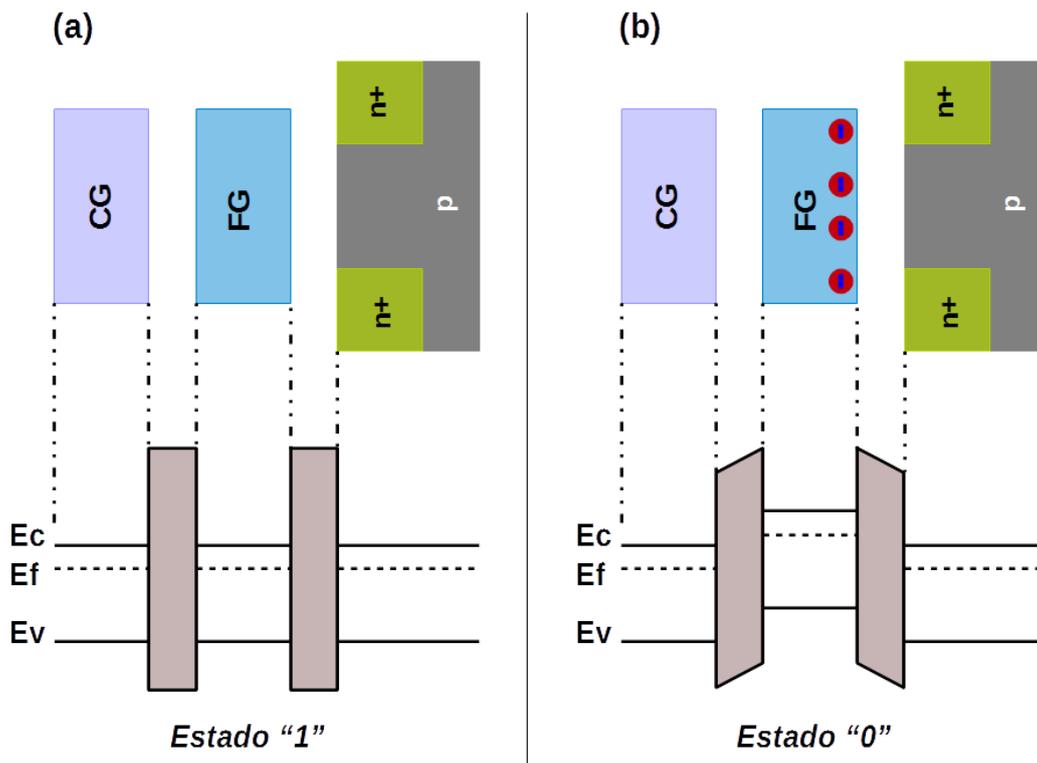


Figura 4: Diagrama de las bandas de energía (parte inferior) referido a la estructura de un transistor MOSFET con puerta flotante (parte superior) [18]. (a) se corresponde con el estado lógico "1" del transistor donde la FG está descargada y en (b) tenemos el estado "0" al que se llega cargando la FG.

² Mínima tensión de puerta necesaria para crear el canal de inversión en un transistor MOSFET.

En cada una de estas celdas se puede almacenar una unidad de información lógica, 0s ó 1s, cargando o descargando la puerta flotante. Si la FG está cargada y aplicamos una tensión a la puerta de control V , siendo $V_T < V < V_{T2}$ (ver Figura 5), no se logrará crear el canal de conducción en el transistor y éste no conducirá con lo que se registrará ningún paso de corriente, es decir, se tiene almacenado en este caso un 0 lógico. Por el contrario, si la FG está descargada, con esa misma tensión lograremos que sí haya conducción a través del transistor, lo que indica que hay almacenado un 1 lógico.

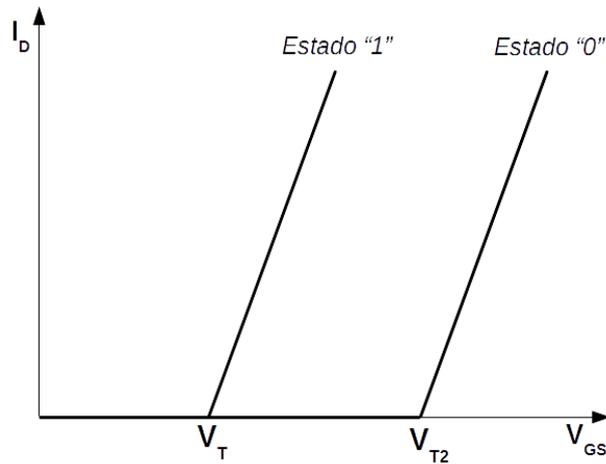


Figura 5: Curvas I_D - V_{GS} de respuesta característica del transistor MOSFET con puerta flotante para los estados 1 y 0 lógicos. Al cargar o descargar la puerta flotante la tensión umbral del dispositivo varía.

Inicialmente el borrado de estos dispositivos, es decir, la extracción de los electrones de la FG, se realizaba mediante la aplicación de fuertes campos eléctricos haciendo que los electrones atravesaran la fina capa de óxido de la parte inferior de la FG. Al ser este proceso agresivo con el óxido, con lo que se acorta considerablemente la vida de la celda, en 1985 Mukherjee et al. propusieron un nuevo tipo de transistor llamado ETOX [19]. Este nuevo dispositivo tenía la peculiaridad de que los procesos de carga y descarga de la FG (escritura y borrado) se realizan en regiones opuestas de la FG (escritura por el lado del drenador y borrado por el lado de la fuente), lo que resulta menos agresivo para la celda. Esto es posible mediante la creación de una CG asimétrica que permite la disminución del espesor de óxido que deben de atravesar los electrones al salir de la FG (ver Figura 6).

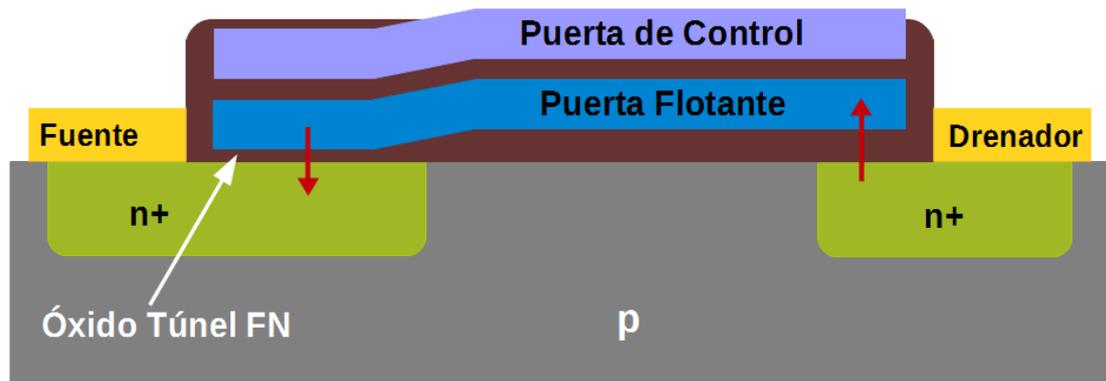


Figura 6: Esquema del transistor ETOX usado en las memorias Flash actuales. El proceso de escritura se realiza mediante la inyección de electrones calientes desde el lado del drenador. El proceso de borrado se lleva a cabo mediante la extracción de los electrones de la FG por efecto túnel Fowler-Nordheim (FN) por el lado de la fuente.

El proceso de escritura se realiza de la misma manera que se realiza para las celdas FAMOS. Sin embargo, el proceso de borrado de la celda, es decir, la extracción de los electrones de la puerta flotante, se realiza mediante procesos túnel en régimen Fowler-Nordheim (FN) [20, 21] a través del estrecho “óxido túnel FN” (ver Figura 6). En este caso, el fuerte campo eléctrico encargado de extraer los electrones de la FG se obtiene conectando la CG a tierra y aplicando una tensión alta a la fuente.

Aunque la celda ETOX creada por Mukherjee es la base de las celdas que se usan en la actualidad para las memorias Flash, éstas no han dejado de ser modificadas por las distintas compañías, ya sea para la mejora de sus prestaciones o para adaptarlas a la arquitectura de sus dispositivos [22, 23, 24].

1.1.2 Limitaciones de la tecnología Flash.

Como ya se ha comentado anteriormente, la reducción del tamaño de las celdas de memoria con tecnología Flash no puede ser indefinida. De hecho, está muy cerca el fin de su recorrido tecnológico debido a los numerosos problemas de pérdida y/o fluctuación de carga que están surgiendo en su escalado por debajo de los 25 nm. Algunos de estos problemas son [1]:

- *SILC (Stress Induced Leakage Current)*: La programación intensiva de las celdas produce defectos en el óxido. Al ser los óxidos que se usan excesivamente delgados, estos defectos actúan como niveles intermedios para que los portadores puedan escapar de la puerta flotante hacia la puerta. Esta pérdida de carga hace que la tensión umbral (V_T) de la puerta se altere descontrolándose así la respuesta de la celda.

- *Cargas atrapadas en el óxido*: El almacenamiento de carga en las memorias NAND se hace a través de altos campos eléctricos que arrastran carga hacia la puerta flotante a través del óxido. Esto produce inevitablemente que aparezcan cargas en el aislante que se quedan atrapadas en el óxido con el paso de los ciclos. Estas cargas acaban generando un apantallamiento de la carga almacenada en la puerta flotante dando como resultado la modificación de la tensión umbral y el mal funcionamiento del dispositivo.
- *Ruido telegráfico aleatorio (RTN)*: La aparición de trampas en el óxido también afecta al proceso de lectura. A través de estas trampas se produce una fuga de portadores que produce fluctuaciones aleatorias de la corriente durante el proceso de lectura.
- *Capacidades parásitas (Cross-Talk)*: La excesiva cercanía de las celdas vecinas produce el acoplamiento de las capacidades entre las puertas flotantes. Este acoplamiento es especialmente sensible cuando se trabaja con un número bajo de electrones donde el nivel de V_T debe ser muy estricto [2, 3].

En definitiva, al hacer trabajar las celdas con muy pocos portadores (consecuencia directa de reducir el tamaño de la misma), la aparición de estos efectos modifican los parámetros característicos de la celda de manera notable, haciéndola incontrolable.

En la actualidad se han hecho intentos de mejora la capacidad de las memorias Flash sin tener que disminuir su área introduciendo las celdas multinivel (*multi-level cell*, MLC). Esto ha conseguido que se extienda su capacidad en un factor dos manteniendo el área, pudiendo en un futuro aumentar hasta un factor ocho. Sin embargo, el uso de celdas MLC ha tenido como resultado, en muchos casos, la amplificación de los efectos nocivos anteriormente mencionados. Para intentar solucionar estos problemas se ha recurrido a la implementación de algoritmos de verificación que controlen la estabilidad del funcionamiento de la celda a lo largo de los ciclos. Sin embargo, esto tiene como consecuencia la degeneración del tiempo de retención³ y durabilidad⁴, con lo que esta estrategia no parece una solución de futuro.

1.2 Dispositivos emergentes para memorias no volátiles.

Al igual que sucede con otros dispositivos electrónicos, las limitaciones de la tecnología Flash expuestas en el apartado anterior han llevado a la industria de los semiconductores a abordar tres posibles líneas de avance para solventar la actual situación. Uno de estos caminos sería el desarrollo de nuevos materiales que permitan continuar explotando la actual tecnología CMOS más allá del escalado (lo que se conoce como “*More Moore strategy*”), mejorando, por ejemplo, las velocidades de los dispositivos, la densidad de

³ Tiempo que el dispositivo puede almacenar la información sin que esta se degrade o pierda.

⁴ Tiempo o número de ciclos de escritura/borrado que el dispositivo puede aguantar sin ver alterado su funcionamiento.

almacenamiento y disminuyendo la potencia consumida. La segunda línea de desarrollo consistiría en la utilización de la tecnología CMOS en combinación con nuevas arquitecturas que permitan el procesamiento de la información más allá de lo que se consigue en la actualidad. Por último, lo que será el tema de esta tesis doctoral, desarrollar nuevos dispositivos con principios de funcionamiento diferentes (lo que se conoce como “*More than Moore strategy*”) y que sustituyan a los actuales dando una solución a largo plazo sin alterar en gran medida los procesos de fabricación usuales.

Actualmente existen varias candidatas (Figura 7) llamadas a sustituir a la actual tecnología de memorias.

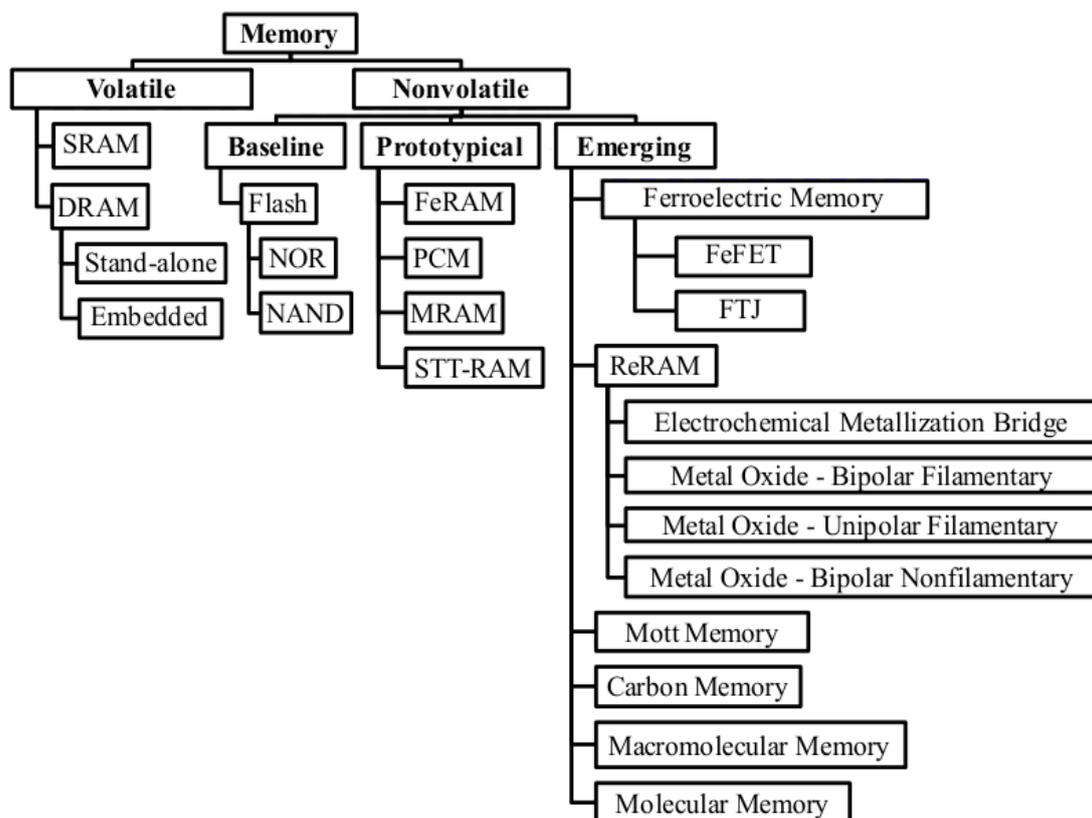


Figura 7: Diagrama con los diferentes tipos de memorias existentes, los que están en fase de prototipado y los dispositivos emergentes que se están valorando en la actualidad como posibles alternativas [25].

Memorias Ferroeléctricas.

En este grupo existen dos clases de memorias emergentes: las Ferroeléctricas FET (*Field-Effect Transistor*, FeFET) y las de Unión Túnel Ferroeléctrica (FTJ, *Ferroelectric Tunnel Junction*).

En las celdas FeFET se acopla un condensador ferroeléctrico a la puerta de un transistor FET como se ve en la Figura 8. La polarización que se produce en el ferroeléctrico modifica de manera definida la distribución de carga en el canal, alterando así la corriente de salida del FET [26, 27]. El mayor inconveniente de este tipo de memorias es el tiempo de retención, ya que la fuga de corriente y los campos que se producen despolarizan el ferroeléctrico, eliminando así la información [28].

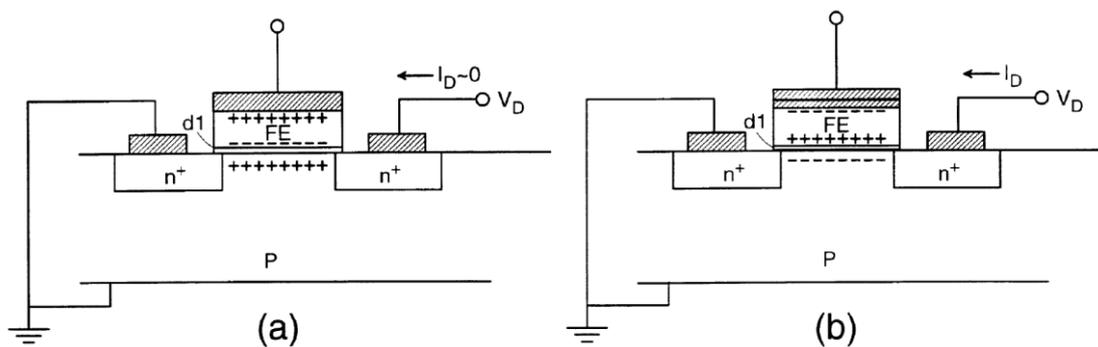


Figura 8: Esquema de una celda FeFET en el estado lógico cero (a) y en el estado lógico uno (b). La polarización del material ferroeléctrico (FE) altera la distribución de cargas del canal. Figura obtenida de [26].

Por otro lado, las memorias FJT están compuestas por dos electrodos entre los que se sitúa una capa delgada de un material ferroeléctrico por el cual circula corriente mediante un proceso dominado por el efecto túnel cuántico [29, 30]. La variación de la polarización del material ferroeléctrico mediante una tensión externa produce una alteración en el nivel de la barrera de potencial que controla el efecto túnel, dando lugar a una apreciable variación de la corriente túnel (ver Figura 9). Este tipo de memorias sí se encuentran en un estado relativamente avanzado de desarrollo pero aún quedan muchas pruebas para comprobar su verdadero potencial.

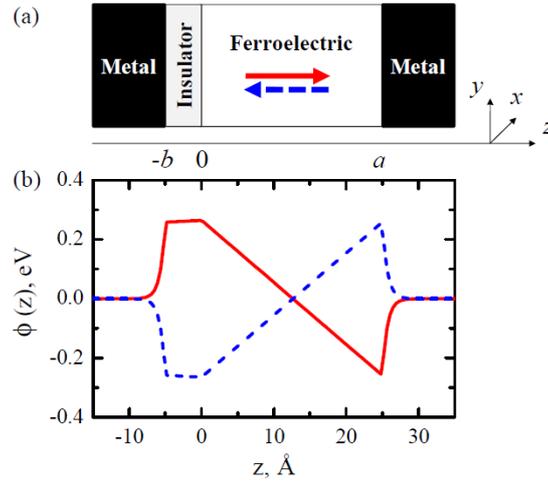


Figura 9: Geometría (a) y perfil del potencial electrostático (b) para dos orientaciones de polarización opuestas. La variación de la polarización del material ferroeléctrico produce una alteración en el nivel de la barrera de potencial que controla el efecto túnel. Figura obtenida de [31].

Memorias Mott.

Este tipo de memorias se basan en la transición entre metal y aislante en materiales con electrones correlacionados o materiales tipo Mott [32]. Esta transición de fase de primer orden⁵ permite que estos materiales presenten dos estados de resistencia determinados.

Cada celda tiene una estructura metal-aislante-metal (MIM), siendo el aislante un material Mott. Según el tipo de material que se use, la transición Mott viene inducida mediante la aplicación de un campo eléctrico, mediante la inyección de portadores [33] o por activación térmica [34].

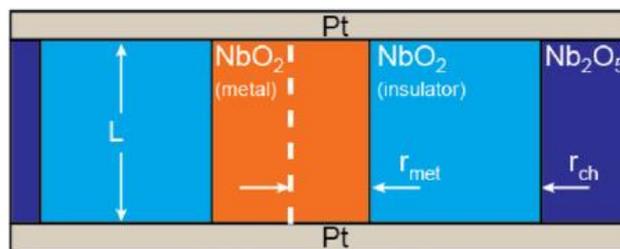


Figura 10: Esquema de la sección transversal de una celda tipo Mott. El canal está formado por dos fases: metal (zona naranja) y aislante (zona azul claro). La variación de la proporción de ellos altera la resistencia de la celda. Figura obtenida de [34].

⁵ Se dice de la transición de fase de un material en la que la primera derivada del potencial de Gibbs presenta una discontinuidad.

Aunque esta tecnología está mostrando algunos resultados interesantes, como tiempos de conmutación de 2.3 ns y energías del orden de los 100 pJ [34, 35], los tiempos de retención de estos dispositivos son aún una cuestión abierta. El control de los defectos y de la composición química espacial de las capas de electrones correlacionados es crucial ya que sus variaciones tienen un gran impacto sobre el funcionamiento del dispositivo. En resumen, a día de hoy, el control de la interfaz entre los electrodos y el material Mott es la cuestión principal a resolver de esta tecnología.

Memorias fabricadas con materiales basados en carbono.

Recientemente se han propuesto y estudiado diferentes materiales basados en carbono como el carbón amorfo, nanotubos de carbono, grafeno, etc. como alternativas para la fabricación de nuevas memorias [36, 37, 38]. Esto se debe a que usando estos materiales se puede conseguir conmutar su resistencia entre dos estados mediante varios mecanismos como son: la transición de sus electrones entre los estados orbitales sp^2 y sp^3 , de forma mecánica creando y rompiendo nanohuecos térmicamente, conducción asistida por trampas, etc. Un ejemplo del primer mecanismo lo mostramos en la Figura 11. En este caso, la unión consecutiva de un conjunto de átomos cuyo orbital electrónico se encuentra en el estado sp^2 permiten la creación de un camino conductor entre los dos electrodos consiguiendo así el estado de baja resistencia (LRS, *Low Resistance State*). Si este camino se rompe debido a que alguno o varios de los átomos pasan al estado sp^3 se conmuta hacia el estado de alta resistencia (HRS, *High Resistance State*).

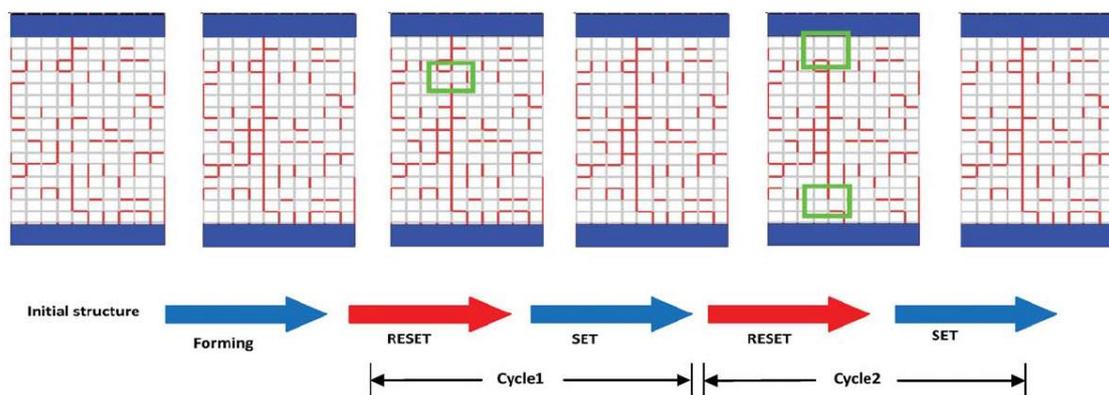


Figura 11: Esquema de la distribución de los orbitales sp^2 (segmentos rojos) y sp^3 (segmentos grises) en la estructura de carbono durante dos ciclos *set/reset*. La creación de un camino formado por átomos con orbitales sp^2 entre los dos electrodos permite alcanzar el estado de LRS. Figura obtenida de [38].

Aunque las propiedades que presentan estos materiales son muy prometedoras, aún se requiere una comprensión más profunda de éstos para que puedan ser aplicables a dispositivos comerciales.

Memorias Macromoleculares.

Este tipo de memorias están basadas en diodos túnel metal-aislante-metal (*MIM diode*) a los que se incorpora una capa de un polímero. Mediante la polarización de los terminales metálicos se consigue variar la resistencia del polímero. Este efecto se ha descrito para una gran variedad de polímeros pudiendo presentar un comportamiento tanto unipolar como bipolar [39, 40, 41]. Un esquema de una celda tipo de estos dispositivos lo mostramos en la Figura 12.

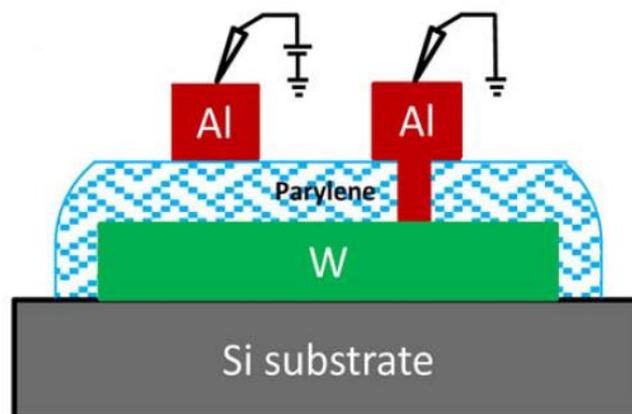


Figura 12: Esquema transversal de una celda de memoria macromolecular tipo Al/parylene-C/W. En esta celda se ha usado como polímero el poly p-xylylene (parylene-C). Figura obtenida de [40].

Uno de los escollos que aún se debe solucionar para este tipo de tecnología es que cada tipo de material polimérico presenta un mecanismo diferente de conmutación resistiva. Además, para otros muchos materiales poliméricos el origen de su conmutación resistiva no está claro. Debido a esta gran cantidad de materiales y procesos diferentes, esta tecnología aún requiere un gran trabajo y caracterización de los fenómenos que se ponen en juego.

Memorias Moleculares.

Las memorias moleculares se basan en el uso de una única molécula, o un pequeño grupo de ellas, como camino conductor entre dos contactos metálicos. Su operación se fundamenta en el cambio entre dos estados de conducción de una molécula mediante la aplicación de una tensión externa [42, 43, 44] como se muestra en la Figura 13.

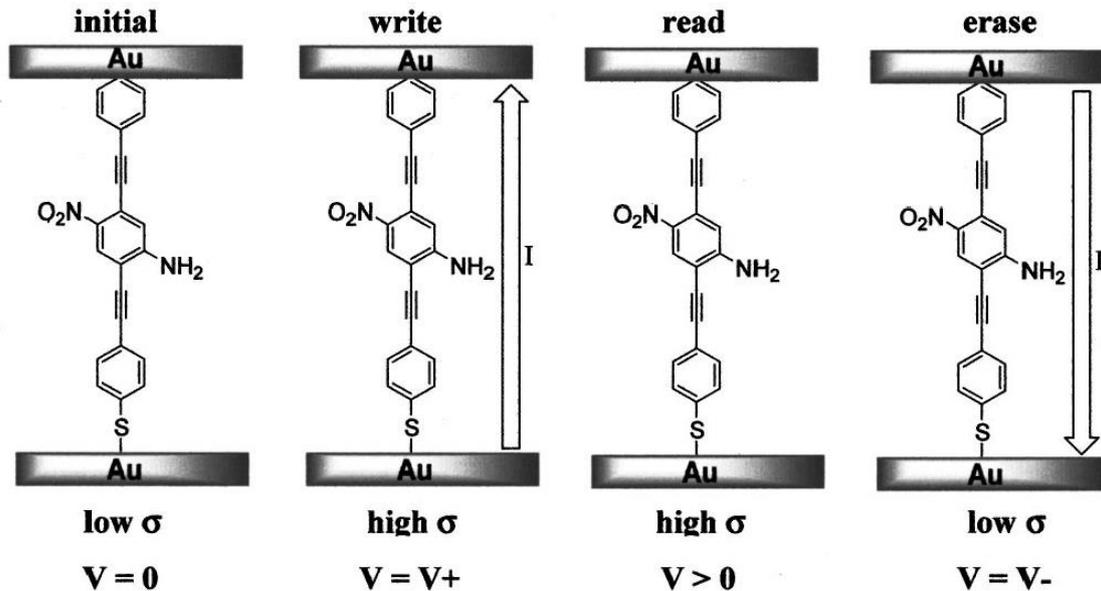


Figura 13: Esquema de operación de una celda molecular. Alterando el estado de conducción de la molécula que une los dos electrodos mediante la aplicación de un voltaje, se puede almacenar información de manera permanente. El proceso de escritura y borrado se realiza invirtiendo la polaridad de la tensión aplicada. Figura obtenida de [43].

Esta tecnología presenta como ventaja la gran escalabilidad debido a que se puede crear una celda de memoria del tamaño de unas pocas moléculas, permitiendo crear a su vez estructuras complejas más eficientes. Además, dado que todas las moléculas son iguales, su comportamiento también debe serlo, esquivando así los problemas de variabilidad en el comportamiento que presentan otras tecnologías actuales.

Sin embargo, hoy en día existen muchos interrogantes sobre el fenómeno de la conmutación eléctrica en moléculas por lo que es necesario en primer lugar crear unas sólidas bases de los fundamentos físicos que rigen este fenómeno.

Memorias RRAM.

Las memorias RRAM (*Resistive Random Access Memory*), también conocidas como ReRAM, son una de las líneas de investigación más importantes en el desarrollo de memorias no volátiles.

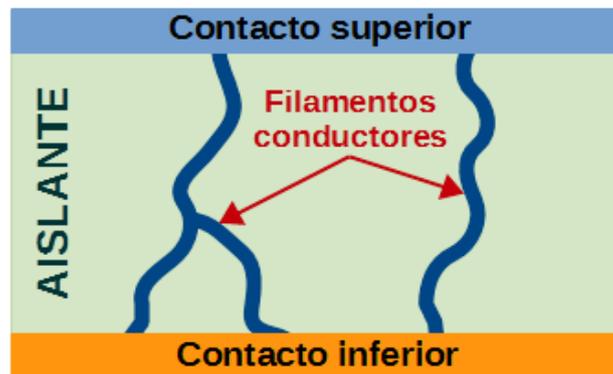


Figura 14: Esquema genérico de la estructura de una celda RRAM. Los filamentos conductores que se han formado dentro del aislante lo atraviesan cerrando el circuito entre los dos contactos metálicos creando así el estado de baja resistencia.

Cada celda de esta tecnología está formada por una estructura MIM (*Metal-Insulator-Metal*) o MIS (*Metal-Insulator-Semiconductor*) en la que el aislante es un material que tiene la propiedad de cambiar su resistencia (*Resistive Switching, RS*) desde el estado de alta resistencia (HRS, *High Resistance State*) a un estado de baja resistencia (LRS, *Low Resistance State*) (ver Figura 14). Los aislantes que se suelen utilizar son algunos tipos de óxidos (entre ellos óxidos metálicos), calcogenuros, semiconductores y materiales orgánicos, que pueden cambiar su resistencia mediante distintos mecanismos físicos (ver sección 1.3). Según el tipo de materiales que se utilizan en estas estructuras podemos encontrar tres comportamientos diferentes:

- *Unipolar*: tanto el paso del estado HRS al LRS o viceversa se lleva a cabo aplicando una tensión externa con la misma polaridad.
- *Bipolar*: en estos dispositivos es necesario invertir la polaridad de la tensión externa para conmutar de estado en un sentido u otro.
- *Mixta*: este tipo de dispositivos presentan ambos comportamientos, unipolar y bipolar. El que estos dispositivos muestren uno y otro comportamiento dependerá del rango de tensiones que se le apliquen y las condiciones iniciales del dispositivo.

En la Figura 15 podemos ver las curvas I-V de *set/reset* características de estos dispositivos si tienen un comportamiento unipolar (Figura 15a) o bipolar (Figura 15b).

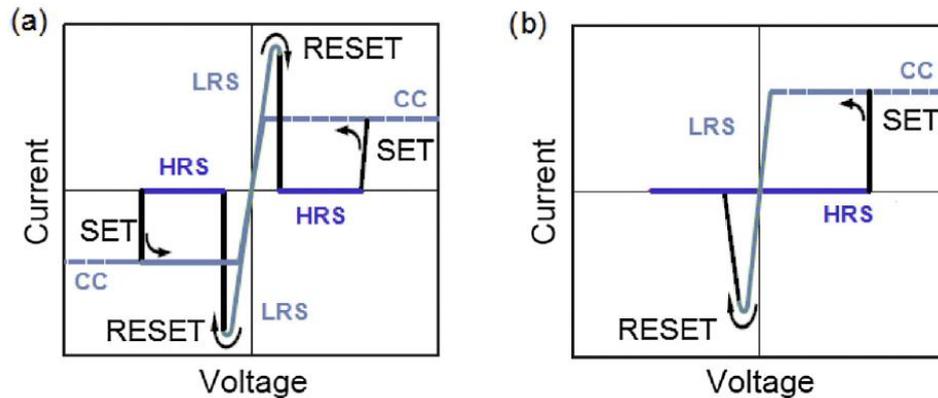


Figura 15: Esquema de la curva I-V característica de dos procesos de conmutación resistiva (RS): (a) RS unipolar tanto para tensiones positivas como negativas y (b) RS bipolar.

La simplicidad de la estructura de las RRAMs y la compatibilidad de muchos de los materiales usados en su fabricación con la tecnología CMOS hace posible su gran escalabilidad, como vemos en la Figura 16, sin alterar en gran medida los procesos de fabricación convencionales.

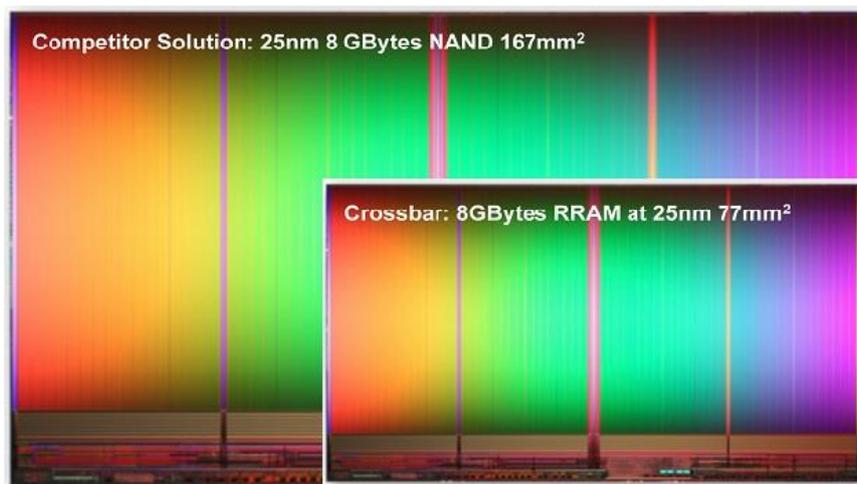


Figura 16: Comparativa del tamaño de dos memorias de 8GB usando tecnología de celdas NAND y celdas RRAM [45].

A la simplicidad de su estructura, lo que le permite un escalado por debajo de los 5 nm, hay que sumarle su bajo coste, su baja tensión de operación (~ 3 V), su baja potencia de disipación (~ 64 pJ/celda), su alta velocidad de procesamiento (~ 100 ns), la posibilidad de integración en estructuras 3D y su alta compatibilidad con las actuales tecnologías de fabricación [46].

Como se ha comentado anteriormente, otra de las características más importantes que presenta este tipo de dispositivos es la posibilidad de crear estructuras 3D. De este modo será posible la creación de memorias de alta densidad a un bajo coste debido a que se aumentará el área efectiva de cada celda, siendo ésta de $4F^2/n$ (siendo n el número de niveles o capas con RRAMs) [47, 48].

En la siguiente tabla se muestra una comparativa de las prestaciones que nos ofrece la tecnología RRAM en comparación con las de la NAND Flash.

Características	NAND Flash	RRAM*
Tamaño efectivo de celda	$5.44F^2$	$4.25F^2$
Escalabilidad	Hasta ~ 25 nm	< 5 nm
Velocidad de escritura	7 MB/s	140 MB/s
Lectura asíncrona	0.04 MB/s	17 MB/s
Energía de escritura/celda	1360 pJ/celda	64 pJ/celda
Resistencia	$3 \cdot 10^3$ ciclos	10^6 ciclos
Retención	1 – 3 años	20 años

Tabla 1: Comparativa de las principales características de las memorias NAND Flash y las RRAM. Los datos de las memorias RRAM se refieren a las fabricadas por la empresa de Crossbar [46].

1.3 Tipos de RRAM. Tecnologías.

El término RRAM o ReRAM engloba una familia de cuatro tipos específicos de memorias, cada una de ellas con un mecanismo físico distinto que hace posible el almacenamiento de una unidad de información alternando entre dos estados de alta y baja resistencia [49]. En la mayoría de casos las celdas de memoria están compuestas por una estructura metal-aislante-metal (MIM, *Metal-Insulator-Metal*) en la que se unen eléctricamente de manera reversible los dos contactos debido a uno o varios fenómenos físicos.

Los cuatro grupos son los siguientes:

Memorias RRAM con Puente de Metalización Electroquímica

Las celdas RRAM con puente de metalización electroquímica (EMB RRAM, *Electrochemical Metallization Bridge RRAM*), también llamadas en alguna bibliografía como CBRAM (*Conductive Bridge RAM*), se basan en una estructura MIM en el que el aislante tiene la capacidad de transportar iones. Los electrodos son electroquímicamente activos con lo que son capaces de producir iones al someter la celda a una tensión externa.

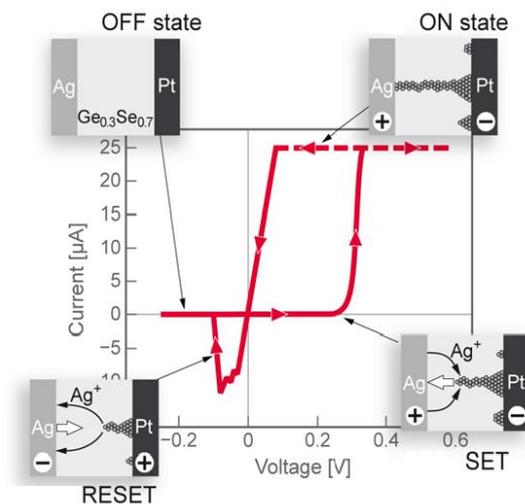


Figura 17: Ilustración del proceso *set/reset* bipolar para una celda de EMB [4].

Como vemos en la Figura 17, el estado de baja resistencia se consigue aplicando una tensión a la celda, siendo el ánodo el electrodo de plata y el cátodo el de platino. Esto produce la oxidación de los átomos de plata, que son inyectados a la zona electrolítica y transportados hasta que se depositan en el Pt. Esta acumulación de Ag crea un filamento que une los dos terminales creando un “camino” de baja resistencia. Al invertir la polaridad, este filamento se disuelve volviendo de nuevo al estado de alta resistencia.

Las EMB RRAM son unas de las memorias emergentes con más interés debido a su escalabilidad (~10 nm) [50], su baja energía de operación, los bajos tiempos de programación y las reducidas tensiones requeridas [51].

Memorias RRAM de cambio de valencia

Las celdas de memoria de cambio de valencia (VCM, *Valence Change Memory*) [52], conocidas también como celdas Óxido Metálico-Filamento bipolar RRAM (MO-BF

RRAM), presentan una estructura MIM asimétrica. Unos de los contactos, conocido como el contacto activo, se encarga de crear un interfaz donde se produce el cambio de resistencia. El otro electrodo tiene el papel de ser una fuente de vacantes de oxígeno. Son varios los óxidos que se pueden usar en este tipo de celdas, pero son el TaO_x y HfO_x los más utilizados debido a su eficiencia en los mecanismos RS y alta compatibilidad con la tecnología CMOS actual. La característica principal de estos óxidos sub-estequiométricos es su deficiencia de oxígenos, lo cual favorece el transporte del oxígeno.

En estos dispositivos la variación de resistencia se produce tras un primer pulso de corriente (*forming*) que crea un filamento entre los dos contactos con una alta concentración de vacantes de oxígeno que actúan como centros dopantes con lo que aumenta la conductividad de la región. Una vez formado este filamento conductor (CF) se cree que la conmutación de la resistencia se consigue alterando la concentración de estas vacantes de oxígeno mediante el campo que se crea al aplicar una tensión. A este fenómeno hay que añadirle otros efectos térmicos [52] que extraen o inyectan oxígenos desde o hacia los electrodos según la polaridad de la tensión aplicada.

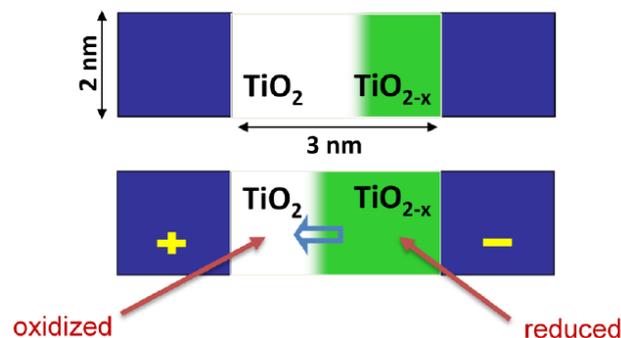


Figura 18: Ilustración del proceso de oxidación/reducción que produce los cambios de conductividad en las celdas VCM [4].

Memorias RRAM termo-químicas

En este tipo de estructuras, al igual que ocurría para los anteriores dispositivos, son varios los tipos de óxidos que se pueden usar como aislante, pero son el NiO_x y el HfO_x los más utilizados por su compatibilidad con la tecnología CMOS. En cuanto a los electrodos, no se requiere que tengan alguna característica especial ya que la conmutación de la resistencia se produce dentro del óxido. En general, las estructuras MIM suelen ser asimétricas pero, a diferencia de los otros casos, esto no es una condición indispensable.

Estos dispositivos tienen un comportamiento unipolar, es decir, que los procesos de *set* y *reset* pueden llevarse a cabo al aplicar a la celda una tensión con la misma polaridad en ambos casos. En las estructuras asimétricas la polaridad que se ha de aplicar dependerá del electrodo que se tome como referencia.

La conducción en estas celdas se realiza a través de aglomeraciones de defectos o átomos metálicos en el óxido que forman filamentos conductores. La destrucción de estos mediante la oxidación de los filamentos y la difusión térmica de los iones produce el estado de alta resistencia. Por otro lado, la reducción del óxido vuelve a reconstruir el filamento recuperando así el estado de baja resistencia. En definitiva, una característica de este tipo de celdas es que en el óxido se lleva a cabo una reacción química de oxidación y reducción (redox⁶) térmicamente asistida.

Al igual que en los dispositivos VCM es necesario realizar el proceso de formación inicial (*forming*) sobre la celda virgen para poder crear el filamento conductor.

La operación unipolar para llevar a cabo los procesos de escritura y borrado hace que este tipo de celdas tengan gran capacidad de escalado y además permite la simplificación de los circuitos de control externos. Esto las hace dispositivos de gran interés.

Además, se han encontrado celdas que presentan un funcionamiento unipolar o bipolar dependiendo de las condiciones en las que se esté operando [53, 54]. Esto abre la posibilidad de contar con un dispositivo que pueda pasar de trabajar de forma unipolar a bipolar dependiendo de las necesidades.

Memorias RRAM con óxido metálico bipolar sin filamentos

Las memorias RRAM con óxido metálico bipolar sin filamentos (MO-BN, *Metal Oxide Bipolar Non-Filamentary*) se pueden fabricar con varios tipos de óxidos y, a diferencia de los anteriores dispositivos, los procesos que dan lugar a la variación de la resistencia se producen en las interfaces o de manera uniforme en el área ocupada por el óxido.

Este tipo de estructuras requieren de óxidos más complejos como son óxidos de tipo Perovskita PrCaMnO_3 o Nb:SrTiO_3 [55]. Usando estos materiales no es necesario realizar un proceso de formación inicial (*forming*) ya que su funcionamiento se basa en la alteración de la distribución de las vacantes de oxígeno mediante la aplicación de campos eléctricos, cambiando así la conducción de la estructura. Dado que esta redistribución de vacantes se puede realizar con bajas intensidades y que la conducción se realiza de manera uniforme por toda la estructura, en lugar de manera localizada

⁶ Reacción química de reducción-oxidación en la que uno o más electrones se transfieren entre los reactivos provocando un cambio en sus estados de oxidación.

como ocurre en los CFs, queda claro que los efectos térmicos no juegan un papel determinante en la operación de estos dispositivos.

Dentro de la familia de las memorias RRAM las celdas MO-BN son las que se encuentran en un estado de desarrollo más inmaduro. Los materiales “exóticos” usados para su construcción hacen que esta tecnología sea poco compatible con la tecnología CMOS. Además, como es de esperar, el desconocimiento de muchas de sus características y propiedades físico-químicas dificulta su evolución.

Hay que destacar en general, en buena parte de las tecnologías RRAM descritas anteriormente, que el potencial mayor que presentan es el de susceptibilidad a un escalado agresivo, hasta llegar a los pocos nanómetros (por debajo de 10 nm). Este nivel de escalado es impensable en celdas de memoria Flash. Por otro lado, hay RRAMs de tecnología ECM que se pueden leer y escribir con tensiones de décimas de voltio, muy por debajo de las tensiones utilizadas en tecnología CMOS. Además presentan la posibilidad de acortar pistas de interconexión por sus características especiales.

1.4 Métodos de simulación. Estado del arte.

Los primeros pasos de cualquier tecnología siempre están encaminados a la comprensión de los fenómenos físicos involucrados y a su caracterización. Esto es un trabajo crucial ya que para que una tecnología sea viable debe poder controlarse de acuerdo a su propósito. En este trabajo los simuladores tienen un papel muy importante ya que permiten de una manera rápida y económica probar un gran número de modelos, geometrías y materiales sin el gasto involucrado en la fabricación de prototipos. Al mismo tiempo permiten acceder a variables internas de los dispositivos que no son medibles, aportando así información adicional de interés que de otra manera no se tendría.

La simulación de dispositivos RRAM es una cuestión ampliamente abordada por la comunidad científica en la actualidad. En la bibliografía se pueden encontrar varios tipos de simuladores con distintos enfoques según el modelo que se utilice, el grado de exactitud que se busque o incluso las aplicaciones que se le quieran dar al propio simulador.

Uno de los caminos que se puede elegir a la hora de simular este tipo de dispositivos es el uso de modelos microscópicos como hacen C. Cagli [56], Y. Shimeng [57] o C. Chae [58]. Estos simuladores trabajan a un nivel atómico o molecular donde los caminos conductores que atraviesan el óxido presentan una estructura compleja formada por aglomeraciones de vacantes de oxígeno o iones metálicos, dentro del óxido a través de las cuales se produce el transporte de los electrones. Según el tipo de mecanismo que se considere responsable de la creación y/o destrucción de los caminos conductores, se

puede trabajar migrando átomo a átomo desde un contacto hacia el otro hasta que se cree dicho camino por aglomeración de éstos o generando y moviendo vacantes de oxígeno dentro del óxido hasta formar el CF.

Para trabajar con este tipo de estructuras desde el punto de vista computacional, es necesario analizar todos los posibles caminos que se puedan encontrar uniendo los portadores que se crean en cada momento de cualquier forma físicamente posible. Como se puede ver en la Figura 19b, el número de posibles caminos que hay que analizar suele ser abrumador. Por este motivo es necesario usar métodos estadísticos, como métodos de Monte Carlo, para poder analizar estas estructuras y encontrar los correspondientes caminos conductores. En la Figura 19 tenemos dos ejemplos de las estructuras con las que trabajan este tipo de simuladores. El caso que se muestra en la Figura 19a [56] aún es más extremo, aunque más fiel a la realidad, ya que se ha tenido en cuenta una estructura en 3D con lo que aumenta enormemente el número de cálculos necesarios.

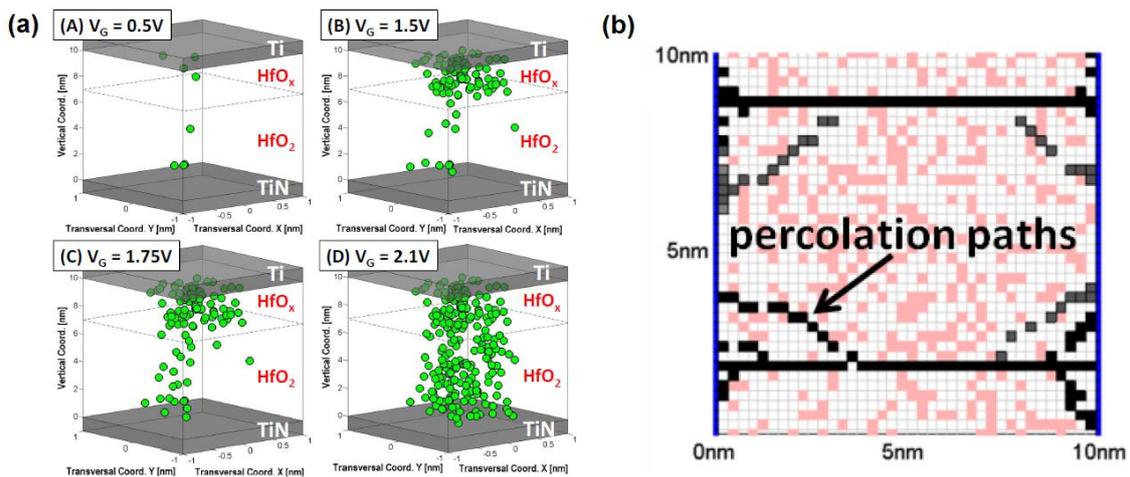


Figura 19: Ejemplos de modelos microscópicos para dispositivos RRAM. (a) muestra el modelo 3D propuesto en [56] donde se crean vacantes de oxígeno dentro del óxido. (b) muestra el modelo propuesto en [57] análogo al anterior pero trabajando en 2D. En este tipo de esquemas se trata de encontrar caminos de percolación que corresponden a los CFs.

No obstante, otros autores como [58] optan por considerar estas estructuras tan complejas como una sucesión de interruptores conectados entre sí como podemos ver en la Figura 20a. Aunque esta aproximación no evita tener que calcular todos los posibles caminos, facilita enormemente, computacionalmente hablando, el posterior cálculo de la intensidad que circula por toda la estructura siguiendo el modelo que se muestra en la Figura 20b.

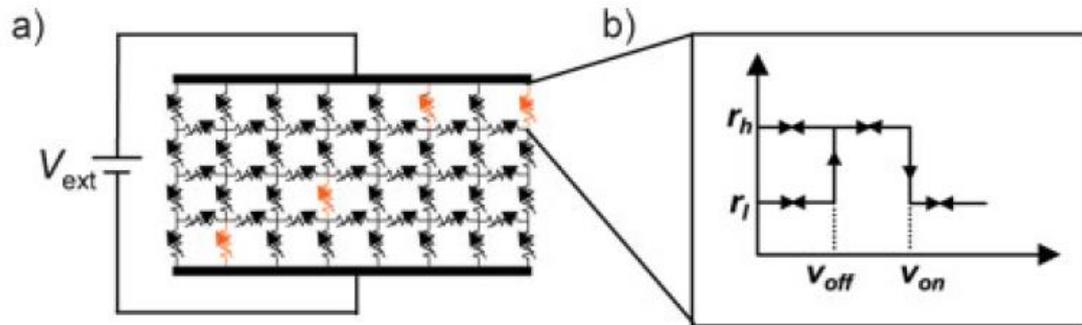


Figura 20: Esquema del modelo de RRAM propuesto por [58]. (a) Esquema del modelo de aislante formado por una red de interruptores interconectados. Los CFs se forman como resultado de los caminos que conectan los electrodos y forman todos los interruptores que se encuentran en ON. (b) Esquema del comportamiento de cada interruptor.

Este tipo de simuladores dan mucha información sobre la creación y crecimiento de estos caminos conductores así como de su estructura interna. Por el contrario suelen tener dificultades para reproducir la conmutación de resistencia del dispositivo. Desde un punto de vista operacional, estos simuladores necesitan una alta capacidad de computación para obtener resultados. Además, esta necesidad de gran potencia de cálculo hace difícil incluir otros efectos externos al propio CF que pudieran ser de interés.

Una segunda vía para la simulación de dispositivos RRAM consiste en el uso de modelos macroscópicos en los que, como hacemos en este trabajo, consideramos los caminos de percolación dentro del óxido, con los que trabajan los modelos microscópicos, como filamentos conductores continuos, es decir, considerando que no tienen estructura interna. Bajo esta aproximación evitamos tener que generar todas las vacantes de oxígeno, o los iones, y buscar los posibles caminos sobre ellas. De este modo evitamos todo ese pesado cálculo teniendo sólo que definir los filamentos. En resumen, este método de simulación nos permite obtener importantes resultados a la hora de la caracterización de estas celdas de memoria sin la necesidad de grandes tiempos de computación, como ocurren en los modelos microscópicos.

Esta simplificación en el modelo, con la consecuente reducción de la demanda computacional, permite que se puedan añadir efectos externos al fenómeno de la conmutación resistiva que mejoren los resultados de las simulaciones. Aunque la conmutación resistiva del óxido es el fenómeno principal que caracteriza a estos dispositivos, otros efectos como son las resistencias externas, la resistencia de Maxwell u otros procesos no lineales como los efectos túnel que se producen en la interfaz CF-electrodo también tienen una gran influencia en el comportamiento de la celda (ver Capítulos 2 y 3). Esta posibilidad, sin la necesidad de grandes tiempo de simulación, hace a este tipo de simuladores muy útiles.

Dentro de esta línea de simulación existen dos modelos distintos para caracterizar el comportamiento de los CFs, según el tipo de memoria RRAM que se esté estudiando. En primer lugar podemos encontrar propuestas como la de [59 - 62], donde la creación y destrucción de los CFs está promovida por el arrastre de los iones o vacantes de oxígeno por el campo eléctrico inducido en el óxido al aplicar una diferencia de potencial a los electrodos. Según este modelo, los CFs se comportan como un “pistón” que sube y baja según el sentido del campo, creando y destruyendo el camino que conecta los dos electrodos, desde el contacto que actúa como fuente de iones (ver Figura 23). La segunda propuesta está típicamente asociada a las celdas RRAM termo-químicas. En este caso, la creación y destrucción de los CFs está controlada por una reacción química tipo redox y la difusión térmica de las especies metálicas que forman los filamentos (ver Capítulo 2). En este modelo todos los procesos *set/reset* están controlados, a grandes rasgos, por la temperatura en lugar de por el campo eléctrico. Además de ser el enfoque tomado en esta tesis para nuestro simulador [6, 7], autores como M. Bocquet [63] o U. Russo [64] usan este tipo de modelos para la simulación de estas celdas RRAM.

Una última vía en cuanto a la simulación de dispositivos es el uso de modelos compactos. Este tipo de modelos ya no están orientados al estudio y caracterización física de los dispositivos, sino que lo que se busca en ellos es la eficiencia desde el punto de vista computacional y su posible integración dentro de sistemas mayores. Con este objetivo en mente, estos modelos se basan en simplificaciones y aproximaciones de las ecuaciones que describen los fenómenos físicos que se ponen en juego, que suelen ser ecuaciones diferenciales, hasta llegar a expresiones lo más simples posible y analíticas. De este modo, el objetivo principal de estos modelos es reproducir el comportamiento de los dispositivos a nivel de variables eléctricas externas (curvas I-V características,...). Desde la publicación del modelo de memristor de Strukov en 2008 [65] se han publicado un gran número de modelos compactos con este objetivo.

Siguiendo con esta filosofía, autores como M. Bocquet [66, 67] o L. Larcher [68] han optado por desarrollar modelos compactos numéricos a partir de la simplificación de las ecuaciones diferenciales que describen los fenómenos físicos. Este tipo de modelos tienen como objetivo crear un conjunto de ecuaciones analíticas que permitan calcular de manera simple el comportamiento de estos dispositivos. El caso particular del modelo compacto propuesto por M. Bocquet, es una simplificación de su modelo macroscópico anterior [63] donde estudiaba las RRAM termo-química (ver sección 1.3).

El investigador B. Chen [69] también ha propuesto un modelo compacto para los dispositivos RRAM pero en este caso su estudio se centra más en el modelado de la fenomenología en lugar de los procesos físicos internos de la celda. Es decir, su objetivo es la reproducción matemática de la curva I-V en función de una serie de parámetros de entrada y de ajuste sin tener en cuenta ningún fenómeno físico.

Una vez simplificadas las expresiones, en muchas ocasiones estos modelos se adaptan para poder ser usados en simuladores de circuitos. Estos modelos se basan en la

combinación de elementos lineales, no lineales y otros tipos de componentes electrónicos con el objetivo de reproducir las curvas I-V del dispositivo. De este modo se facilita enormemente la llegada al segundo objetivo de este tipo de modelos; su implementación como elemento dentro de un sistema, como por ejemplo una memoria real. Aunque estos modelos no son muy útiles en cuanto a la caracterización física de los dispositivos tienen un papel crucial en el diseño de circuitos comerciales basados en esta tecnología.

Autores como Y. N. Joglekar [70], X. Fang [71], K-H. Hsu [72], X. Guan [73] o P. Sheridan [74] han optado por crear modelos circuitales específicos para la plataforma de simulación de circuitos SPICE. Estos simuladores trabajan sólo con variables y componentes eléctricos. Las funciones que controlan el comportamiento de los elementos circuitales no lineales serán las funciones analíticas desarrolladas dentro del modelo compacto numérico. Por este motivo, estos autores han tenido que adaptar los modelos compactos físicos a modelos puramente eléctricos. Esto quiere decir que variables físicas como la temperatura, dimensiones, etc. se emulan mediante distintos tipos de variables eléctricas, mientras que los procesos que tienen lugar (intercambio de calor, cambio de dimensiones,...) deben reproducirse también mediante procesos eléctricos (fuentes dependientes, carga y descarga de capacidades, etc). La gran ventaja de estos modelos, desde punto de vista del diseño, es que se pueden implementar como un elemento más dentro de un circuito mayor, como por ejemplo una red de celdas con su correspondiente circuito de control. Para esta tesis también se ha desarrollado un modelo compacto en el que se ha adaptado nuestro modelo macroscópico a un modelo circuitual basado en SPICE (ver Capítulo 9).

Como vimos en la sección 1.3, existen varios tipos de memorias RRAM. Del mismo modo también existen distintos modelos compactos para describir el comportamiento cada tipo de dispositivos, como se describe en esta amplia revisión realizada por Blasco et al. [75].

Por último, como ya hemos dicho anteriormente, las RRAM se consideran como unos dispositivos pertenecientes a la familia de los memristores. Por este motivo, algunos autores como A. Rák [76], S. Shin [77] o J. P. Strachan [78] han desarrollado sus modelos compactos para estos dispositivos más genéricos. No obstante, estos modelos también pueden ser usados como RRAMs.

2

Fundamentos y modelado de la conmutación resistiva basada en filamentos conductores

2.1 Fundamentos de la conmutación resistiva en dispositivos con óxidos metálicos.

La conmutación de la resistencia (RS, *Resistive Switching*) de un material, principalmente óxidos metálicos, es el proceso por el cual cambia su resistencia entre dos estados o valores determinados: alta resistencia (HRS, *High Resistance State*) y baja resistencia (LRS, *Low Resistance State*).

Como hemos visto en la sección 1.3, son varios los tipos de memorias que se engloban dentro de la familia de las RRAM ya que, aunque todas presentan RS, los mecanismos por los que se rigen son distintos. Esta tesis se ha centrado en los tipos de celdas RRAM que realizan RS mediante la creación y destrucción de filamentos conductores como ocurre en las celdas RRAM termo-químicas o con metalización electroquímica.

Para los óxidos metálicos usados en estos tipos de celdas RRAM se ha descrito suficientemente que el efecto de conmutación entre los dos estados de resistencia está controlado por uno o más CFs [6, 47, 79 - 82] que forman caminos conductores dentro del óxido permitiendo así disminuir drásticamente su resistencia. A este conjunto de caminos formados por todos los CFs, ya sea generando una estructura de árbol o siendo independientes unos de otros, lo llamaremos “estructura de conducción”. La importancia de estos óxidos, y por asociación de este tipo de celdas, es que la mayoría son altamente compatibles con la tecnología CMOS, lo que es de gran interés para la industria.

Para poder encontrar este fenómeno del RS suele ser necesario someter al óxido “virgen” a un proceso de formación inicial (*forming*). El *forming* es un proceso por el cual se induce un cambio reversible de la conductancia del óxido “virgen”, dentro de la estructura MIM, mediante la aplicación de grandes campos eléctricos. Este fuerte campo eléctrico arrastra iones provenientes de los electrodos hacia el interior del óxido o bien los crea dentro del mismo (también puede formar agregaciones de vacantes de oxígeno), formando así los CFs (Figura 21). Este proceso de *forming* se puede llevar a cabo aplicando un pulso de tensión V_F , mayor que la tensión necesaria para obtener el RS, de unos pocos segundos o aplicando una rampa de tensión llegando a amplitudes superiores a V_F . Que ocurra o no el proceso de *forming* y el grado de éste (considerando

cómo ha cambiado la conductancia) dependerán de las características del propio óxido [83, 84], de los electrodos y de su reactividad con el óxido [85, 86] y de los defectos de la interfaces metal/óxido [87, 88, 89]. Además, los resultados experimentales muestran que para diferentes materiales generalmente la tensión V_F aumenta conforme disminuye el área del dispositivo [90]. Este hecho se puede entender intuitivamente ya que cuanto menor sea el área menor es el número de puntos posibles donde se pueda desencadenar el proceso de crecimiento del CF.



Figura 21: Representación esquemática de la operación de *forming*.

Una vez creada esta estructura inicial de CFs, éstos pueden volver a ser destruidos (*reset*) y reconstruidos (*set*) al someter la celda a una tensión determinada (menor que V_F). Si la celda es unipolar la tensión aplicada tanto para *set* como para *reset* serán de la misma polaridad. Como ya hemos visto, también existen tipos de RRAMs que necesitan cambiar la polaridad de la tensión aplicada en cada proceso.

La transición *reset* se produce por la ruptura del CF (Figura 22). Esta destrucción se lleva a cabo debido a que el aumento de temperatura por efecto Joule, que se produce al aplicar una tensión V_{RESET} en los electrodos, activa el proceso de difusión térmica, junto con otro proceso de oxidación, que disuelve el filamento en el óxido [63, 91, 64].

Dado que la temperatura a lo largo del dispositivo no es uniforme, la disolución del CF comienza a producirse por el punto más caliente que coincide con la zona más estrecha del CF (ver Figura 22). Esto da lugar a un estrechamiento local de la sección del filamento lo que lleva a su vez a un incremento de la resistencia y por consiguiente a un mayor calentamiento por efecto Joule en esa zona. En definitiva, se produce una auto-aceleración [64] del proceso de ruptura del filamento.

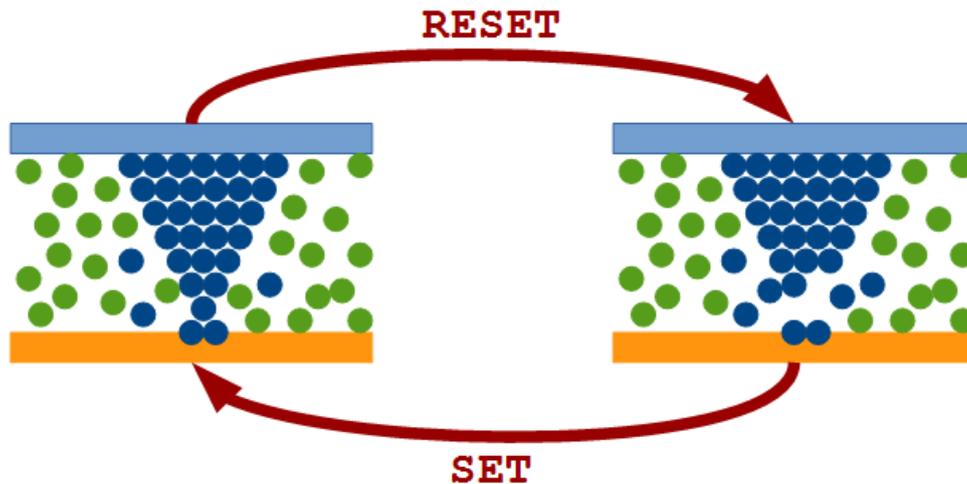


Figura 22: Representación esquemática de la operación de *set/reset*. Existen muchos modelos para explicar estos procesos, entre ellos se cuentan los que consideran que el CF se destruye debido a la difusión térmica de la especie metálica que lo compone. El proceso químico de reducción vuelve a formar el CF durante el proceso de *set*.

Del mismo modo, al aplicar una tensión a la celda estando los CFs rotos, es decir, cuando la celda está en estado de HRS, los procesos de reducción de la especie metálica que se encuentra en el óxido pueden volver a reconstruir estos CFs o crear otros nuevos. En el momento en que estos nuevos CFs construyen un camino de percolación que une los dos electrodos, dando por finalizado el proceso de *set*, consideramos que la memoria se encuentra en estado de LRS.

No obstante, dado que existen varios tipos de celdas RRAM con comportamientos diferentes, como ya vimos en la sección 1.3, otros autores como [59 - 62] plantean otros mecanismos de creación y destrucción del CF. Para estos autores el desplazamiento por difusión y deriva de los iones o vacantes de oxígeno en la dirección perpendicular al plano de fabricación del dispositivo arrastrados por el campo que se crea al aplicar una tensión a los electrodos son los mecanismos encargados del *set* y el *reset*. En decir, en este modelo los CFs se comportan como “pistones” que suben y bajan arrastrados por el campo eléctrico como se muestra en la Figura 23. Dado que puede alargarse o acortarse por cualquiera de sus dos extremos, este modelo permite describir el comportamiento bipolar que presentan algunos tipos de RRAM.

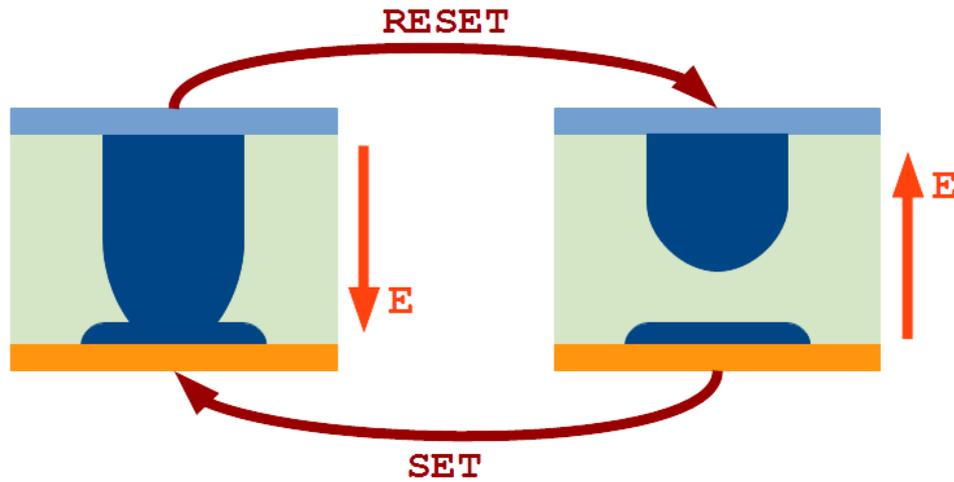


Figura 23: Representación esquemática del proceso de *set/reset* para el modelo de CF actuando como “pistón”. El CF se alarga o se acorta arrastrado por el campo eléctrico.

2.2 Simulación de procesos *set/reset* en RRAMs.

En el contexto del presente trabajo, se ha desarrollado un simulador macroscópico, al que hemos llamado SIM²RRAM, que funciona bajo la estructura que se muestra en la Figura 24. El óxido donde se lleva a cabo el proceso de RS se encuentra entre dos electrodos que pueden ser del mismo material o de materiales diferentes. A esta estructura se le aplica una tensión externa $V_{app}(t)$ con lo que se consigue hacer los ciclos *set/reset* (ver Figura 22). Esta estructura se ha modelado para su simulación como se muestra en la Figura 24b y 24c, según los fenómenos físicos que intervengan en el proceso de RS. Se ha descrito en la bibliografía [63, 92, 93, 94], y seguidamente haremos lo propio en los próximos capítulos, la existencia de dos comportamientos diferentes para el tipo de celdas RRAM que se han estudiado en este trabajo. En la Figura 24b mostramos el esquema circuital asociado a nuestro modelo, usado para simular las celdas RRAM cuya curva I-V presenta un comportamiento lineal a bajas tensiones (ver sección 4.2). Del mismo modo, se han descrito otro tipo de celdas RRAM que no presentan este comportamiento lineal y que también hemos simulado usando para ello el esquema circuital que mostramos en la Figura 24c (ver sección 4.3). En el Capítulo 3 se abordaran estos dos comportamientos con más detalle.

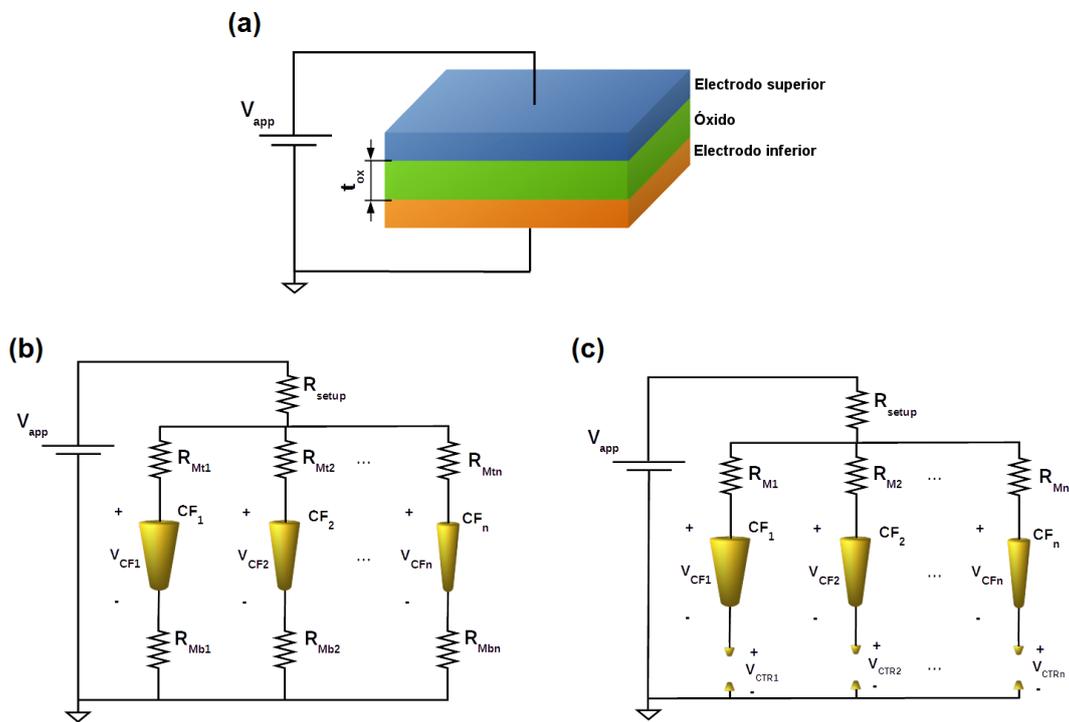


Figura 24: Esquema de la estructura de una celda RRAM (a). En (b) se muestra esquemáticamente el modelo usado para la simulación de los dispositivos que presenta un comportamiento lineal a bajas tensiones. En (c) se representa el esquema del modelo incluyendo efectos cuánticos usados para la simulación de dispositivos no lineales a bajas tensiones. R_{setup} engloba todas las resistencias externas, CF_i representa el filamento conductor i , mientras que, por último, R_{Mi} y R_{Mbi} se corresponden con las resistencias de Maxwell del contacto superior e inferior respectivamente asociadas al filamento i .

En el simulador SIM²RRAM, cada camino conductor que compone la estructura de conducción se trata como un filamento conductor sólido con simetría de revolución a lo largo del eje z ya que se trata de un simulador 1D. Aunque el simulador nos permite considerar cualquier tamaño y forma para cada CFs (siempre con simetría de revolución), principalmente se ha trabajado con CFs con forma cilíndrica, tronco de cono o con un perfil gaussiano semejantes a los que se muestran en la Figura 25. La longitud de los CFs se corresponde siempre con el ancho del óxido (t_{ox}), ya que siempre se considera que todos los CFs van desde el contacto superior al inferior.

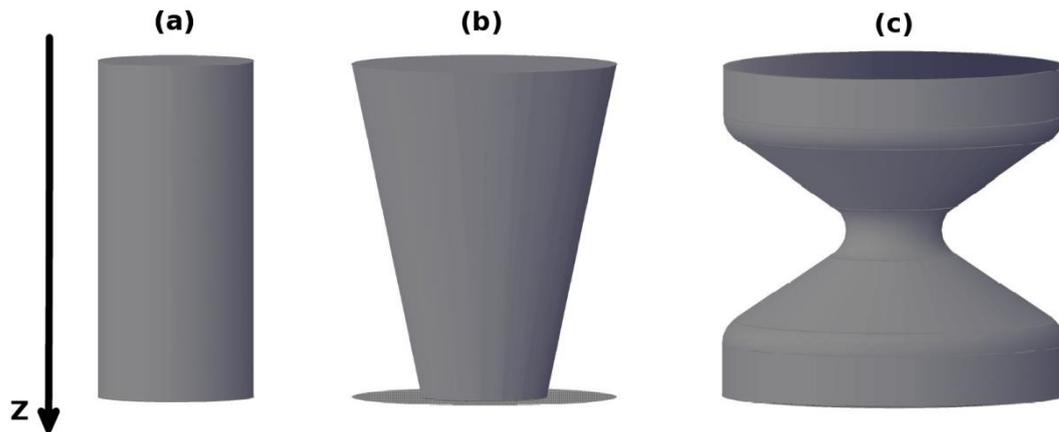


Figura 25: Representación de los distintos tipos de CFs considerados dentro del modelo macroscópico usado en esta tesis: (a) CF con perfil cilíndrico, (b) CF con perfil de tronco de cono y (c) CF con perfil gaussiano.

Se han escogido este tipo de estructuras ya que son buenas aproximaciones de las posibles formas reales que toman los CFs que han descrito autores como [95, 80, 96] y podemos ver en la Figura 26.

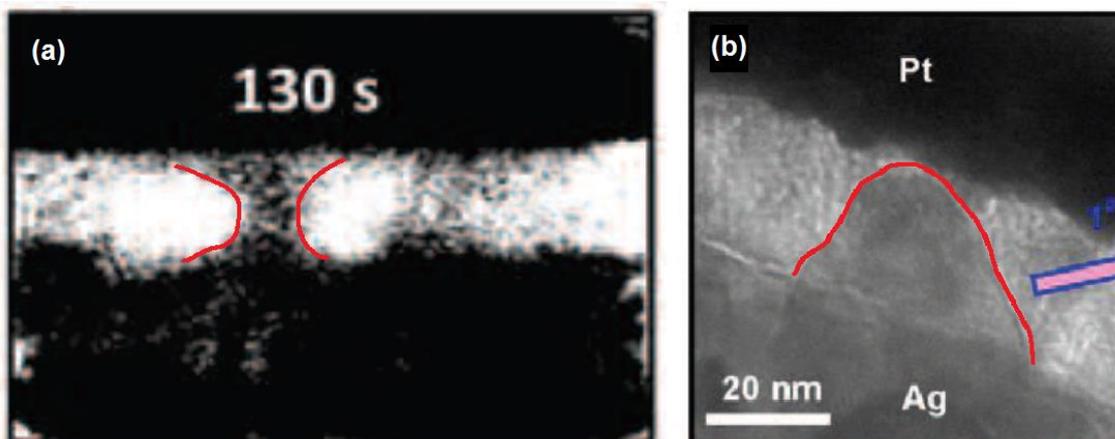


Figura 26: Imágenes TEM in-situ de dos tipos de celdas RRAM tras haberse formado el CF extraídas de [95]. En (a) tenemos un CF con perfil de aspecto gaussiano presente en una celda Cu/ZrO₂/Pt y en (b) se puede ver un CF con perfil de tronco de cono en una celda Ag/ZrO₂/Pt.

Como vemos en la figura anterior, podemos encontrar principalmente dos formas “típicas” de los CFs según el tipo de celda. En la Figura 26a, correspondiente a una celda Cu/ZrO₂/Pt, vemos un CF compatible con la aproximación de CF con perfil gaussiano como el que mostramos en la Figura 25c. Por otra parte, en la Figura 26b

tenemos un CF cuya forma se puede aproximar con un tronco de cono (Figura 25b), que se formó en una celda Ag/ZrO₂/Pt.

El simulador puede trabajar con un número arbitrario de filamentos conductores pudiendo tener cada uno un radio y una forma diferente. Estos filamentos son evaluados simultáneamente teniendo en cuenta que, dado que el material aislante que los rodea tiene una conductividad térmica muy baja, no existe acoplamiento térmico entre ellos. Por otro lado, la presencia de una resistencia común a todos estos filamentos (R_{setup}), la cual proviene de las estructuras externas al óxido, hace que sí exista un acoplamiento eléctrico entre todos ellos. Por último, se ha añadido una resistencia en serie con cada CF. Ésta se corresponde con la resistencia de Maxwell, que se produce como consecuencia de la concentración de las líneas de corriente al pasar por un estrechamiento [97]. En este caso, el cuello de botella que se produce al pasar la corriente por los filamentos en su camino entre los dos electrodos, como se muestra en la Figura 27.

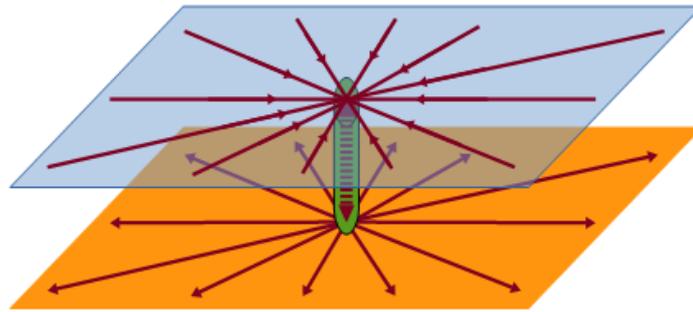


Figura 27: Esquema del flujo de corriente que circula entre los dos electrodos de la celda RRAM a través del cuello de botella que producen los CFs. Este agrupamiento de las líneas de corriente da como resultado la aparición de la resistencia de Maxwell [97, 98].

Como los dos contactos metálicos no tienen por qué ser del mismo material, se ha decidido, con el fin de añadir generalidad al simulador, dividir la contribución de esta resistencia en dos aportaciones, una para cada electrodo: R_{Mt_i} y R_{Mb_i} , donde i indica cada uno de los filamentos que se tienen en cuenta en la simulación, mientras que el subíndice t se refiere al contacto superior y el b al contacto inferior. Esta resistencia de Maxwell viene dada por [97, 99]:

$$R_{Mt,bi} = \frac{1}{4 r_{\min_i} \sigma_{t,b}}, \quad (1)$$

donde r_{min_i} es el radio de la zona más estrecha del filamento y $\sigma_{t,b}$ es la conductividad eléctrica del contacto superior (σ_t) o inferior (σ_b).

En los siguientes párrafos vamos a detallar el modelo físico usado para describir la evolución de los filamentos conductores, es decir, la creación (*set*) y destrucción (*reset*) de los CFs. La forma de los CFs viene descrita por el radio $r_{CF}(z)$ a lo largo de cada punto del eje z (siendo éste el eje perpendicular a las interfaces óxido-metal, se supone también que los CFs tienen simetría de revolución). La evolución del radio en cada punto del CF viene determinada por la evolución temporal de los procesos de oxidación, difusión y/o reducción de los átomos metálicos desde los filamentos hacia el óxido o viceversa [64, 91, 100, 63, 6]. La velocidad de este proceso está determinada principalmente por la temperatura que se alcanza en cada punto del CF [101, 6]. Por lo tanto, para cada filamento, la ecuación del calor que resuelve nuestro simulador es:

$$\sigma_{CF}(z)\xi(z)^2 - \frac{2h}{r_{CF}(z)} [T_{CF}(z) - T_{ox}] = -k_{th} \frac{\partial^2 T_{CF}(z)}{\partial z^2}. \quad (2)$$

En esta ecuación k_{th} es la conductividad térmica del CF, h es el coeficiente de transferencia de calor desde el CF hacia el óxido, T_{ox} se corresponde con la temperatura del aislante y $T_{CF}(z)$ es la temperatura del filamento en cada punto a lo largo del eje z . Además, $\sigma_{CF}(z)$ es la conductividad eléctrica de cada CF. Esta conductividad depende de la posición debido a que la temperatura no es constante a lo largo de todo el CF. De este modo, la conductividad eléctrica viene descrita por:

$$\sigma_{CF}(z) = \frac{\sigma_{CF0}}{1 + \alpha_T [T_{CF}(z) - T_0]}, \quad (3)$$

donde $\sigma_{CF0}(z)$ es la conductividad de referencia a la temperatura T_0 y α_T es el coeficiente de conductividad térmica.

Finalmente $\xi(z)$ es el campo eléctrico. Éste también es calculado en cada punto a lo largo del eje z , según la siguiente expresión:

$$\xi(z) = I_0 R_{CF}(z). \quad (4)$$

La corriente I_0 se obtiene teniendo en cuenta la resistencia total del filamento considerado (R_{CF}) y la tensión que cae en éste (V_{CFi} , ver Figura 24b). En el caso que se

muestra en la Figura 24c, además de considerar la resistencia del propio CF hay que tener en cuenta el efecto de otros procesos como son la aparición de procesos túnel no óhmicos que fijan una caída de tensión V_{CTRi} (ver sección 3.2.2.2).

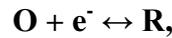
La resistencia por unidad de longitud $R_{CF}(z)$, a partir de la que calculamos R_{CF} , se calcula a partir de [63, 6]:

$$R_{CF}(z) = \frac{1}{r_{CF}^2(z)\pi(\sigma_{CF}(z) - \sigma_{ox}) + r_{CFmax}^2(z)\pi\sigma_{ox}}, \quad (5)$$

donde r_{CFmax} es el radio máximo del filamento sobre el que se está calculando.

Para describir la evolución del tamaño y forma de cada CF, se han considerado dos mecanismos encargados de la creación y destrucción de estos: una reacción química local redox (oxidación-reducción) y un proceso de difusión térmica de las especies metálicas.

Con respecto a la reacción redox, la cual sigue la ecuación de reacción general siguiente:



cuyas velocidades de reacción se pueden expresar clásicamente mediante la ecuación de Butler-Volmer [102].

$$v_{red}(z) = k_0 e^{-\frac{\Delta G_0 + 2(1-\alpha)F(E-E^0)}{RT_{ox}}}, \quad (6)$$

$$v_{ox}(z) = k_0 e^{-\frac{\Delta G_0 - 2\alpha F(E-E^0)}{RT_{CF}(z)}}, \quad (7)$$

donde ΔG_0 es la energía libre de la reacción redox, α se corresponde con el factor de asimetría de la reacción, E^0 es el potencial estándar de la reacción y k_0 es la constante cinética de la reacción redox. Como se puede ver en la Figura 28, si asumimos que la reacción redox es isotrópica se puede suponer que el potencial E que altera la energía de la reacción es igual a $-|V_{CFi}|$.

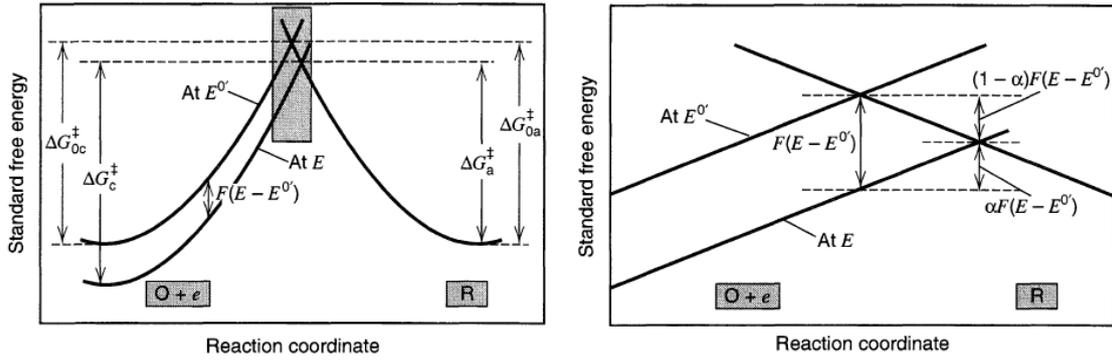


Figura 28: Efecto del cambio de la energía libre estándar de activación para la oxidación y reducción. La figura de la derecha corresponde a la ampliación del cuadro gris de la figura de la izquierda [102].

Por otro lado, la velocidad de difusión viene dada por [64]:

$$v_{diff}(z) = k_{diff} e^{\frac{-E_a}{k_B T_{CF}(z)}}, \quad (8)$$

donde E_a representa la energía de activación de la difusión térmica, k_{diff} es la constante cinética de difusión y k_B es la constante de Boltzmann.

De este modo, el proceso de reducción es el encargado de la creación de los CFs (*set*) y la oxidación y la difusión son los que se encargan de la destrucción de éstos (*reset*). Siguiendo con este modelo, la ecuación que da cuenta de cómo varía la forma de los CFs en el tiempo es:

$$\frac{dC_{CF}}{dt} = v_{red} \cdot (1 - C_{CF}) - v_{ox} \cdot C_{CF} - v_{diff} \cdot C_{CF}, \quad (9)$$

donde v_{red} , v_{ox} y v_{diff} son las velocidades de reducción, oxidación y difusión respectivamente. Además, $C_{CF}(z)$ es una magnitud adimensional que da cuenta de la concentración de la especie metálica que forma el CF y, por tanto, de la proporción de filamento que hay en cada punto y en cada momento sobre un filamento cilíndrico base de radio máximo r_{CFmax} . El uso de esta variable nos permite describir fácilmente la evolución del grosor de cada filamento en cada punto z , así como definir formas geométricas concretas para el estado inicial de la simulación. De esta forma, definimos el radio del CF a lo largo del eje z como $r_{CF}(z) = r_{CFmax} \cdot C_{CF}(z)$.

3

Simulador SIM²RRAM

3.1 Introducción.

El trabajo de caracterización del comportamiento de las celdas de memorias RRAM es una tarea interdisciplinar en la que la simulación juega un papel muy importante. Habitualmente se usan simuladores para modelar y predecir el comportamiento de estas estructuras bajo una gran variedad de condiciones de contorno a un bajo coste y con un ahorro considerable de tiempo. La información suministrada por este tipo de software puede ser de gran utilidad para comprender y explicar los resultados que se obtienen experimentalmente. De hecho las grandes empresas dedicadas a la fabricación de circuitos integrados tienen departamentos dedicados exclusivamente a la simulación de dispositivos.

Por estas razones hemos desarrollado un simulador macroscópico para el estudio de los procesos físicos que tienen lugar en un dispositivo RRAM. Para desarrollar el simulador SIM²RRAM se ha usado la plataforma MATLAB ya que además de ser un sólido entorno de programación cuenta con una gran variedad de herramientas de cálculo y análisis que facilitan el tratamiento de los resultados [6, 7]. Además, dado que esta plataforma también permite crear GUIs (*Graphical User Interfaces*), se ha creado una interfaz que facilita el uso de la aplicación.

3.2 Descripción de los módulos del simulador.

El simulador macroscópico SIM²RRAM que se ha desarrollado sigue como base el modelo físico expuesto en la sección 2.2. Además se han tenido en consideración otros fenómenos físicos como son la corriente de Poole-Frenkel (ver sección 8.2) y la conducción mediante corriente túnel, en el contexto de la física cuántica (ver sección 3.2.2.2).

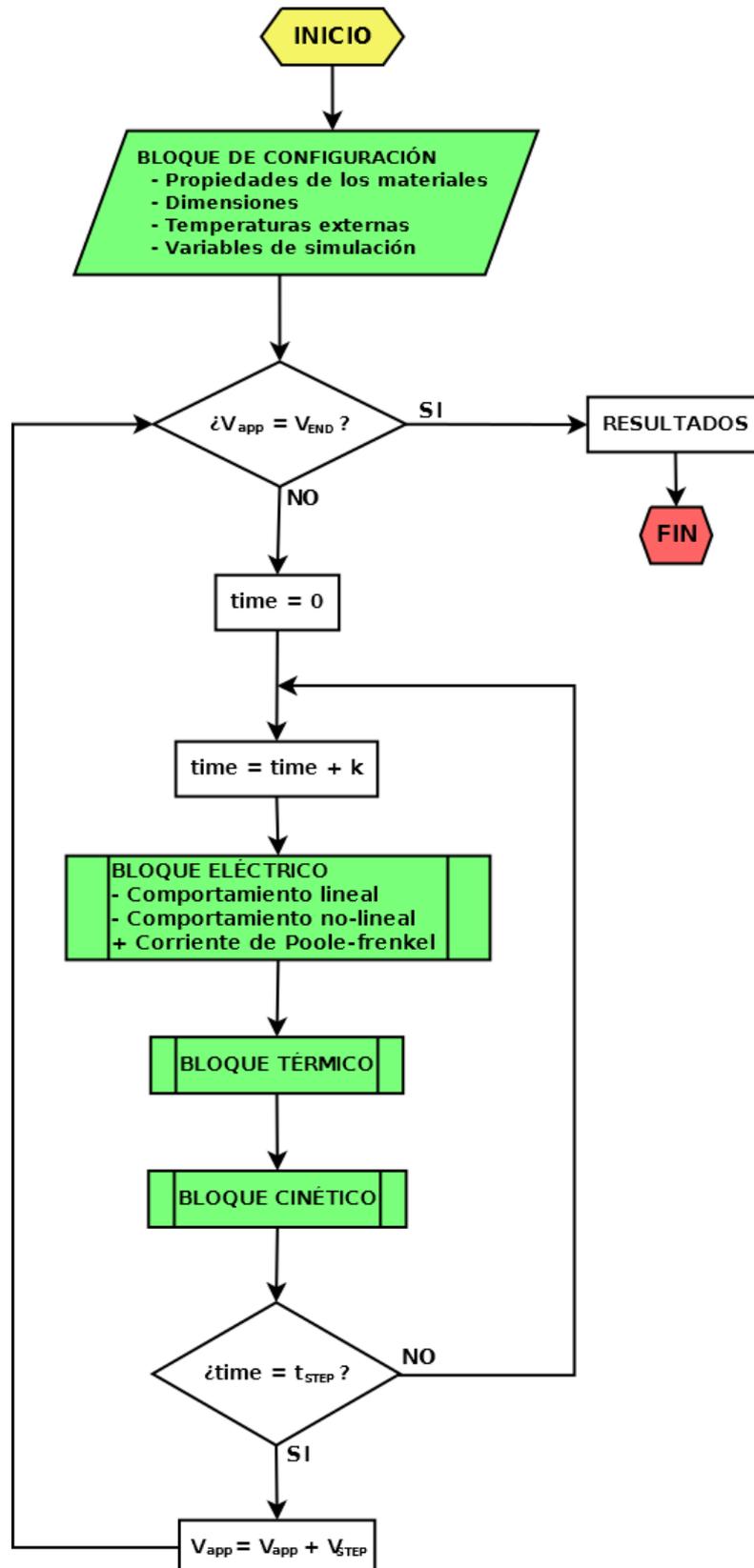


Figura 29: Diagrama de flujo de la estructura general simplificada del simulador SIM²RRAM. El parámetro k se corresponde con el tamaño del paso temporal el cual va variando según las necesidades de la simulación (ver sección 3.2.4). El parámetro t_{STEP} se corresponden con el tiempo durante el cual se aplica una misma tensión V_{app} . Este simulador también permite estudiar procesos transitorios debidos, por ejemplo, a la aplicación de pulsos.

Como podemos ver en el esquema simplificado de la Figura 29, el simulador está organizado en cinco bloques. Los bloques coloreados de verde son los encargados de simular cada uno de los fenómenos físicos que intervienen en el comportamiento de la celda RRAM. Estos se calculan de manera iterativa para cada una de las tensiones aplicadas si se hace una simulación usando una rampa de tensión. El resto de bloques son secciones de configuración de parámetros necesarios para la simulación o de tratamiento de los resultados obtenidos.

3.2.1 Bloque de configuración.

En este bloque se configuran todos los parámetros necesarios para la caracterización de la estructura de la celda y los parámetros de simulación.

En la Tabla 2 se muestran todos los parámetros usados para caracterizar la estructura tanto eléctrica como térmicamente:

PARÁMETROS DE CARACTERIZACIÓN DEL ÓXIDO	
k_{th}	Conductividad térmica del CF
h	Coefficiente de transferencia de calor desde el CF hacia el óxido
σ_{ox}	Conductividad eléctrica del óxido
σ_{CF0}	Conductividad eléctrica de referencia del CF
α_T	Coefficiente térmico de conductividad eléctrica del CF
k_{diff}	Constante cinética de difusión
E_a	Energía de activación de la difusión térmica
k_0	Constante cinética de la reacción redox
α	Factor de asimetría de la reacción redox
ΔG_0	Energía libre de la reacción redox
E^0	Potencial estándar de la reacción
T_m	Temperatura de fusión del CF
r_{at}	Radio de los átomos que forman en CF
t_{ox}	Espesor del óxido
T_{ox}	Temperatura externa

Tabla 2A: Relación de parámetros necesarios para la caracterización del óxido de la celda RRAM.

PARÁMETROS DE CARACTERIZACIÓN DE LOS CONTACTOS	
R_{cto}	Resistencia del contacto superior
σ_{Cto}	Conductividad eléctrica del contacto superior
α_{Tto}	Coefficiente térmico de conductividad eléctrica del contacto superior
R_{cbo}	Resistencia del contacto inferior
σ_{Cbo}	Conductividad eléctrica del contacto inferior
α_{Tbo}	Coefficiente térmico de conductividad eléctrica del contacto inferior
R_{setup}	Resistencia externa a la celda de memoria.

Tabla 2B: Relación de parámetros necesarios para la caracterización los contactos metálicos de la celda RRAM.

Además de los parámetros anteriores también podemos definir las condiciones de la simulación. SIM²RRAM nos permite simular la aplicación tanto de rampas como de pulsos de tensión a la celda de memoria. Si simulamos usando una rampa de tensión, el simulador nos permite elegir el rango de tensiones en que queremos trabajar, el tamaño de cada incremento de tensión y el tiempo de duración de éste. Del mismo modo, si simulamos un pulso de tensión debemos indicar la tensión y la duración del mismo. En la Tabla 3 se muestra todos los parámetros de simulación que son necesarios:

PARÁMETROS DE LA RAMPA DE SIMULACIÓN	
V_0	Tensión de inicio de la rampa de simulación.
V_{END}	Tensión de final de la rampa de simulación.
V_{STEP}	Tamaño del paso de tensión.
t_{STEP}	Duración de cada paso de tensión.

PARÁMETROS DEL PULSO DE SIMULACIÓN	
V_P	Tensión del pulso.
t_P	Duración del pulso.

Tabla 3: Tabla de los parámetros de tensión necesarios para definir la simulación.

Los valores mostrados en la Tabla 3, más allá de definir los parámetros de tensión y tiempo para los que se va a realizar la simulación, también tienen un papel relevante en el comportamiento de la celda de memoria. Como demuestra [64], y mostramos en la Figura 30, las características de la rampa también alteran el comportamiento de la celda.

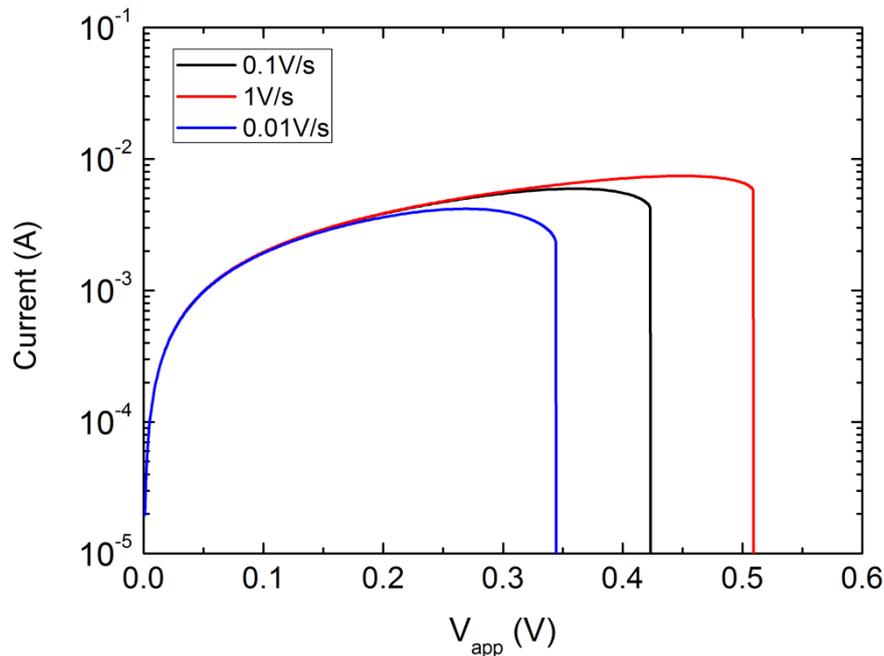


Figura 30: Curvas I-V simuladas para un CF cilíndrico para distintas pendientes de la rampa de tensión usada en su simulación (el simulador usado se explicará en el Capítulo 3). El valor que tome la pendiente de la rampa influye en el valor de la tensión de *reset*. Este resultado también se ha comprobado en cuanto a tendencias experimentalmente en [103].

El simulador no trabaja directamente con el valor de la pendiente de la rampa de tensión sino que se fijan los valores para el paso de tensión y la duración de cada paso por separado (ver Tabla 3), esto nos permite tener una mayor flexibilidad a la hora de fijar la resolución en tensión con la que queremos trabajar, e indirectamente, el tiempo de simulación. Es decir que cuanto más pequeño sea V_{STEP} mayor será la resolución de los resultados obtenidos pero a costa de que el tiempo de simulación también crezca. Teniendo esta flexibilidad podemos trabajar con una rampa de tensión determinada (por ejemplo, la usada para realizar las medidas experimentales) sin sacrificar la resolución y exactitud de nuestros resultados.

Por último, se ha de indicar el número de CFs que forman la estructura de conducción de la celda. Para cada filamento se debe seleccionar su forma y dimensiones. Como ya mostramos en la sección 2.2, los CFs con formas de cilindro, tronco de cono o gaussianas son los más usuales. Por este motivo, el simulador SIM²RRAM permite generar este tipo de CFs de forma automática. No obstante, también permite la posibilidad de usar filamentos de cualquier otra forma solamente indicando su contorno de revolución mediante una función o una malla de puntos.

Las dimensiones de cada CF se indican en la Tabla 4:

PARÁMETROS DE CARACTERIZACIÓN DEL FILAMENTO	
Forma del CF	- <i>Cilíndrica</i> . Ver Figura 25a. - <i>Tronco de cono</i> . Ver Figura 25b. - <i>Perfil Gaussiano</i> . Ver Figura 25c.
r_{CFmax}	Radio máximo del filamento.
C_{CF0}	Reducción del radio menor del CF respecto al radio mayor en tanto por ciento.

Tabla 4: Parámetros necesarios para definir los CFs que forman la estructura de conducción del dispositivo RRAM que se desea simular.

En la Figura 31, por claridad, mostramos gráficamente cómo las variables mostradas en la Tabla 4 caracterizan el CF. En el caso de los CFs con forma de tronco de cono el parámetro C_{CF0} se define para el radio de la zona más estrecha del filamento, es decir, en $r(t_{ox})$. En el caso de los CFs con perfil gaussiano, la zona más estrecha del filamento se encuentra por defecto en $r(t_{ox}/2)$ por lo que el parámetro C_{CF0} se define ahí. Para los CFs con forma cilíndrica no es necesario definir el parámetro C_{CF0} ya que el radio es constante a lo largo de todo el CF.

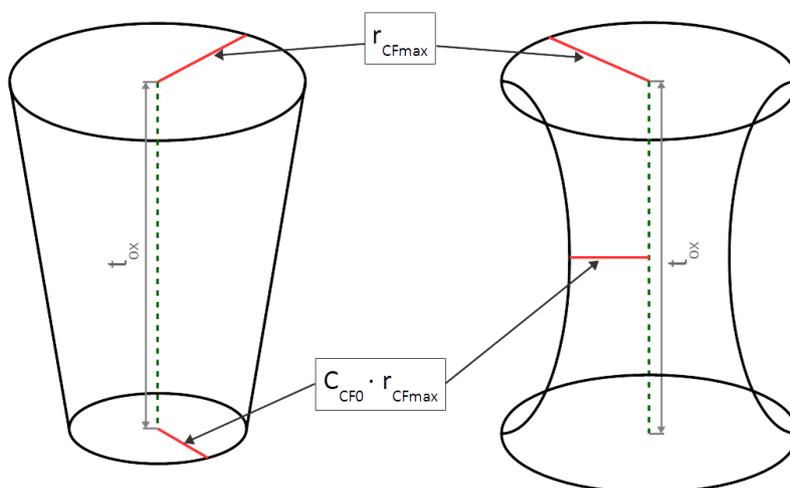


Figura 31: Esquema de los parámetros de caracterización de los CFs. r_{CFmax} se corresponde con el radio máximo del CF. El parámetro C_{CF0} es una cantidad relativa que indica la reducción del radio menor respecto al mayor en tanto por ciento. Dado que los CFs ocupan todo el espesor del óxido, la altura del CF coincide con t_{ox} (ver Tabla 2).

Aunque el simulador SIM²RRAM trabaja a nivel interno con el parámetro C_{CF0} como una cantidad relativa entre 0 y 1 (ver expresión en la Figura 31), con el fin de facilitar el

uso de esta aplicación, esta magnitud se indica por el usuario como un porcentaje entre 0 y 100.

3.2.2 Bloque eléctrico.

Una vez caracterizadas todas las estructuras que conforman la celda comenzamos la simulación del dispositivo propiamente dicha con el bloque eléctrico.

En este bloque se calcula la corriente que circula por cada uno de los filamentos teniendo en cuenta la tensión aplicada a la celda en cada momento y el acoplamiento eléctrico entre ellos. Como es de esperar, esta corriente se calcula siempre y cuando los filamentos que hayamos fijado como parte de la estructura de conducción estén formados. De este modo, si el grosor mínimo de un filamento es mayor que el diámetro de los átomos que formen el CF se considera que hay conducción, es decir, que el CF está formado.

Además, según el tipo de celda con la que estemos trabajando podemos encontrar dos comportamientos eléctricos distintos que hay que tener en cuenta para calcular la corriente que circula por la celda y que podemos simular.

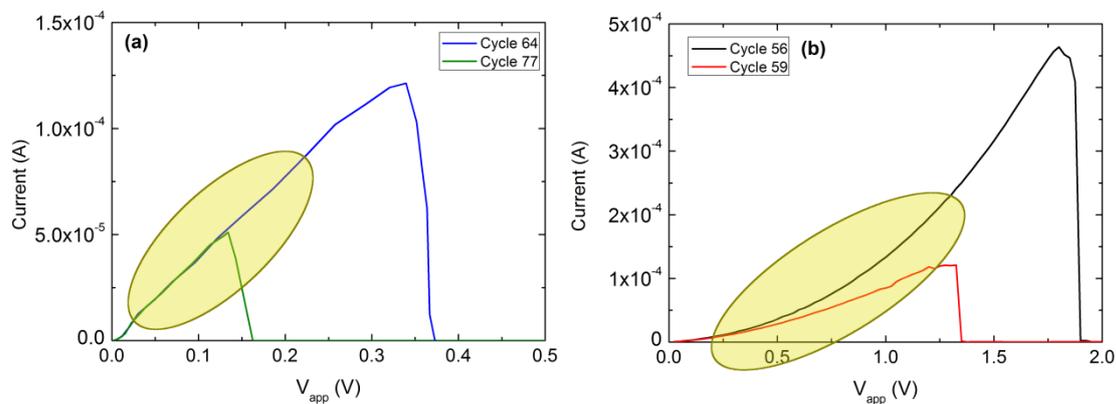


Figura 32: Curvas de I-V de *reset* de dos tipos de celdas diferentes que muestran el comportamiento lineal (a) y no-lineal (b) de la intensidad que pueden presentar las celdas RRAM, como se ve en las zonas resaltadas. (a) se corresponden con una celda Cu/HfO₂/Pt fabricada por el *Laboratory of Nanofabrication and Novel Device Integration, Chinese Academy of Sciences*. (b) es una celda de Ni/HfO₂/Si-n⁺ fabricada por el departamento de micro y nanosistemas del IMB-CNM (CSIC) de Barcelona.

En la Figura 32 mostramos las curvas I-V de varios procesos de *reset* experimentales de dos dispositivos RRAM diferentes aportadas por el *Laboratory of Nanofabrication and Novel Device Integration, Chinese Academy of Sciences* en (a) y por el departamento de micro y nanosistemas del IMB-CNM (CSIC) de Barcelona en (b). La estructura de la celda usada en (a) es Cu/HfO₂/Pt, presenta un comportamiento lineal a bajas tensiones

como se ve en el óvalo resaltado en la Figura 32a. Por otro lado en la Figura 32b se ha usado una celda con una estructura de Ni/HfO₂/Si-n⁺ que, como podemos ver, no presenta un comportamiento lineal en el mismo rango de tensiones.

Teniendo en cuenta estas dos posibilidades el bloque eléctrico se ha dividido en dos módulos (ver Figura 33) que permiten realizar la simulación usando el modelo óhmico o el modelo cuántico (Modelo basado en *Quantum Point Contact* (QPC) en la Figura 33) según el tipo de celda que estamos estudiando.

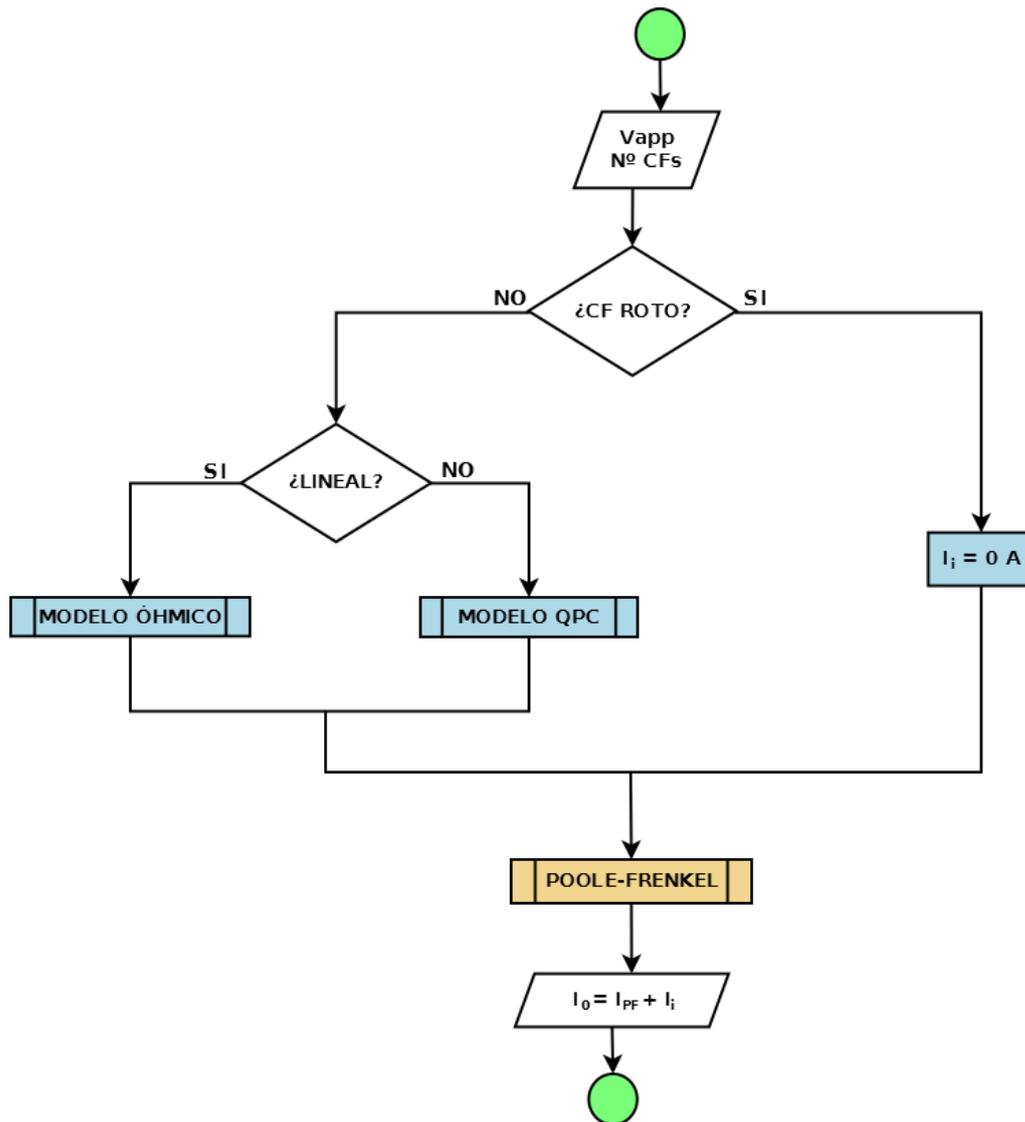


Figura 33: Esquema simplificado del bloque eléctrico del simulador SIM²RRAM. El Modelo óhmico es el usado para la simulación del comportamiento lineal mientras que el Modelo QPC es el usado para el comportamiento no lineal.

Además de la corriente que circula por cada CF, también se ha tenido en cuenta la conducción que existe a través de todo el volumen del óxido. Este corriente se ha modelado mediante una corriente de Poole-Frenkel (ver sección 8.2).

A continuación describimos cómo se ha modelado cada uno de los comportamientos que podemos encontrar.

3.2.2.1 Comportamiento lineal. Modelo óhmico.

Para simular una celda que presentan un comportamiento lineal de la intensidad a bajas tensiones se ha usado un modelo puramente óhmico para caracterizar cada uno de los CFs que forman la estructura de conducción de la celda. De este modo se ha considerado el siguiente esquema circuital como modelo para la simulación.

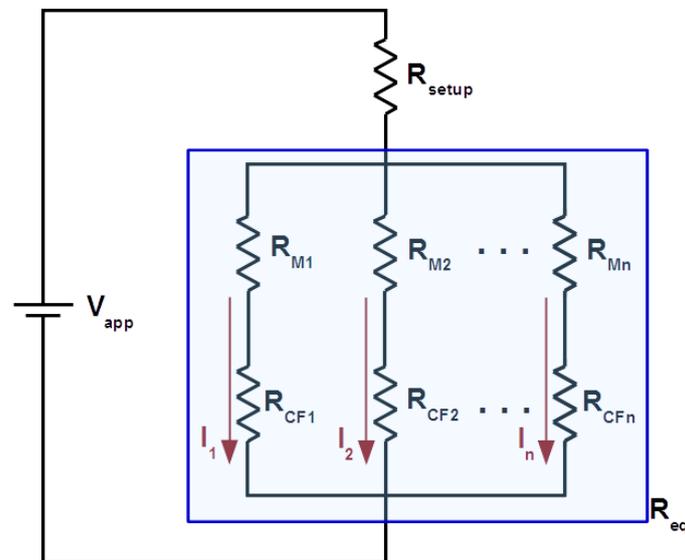


Figura 34: Esquema circuital utilizado para modelar el comportamiento eléctrico de la estructura de filamentos de una celda RRAM. R_{setup} es la resistencia externa de las pistas conductoras de medida, R_{M_i} se corresponde con la resistencia de Maxwell de cada filamento y R_{CF_i} es la resistencia de los propios CFs.

Como se muestra en la Figura 34, se han caracterizado los CFs como una resistencia eléctrica (R_{CF_i}), la cual se calcula mediante la integral numérica de la resistencia en cada punto calculada mediante la ecuación (5),

$$R_{CF_i} = \int_0^{t_{ox}} R_{CF_i}(z) dz . \quad (10)$$

La resistencia de cada filamento se encuentra en serie con su correspondiente resistencia de Maxwell (R_{Mi}) calculada mediante (1). Cada pareja de resistencias están a su vez en paralelo con el resto de las ramas formadas por cada uno de los demás filamentos que forman la estructura. R_{setup} se corresponde con las resistencias externas que pueden aportar los contactos metálicos, las pistas conductoras necesarias e incluso las propias sondas.

De este modo, para simplificar la expresión de la intensidad que circula por cada rama, llamamos R_{eq} a la resistencia equivalente de todas las resistencias de cada una de las ramas (indicadas con un rectángulo azul en la Figura 34), la intensidad que circula por cada una de las ramas es:

$$I_i = \frac{R_{eq}}{(R_{setup} + R_{eq})(R_{Mi} + R_{CFi})} V_{app} , \quad (11)$$

donde V_{app} es la tensión aplicada a los electrodos e I_i es la corriente que circula por el filamento i .

Una de las grandes mejoras de este modelo es que tiene en cuenta el acoplamiento eléctrico entre los CFs que forman la estructura. De esta forma se modela de una manera simple la influencia que tienen los CFs entre sí, es decir, el comportamiento de un filamento determinado no será el mismo si está solo o si forma parte de una estructura más compleja dentro de la celda.

3.2.2.2 Comportamiento no lineal. Modelo *Quantum Point Contact*.

En este apartado vamos a desarrollar el cálculo de la corriente en una barrera de potencial de dimensiones nanométricas siguiendo el planteamiento desarrollado por E. Miranda et al. [104]. Como ya se ha comentado anteriormente, SIM²RRAM también nos permite simular celdas de memoria RRAM que no presentan un comportamiento lineal a bajas tensiones (ver Figura 32b).

En este caso se considera que los CFs no tienen un contacto “directo” con uno de los electrodos (en el caso de las celdas Ni/HfO₂/Si-n⁺ el contacto inferior es el electrodo de silicio). Esto quiere decir que la conducción desde el filamento hacia el electrodo no tiene carácter óhmico sino que se produce a través de una barrera de potencial que se genera en la interfaz CF/Si-n⁺ dando lugar a transiciones túnel (Figura 35).

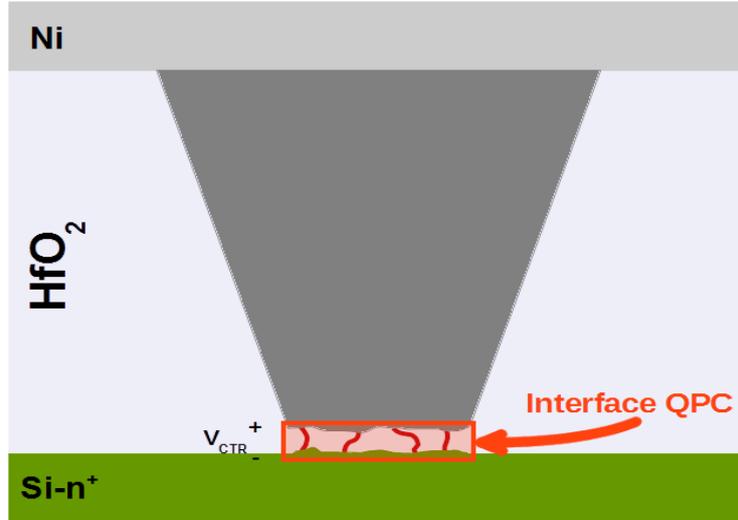


Figura 35: Esquema de la estructura interna de la celda RRAM teniendo en cuenta los efectos cuánticos modelados mediante QPC.

El modelo QPC ha sido contextualizado en el contexto del estudio de la fiabilidad de dispositivos electrónicos que incluyen óxidos como los transistores y las RRAMs por [104] y [93].

Para obtener la expresión de la intensidad que circula por cada CF (Ec. 12) se han seguido los supuestos descritos en [105] y [93] donde se considera que cada camino cuántico se representa mediante una barrera de potencial con forma parabólica (ver Figura 36). Estos autores asumen como aproximación a la tensión que cae en los extremos del interfaz bajo estudio la tensión aplicada al dispositivo. Por el contrario, nuestro modelo tiene en cuenta otros efectos físicos, como son la R_{setup} , las resistencias de Maxwell y la posibilidad de la existencia de varios CFs acoplados, lo que hace que esta aproximación no sea adecuada en todos los casos. Por este motivo, y dado la tensión que cae en la barrera es una variable accesible por el simulador, no se considera esta aproximación dentro del cálculo de la intensidad. De este modo, la intensidad que circula por cada rama se calcula de la siguiente manera:

$$I_i = \frac{2eN_i}{h} \cdot \left\{ eV_{CTRi} + \frac{1}{\alpha_i} \cdot \ln \left[\frac{1 + e^{[\alpha_i(\Phi_i - \beta_i eV_{CTRi})]}}{1 + e^{\{\alpha_i[\Phi_i + (1 - \beta_i)eV_{CTRi}]\}}} \right] \right\}. \quad (12)$$

Para este modelo, en el que se ha considerado el formalismo de Landauer para conductores cuánticos en 1D, Φ_i se corresponde con la altura de la barrera de potencial respecto al nivel de Fermi, α_i es el factor de forma del potencial parabólico, V_{CTRi} es la caída de tensión en la interfaz, N indica el número de canales o túneles cuánticos que

hay conduciendo y e es la carga del electrón [93, 106]. Por último, β representa la fracción de tensión que cae en cada uno de los extremos de la constricción. Es de suponer, que como en cada extremo de la interfaz QPC tenemos un material distinto, la fracción de la tensión total que cae en cada extremo no tiene por qué ser la misma en ambos lados. En la Figura 36 podemos ver un esquema del potencial usado para este modelo.

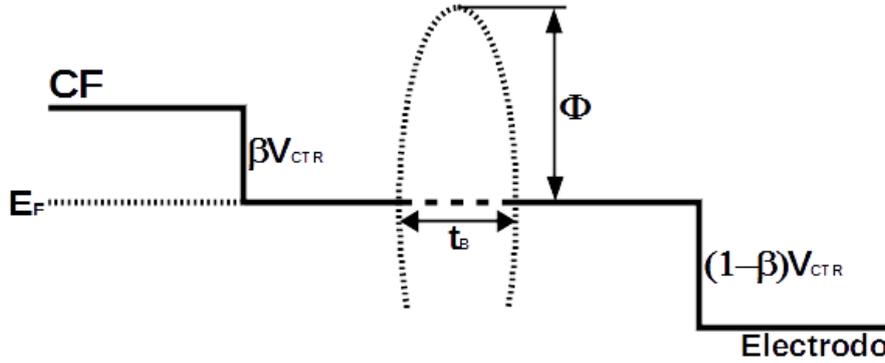


Figura 36: Diagrama de la banda de energía en la constricción que controla los caminos cuánticos de conducción.

Como vemos en la figura anterior, t_B describe el ancho de la barrera de potencial que se ha usado. Como se describe en [104] este parámetro está relacionado con el parámetro α de la ecuación (12) de la siguiente manera.

$$\alpha = t_B \pi^2 h^{-1} \sqrt{\frac{2m^*}{\Phi}}. \quad (13)$$

Donde m^* es la masa efectiva del electrón en la constricción, cuyo valor es $m^*=0.44m_0$ [107], siendo m_0 la masa del electrón libre.

De este modo, ahora el esquema usado para simular la estructura de conducción de este tipo de dispositivos es el siguiente:

de más interés, es debido a dos motivos principalmente: en primer lugar, hay que tener en cuenta que estas caídas de tensión no son accesibles experimentalmente por lo que estos resultados son de gran interés para el estudio de este fenómeno interno; en segundo lugar, desde el punto de vista computacional, esta forma de proceder es más eficiente en cuanto al tiempo de computación necesario en cada simulación. Si trabajásemos con las intensidades y las tensiones en la interfaz QPC a la vez, el sistema pasaría a tener $2n+1$ incógnitas incrementando notablemente el tiempo de computación.

Para resolver este sistema se ha usado el método de Newton-Raphson para sistemas no lineales [108, 109]. En este método se llega a la solución del sistema mediante la siguiente aproximación iterativa,

$$X_{j+1} = X_j - J^{-1}(X_j) \cdot F(X_j), \quad (15)$$

donde X_j es el vector de incógnitas, $F(X_j)$ es la matriz de todas las ecuaciones del sistema y $J(X_j)$ es el Jacobiano de la matriz $F(X_j)$. De este modo, para resolver el sistema de ecuaciones (14) se trabaja con las siguientes matrices:

$$X_j = [V_{CTR1,j} \quad \dots \quad V_{CTRn,j} \quad I_{0,j}], \quad (16)$$

$$F(X_j) = \begin{bmatrix} R_{setup}I_{0,j} + (R_{M1} + R_{CF1})I_{e1,j} + V_{CTR1,j} - V_{app} \\ \vdots \\ R_{setup}I_{0,j} + (R_{Mn} + R_{CFn})I_{en,j} + V_{CTRn,j} - V_{app} \\ I_{e1,j} + I_{e2,j} + \dots + I_{en,j} - I_{0,j} \end{bmatrix}. \quad (17)$$

Y por último el Jacobiano:

$$J(X_j) = \begin{bmatrix} \frac{\partial F_{1,j}}{\partial V_{CTR1,j}} & 0 & \dots & 0 & R_{setup} \\ 0 & \frac{\partial F_{2,j}}{\partial V_{CTR2,j}} & \dots & 0 & R_{setup} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & \frac{\partial F_{n,j}}{\partial V_{CTRn,j}} & R_{setup} \\ \frac{\partial I_{1,j}}{\partial V_{CTR1,j}} & \frac{\partial I_{2,j}}{\partial V_{CTR2,j}} & \dots & \frac{\partial I_{n,j}}{\partial V_{CTRn,j}} & -1 \end{bmatrix}, \quad (18)$$

teniendo en cuenta que en las ecuaciones (16), (17) y (18) cada intensidad I_i se corresponde con la ecuación (12).

Haciendo uso de todas las expresiones anteriores se resuelve finalmente la ecuación (15) de manera iterativa hasta que se cumpla la condición $|X_{j+1} - X_j| \leq \varepsilon$, siendo ε el máximo error admitido.

Una vez ya resuelto el sistema, con las tensiones obtenidas, podemos calcular cada una de las intensidades que circula por cada rama para cada tensión externa aplicada sustituyendo los resultados en la ecuación (12).

3.2.3 Bloque térmico.

Una vez calculadas las corrientes que circulan por la celda se pasa al bloque térmico donde se calcula la temperatura que alcanza cada CF punto a punto del *grid* utilizado.

Para ello se resuelve la ecuación (2) en cada punto y para cada filamento teniendo en cuenta las intensidades y resistencias ya calculadas. Este nuevo cálculo se ha realizado usando el método de las diferencias finitas [110] (ver Apéndice A). Se ha optado por este método por su gran simplicidad, que permite resolver esta ecuación diferencial de segundo orden a un bajo coste computacional. Además, el hecho de que la evolución espacial de la temperatura sea un proceso gradual hace que este método tenga un error pequeño eligiendo una malla de puntos adecuada para describir cada filamento.

De este modo, aplicando las definiciones de derivada numérica de primer y segundo orden siguiendo el desarrollo mostrado en el Apéndice A se ha transformado la ecuación (2) en:

$$D^d T_{j-1} + D_j T_j + D^u T_{j+1} = B_j \quad \text{siendo } j = 1, 2, \dots, N, \quad (19)$$

donde T_j es la temperatura en cada punto de la malla del filamento y N es el número total de puntos de la malla. En resto de los términos se corresponden con:

$$D^d = D^u = k_{th} \quad (20)$$

$$D_j = -2 \left(k_{th} + h^2 \frac{\Delta z}{r_{CF,j}} \right) \quad (21)$$

$$B_j = -h^2 \left(\sigma_{CF,j} \xi_j^2 + 2 \frac{\Delta z}{r_{CF,j}} T_{ox} \right), \quad (22)$$

siendo Δz la distancia entre dos puntos consecutivos de la malla.

La ventaja de escribir la ecuación del calor de este modo es poder transformar el problema de resolver la ecuación (2) para cada punto en un simple sistema de ecuaciones trigonal. Esto nos permite trabajar directamente con matrices (ecuación (23)) para lo cual MATLAB está optimizado.

$$\begin{pmatrix} D_1 & D^u & 0 & \dots & 0 \\ D^d & D_2 & D^u & \dots & 0 \\ 0 & D^d & D_3 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & D^u \\ 0 & 0 & 0 & D^d & D_N \end{pmatrix} \begin{pmatrix} T_1 \\ T_2 \\ \vdots \\ \vdots \\ T_N \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} B_1 - D^d T_0 \\ B_2 \\ \vdots \\ B_{N-1} \\ B_N - D^u T_{N+1} \end{pmatrix}. \quad (23)$$

Los valores T_0 y T_{N+1} se corresponden con las temperaturas de los puntos exteriores al filamento, es decir, la temperatura a la que se encuentra el contacto superior e inferior respectivamente. Por lo general la temperatura de los electrodos se define igual que la temperatura del laboratorio pero también es posible definir las de forma independiente cada una.

Como veremos más adelante, la temperatura del CF aumenta rápidamente en el entorno de la tensión a la que éste se rompe (V_{RESET}). En estas condiciones el aumento de la temperatura lleva consigo una variación también rápida de otros parámetros como es la conductividad eléctrica del CF. Si esto ocurre dentro de un mismo paso temporal (ver Figura 29) sería problemático ya que durante todo ese intervalo de tiempo la variable de conductividad no cambiaría en la simulación. Teniendo en cuenta esta circunstancia, se calcula la ecuación (23) de manera iterativa, es decir, comparando cada cálculo con el anterior comprobando que el error que se comete por este motivo está dentro de unos límites aceptables. Siempre que se sobrepase este error se volverá a actualizar todos los valores de conductividad y resistencia. De este modo conseguimos que este proceso sea autoconsistente en el cálculo de la temperatura y la intensidad simultáneamente.

Una vez calculada la temperatura, y antes de pasar al siguiente bloque, se comprueba que la temperatura obtenida se encuentra dentro del intervalo físicamente posible, es decir, que la temperatura máxima obtenida para el CF no sea superior a la temperatura de fusión del CF (T_m , ver Tabla 2). Éste es un método de seguridad que nos permitirá detectar cuando nuestra celda RRAM real se destruiría quedando inservible.

3.2.4 Bloque cinético.

Este bloque es el encargado de calcular cómo evoluciona la forma de cada CF en cada punto de la malla teniendo en cuenta la temperatura que se ha alcanzado para cada tensión aplicada. Para ello se resuelve la ecuación (9).

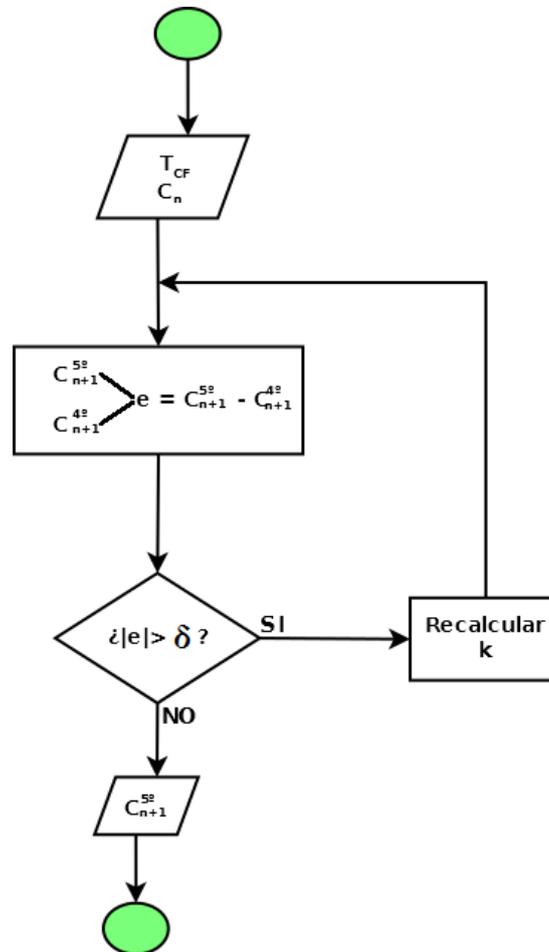


Figura 38: Diagrama de flujo del bloque cinético. Los valores de la concentración de la especie metálica son calculados usando aproximaciones de orden 4° y 5° del método *Runge-Kutta-Fehlberg* (Apéndice B). La diferencia de los resultados se corresponde con el error cometido que no deberá superar el error máximo permitido δ . Si este error máximo se supera, se reduce el paso temporal k y se vuelve a repetir el cálculo.

Para resolver esta ecuación se ha usado el método numérico de *Runge-Kutta-Fehlberg* adaptativo (método RKFa) [111] (ver Apéndice B). La ecuación (9) es lo que se conoce dentro del campo del cálculo numérico como ecuación diferencial rígida. Éste término se refiere a ecuaciones diferenciales cuya solución presenta variaciones muy abruptas ante pequeñas perturbaciones. Por este motivo se ha recurrido a un método adaptativo que permite variar el tamaño del paso temporal adaptándolo así a la velocidad con la que cambia la solución.

Para determinar el paso temporal adecuado en cada caso se resuelve la ecuación diferencial (9) siguiendo el método RKFa en seis etapas (ecuación (24)) y se comparan las soluciones de orden 4 y 5 como se ha descrito en el Apéndice B.

$$C_{n+1} = C_n + \sum_{i=1}^6 a_i F_i, \quad (24)$$

donde C_n se corresponde con la concentración de especie metálica en cada punto n del CF, a_i es un parámetro propio del método RKFa y F_i es:

$$F_i = k \left[v_{red} \left(1 - C_n + \sum_{j=1}^{i-1} d_{ij} F_j \right) - (v_{ox} + v_{diff}) \left(C_n + \sum_{j=1}^{i-1} d_{ij} F_j \right) \right]. \quad (25)$$

Las variables v_{red} , v_{ox} y v_{diff} son las velocidades de reacción mostradas en las expresiones (6), (7) y (8) en el Capítulo 2. Además, d_{ij} es otro parámetro del modelo RKFa y por último k es el tamaño del paso temporal.

Una vez calculados los valores de C_n para orden 4 y 5 tomamos su diferencia como el error que estamos cometiendo en el cálculo de esta variable. Si el error obtenido es mayor que una tolerancia determinada inicialmente δ , se reduce el paso temporal k y volvemos a repetir el cálculo. Para aumentar la eficiencia del método el tamaño del nuevo paso temporal se calcula usando la ecuación (26), la cual se usa comúnmente para este método.

$$k' = 0.9 \left(\frac{\delta}{|e|} \right)^{1/6} k, \quad (26)$$

siendo k' es el nuevo paso, e el error por truncamiento obtenido y δ se corresponde con la tolerancia que se ha definido para este cálculo.

La ventaja de usar esta expresión es que el nuevo paso se calcula en función del error por truncamiento que se ha obtenido asegurando así no tomar un paso demasiado grande o demasiado pequeño. Además, esta misma expresión es válida tanto para disminuir el paso como para aumentarlo en el caso de que se pueda usar pasos mayores sin que eso afecte a la exactitud de la solución.

Siguiendo este método se calcula la evolución de cada filamento para cada paso temporal iterando el proceso hasta cubrir el paso temporal total t_{STEP} (ver Figura 29) definido en el bloque de configuración (ver Tabla 3).

3.2.5 Interfaz gráfica.

Con el objetivo de facilitar el uso del simulador se ha desarrollado una interfaz gráfica propia. En la versión inicial del simulador había que manipular directamente los archivos de configuración para ejecutar la aplicación siendo necesarios tener ciertos conocimientos sobre programación en MATLAB. Además también era necesario trabajar dentro del entorno de MATLAB mediante línea de comandos a través de menús de texto (Figura 39).

```
#####
#
#       RRAM CELL Simulator       #
# by MARCO ANTONIO VILLENA SÁNCHEZ #
#   University of Granada, SPAIN   #
#           Version 5.1           #
#           Ni/HfO2/Sin+         #
#                                 #
#####

1 - STANDARD   -> V = [0.001, 3] V
2 - FREE      -> The boundary conditions are defined by the user.
3 - MULTI-SHAPE -> Select the shape of each filament.
4 - SHAPE     -> Select the shape of all filaments.
5 - LOAD      -> Load the initial shape of the filaments from a file.
6 - PULSE     -> The voltage and duration pulse are defined by the user.

- Select one option (1,...,6):
```

Figura 39: Captura de pantalla del menú principal del simulador SIM²RRAM en su versión literal. Esta captura se corresponde con la ventana de comandos del entorno de MATLAB necesaria para la ejecución del simulador.

Para permitir que el simulador fuera más versátil y exportable se decidió desarrollar una interfaz gráfica que facilitara todos los procesos de configuración y ejecución llegando así al simulador de celdas de memoria SIM²RRAM.

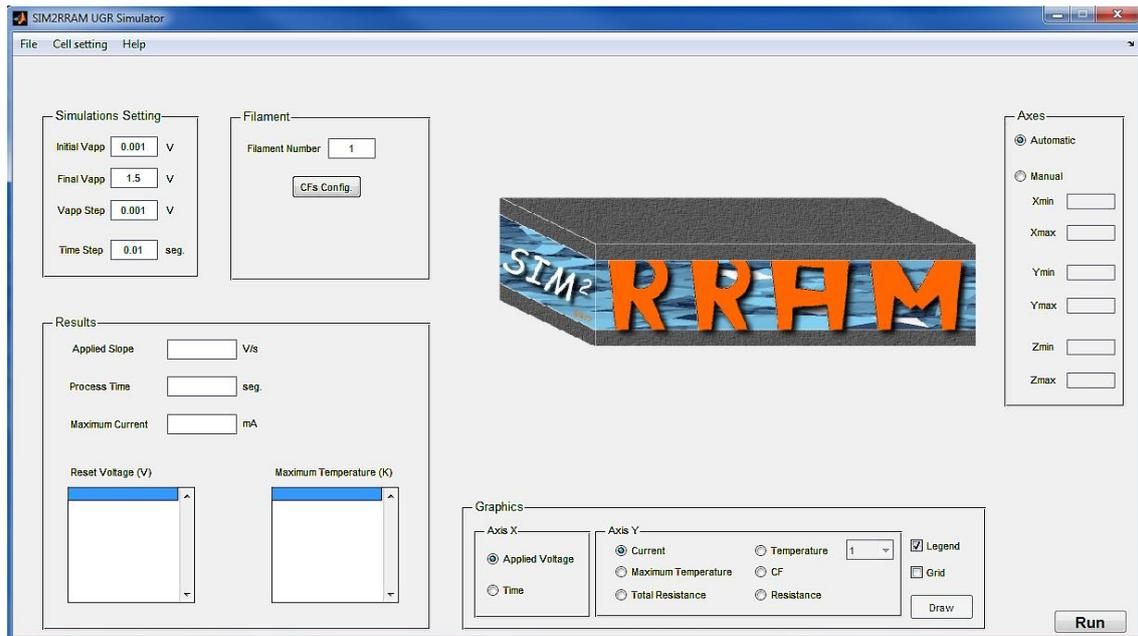


Figura 40: Captura de pantalla de la ventana principal del simulador SIM²RRAM. A través de esta interfaz se pueden configurar todos los parámetros, ejecutar la simulación y mostrar todos los resultados obtenidos.

Desde esta interfaz se puede configurar completamente todos los parámetros estructurales de la celda y de simulación (ver Figura 41). Además, una vez finalizada la simulación se pueden mostrar y exportar todos los resultados obtenidos como son la corriente, la temperatura, la evolución de la forma de cada CF, etc.

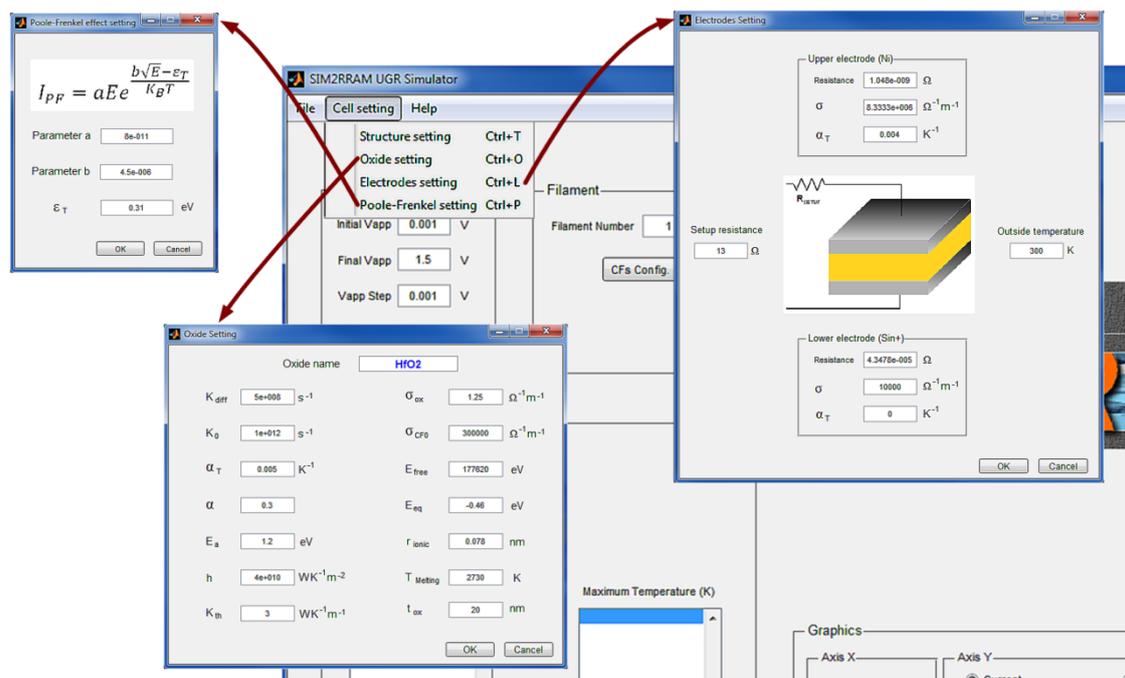


Figura 41: Esquema de los principales menús de configuración de SIM²RRAM que nos permiten trabajar sin la necesidad de manipular los distintos *scripts*.

Una vez iniciada la aplicación es necesario configurar todos los parámetros estructurales para caracterizar los materiales que componen la celda. Para ello nos dirigiremos a la barra de menú y seleccionaremos “*Cell setting* → *Oxide setting*”.

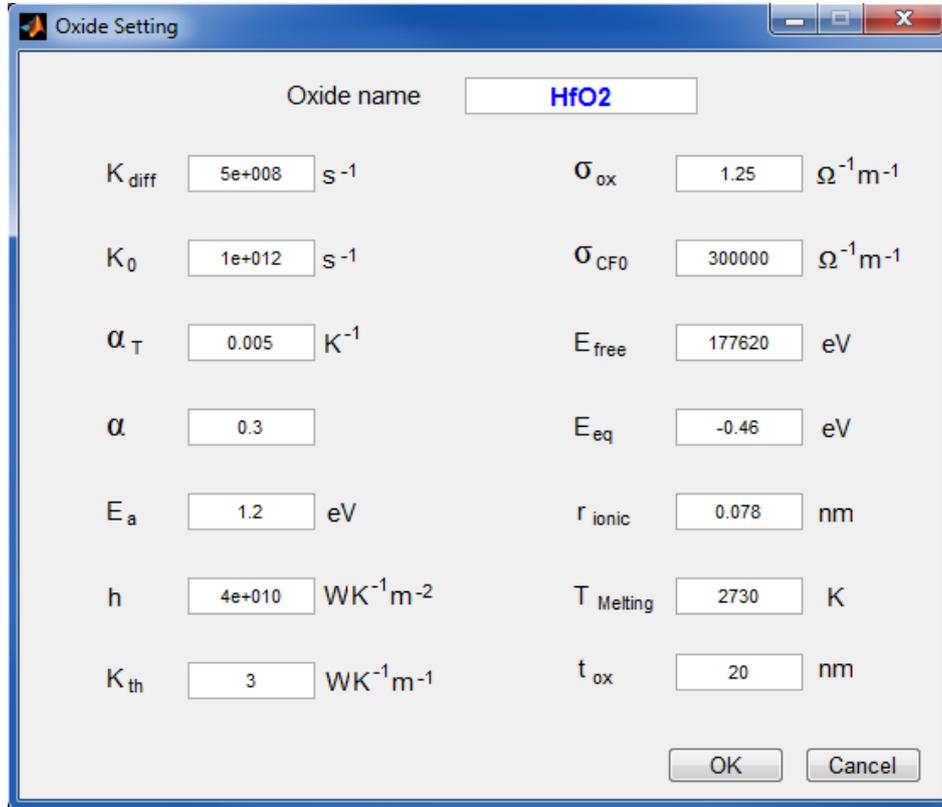


Figura 42: Ventana de configuración de los parámetros físicos del óxido y los CFs que forman la celda de memoria.

En esta ventana (Figura 42) se proporcionan todos los parámetros descritos en la Tabla 2 referentes a las propiedades físicas tanto del óxido como de los filamentos.

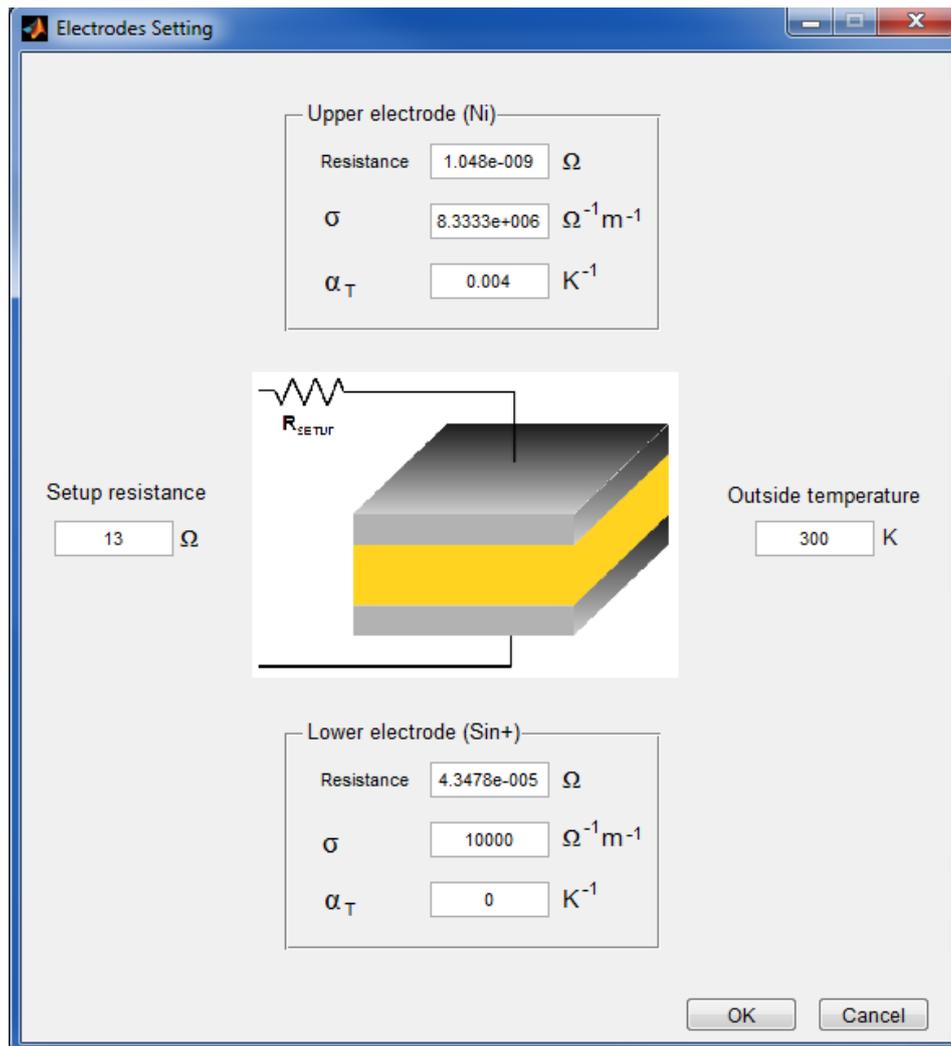


Figura 43: Ventana de configuración de los parámetros físicos de los contactos metálicos así como de otros parámetros externos.

Del mismo modo podemos configurar todas las características de los electrodos así como los parámetros externos como la temperatura ambiente. Siguiendo con la filosofía de que el simulador sea lo más versátil posible, ambos electrodos pueden ser de materiales distintos. A esta ventana, mostrada en la Figura 43, se accede desde la barra de menú en la ventana principal haciendo clic en “*Cell setting* → *Electrodes setting*”.

Otro efecto que podemos configurar es la corriente de Poole-Frenkel que, como ya hemos comentado anteriormente (ver sección 8.2), tiene un papel muy relevante en los ciclos *set*. Para ello debemos dirigirnos a “*Cell setting* → *Poole-Frenkel setting*” tras lo cual aparecerá la ventana que se muestra en la Figura 44. En ella se puede fijar todos los parámetros referentes a esta corriente.

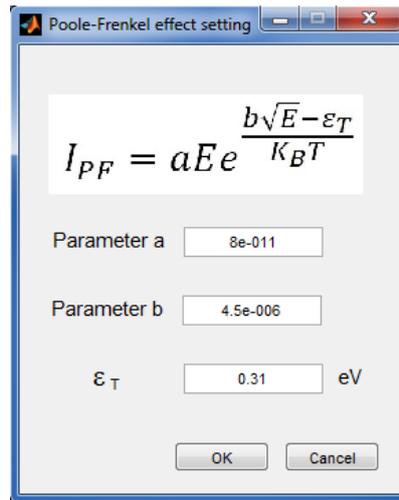


Figura 44: Ventana de configuración de la corriente de Poole-Frenkel que circula a través del óxido.

Una vez caracterizada la celda de memoria también podemos elegir el número de CFs que compondrán la estructura de conducción, así como su forma y su grosor. Para ello haremos clic en el botón “*CFs Config.*” situado en la ventana principal, indicando previamente el número de CFs en la caja de texto situada encima de él (ver Figura 40), abriendo así la ventana de configuración de todos los filamentos que mostramos en la Figura 45.

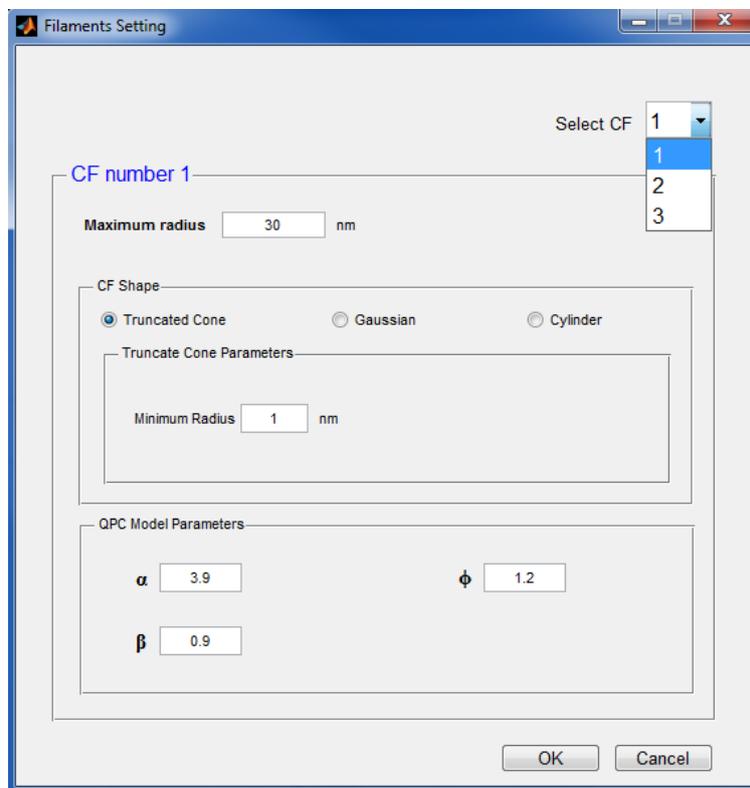


Figura 45: Ventana de configuración de cada uno de los CFs que componen la estructura de filamentos de la celda. En ella se puede indicar las dimensiones, forma y los correspondientes parámetros del modelo QPC.

En esta ventana, aparte de definir la dimensión de cada uno de los CFs, se puede elegir la forma de cada CF de manera independiente pudiendo elegir entre un CF con forma cilíndrica, tronco de cono o con un perfil gaussiano. También se fijarán en esta ventana los parámetros asociados al modelo QPC.

Una vez configurados todos los parámetros necesarios podemos iniciar la simulación haciendo clic en el botón “*RUN*” indicando previamente las tensiones y tiempo de simulación (ver Figura 44) en los correspondientes apartados de la ventana principal. Al terminar la simulación podremos visionar todos los resultados obtenidos directamente en la misma ventana principal (Figura 46).

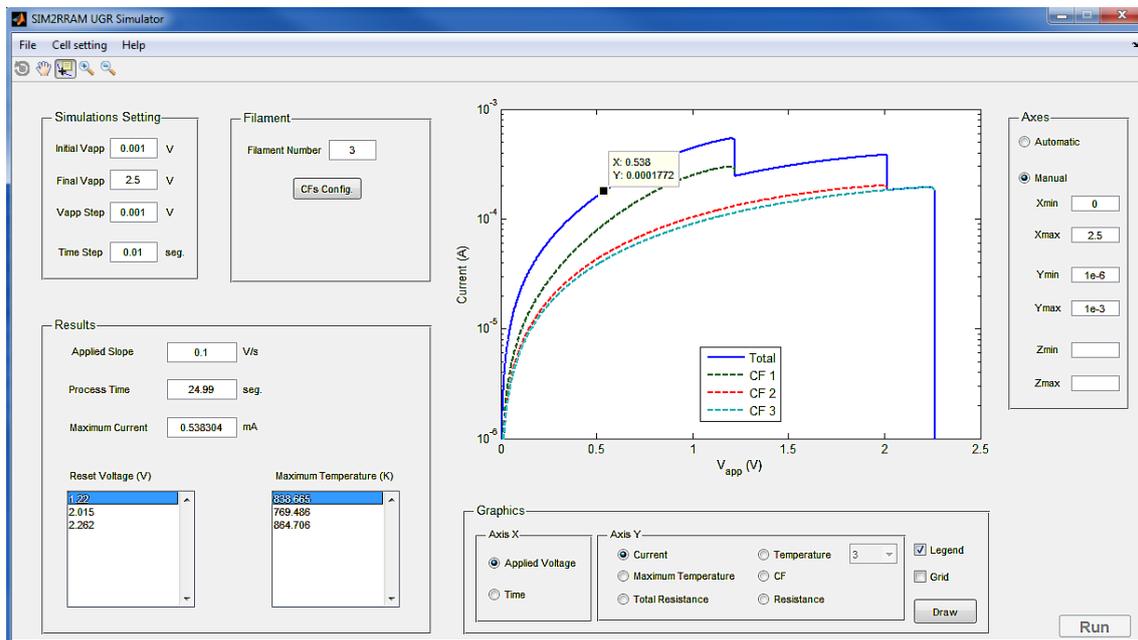


Figura 46: Finalizada la simulación podemos representar en el área de gráficos todos los resultados. Además se pueden usar herramientas de análisis para extraer datos concretos del gráfico. En el área de resultados se muestran resultados globales de la simulación.

En la gráfica central podemos ver la intensidad total y de cada uno de los CFs, sus temperaturas máximas, las resistencias en función tanto de la tensión aplicada como del tiempo transcurrido. Además, se pueden visionar información más detallada como es la distribución de temperatura a lo largo de cada CF o la variación de la forma de éste en función de la tensión aplicada. En el apartado de resultados, situado en esta misma ventana, también se proporciona información de las tensiones e intensidades de *reset* de cada uno de los CFs, así como el tiempo total del proceso (no de simulación) y la intensidad máxima alcanzada en toda la simulación.

El simulador SIM²RRAM también da la posibilidad de exportar todos los datos obtenidos a un archivo de texto. Para ello sólo tendremos que dirigirnos a “*File* → *Export...*”. Desde la ventana que se nos abrirá podemos generar un archivo de formato

TXT donde se exportarán todos los resultados que se deseen, organizados por columnas. El usuario sólo tiene que elegir qué información quiere incluir en cada columna seleccionándola desde el correspondiente menú desplegable (ver Figura 47).

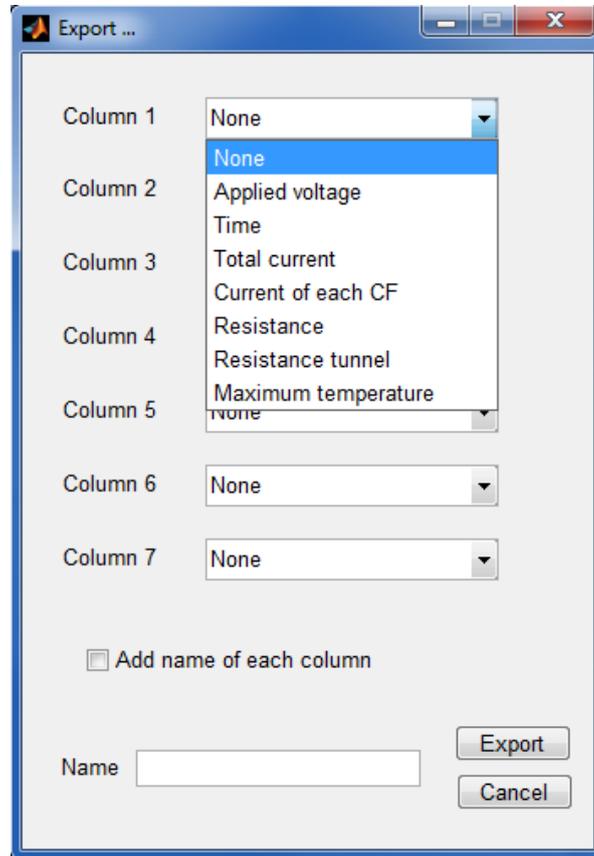


Figura 47: En la ventana “Export...” podemos guardar todos los resultados obtenidos en archivos de texto en los que se ordena la información que se desee incluir por columnas.

4

Validación del simulador SIM²RRAM y análisis del procesos de *reset*

4.1 Introducción.

Una vez que el simulador SIM²RRAM está listo y operativo, el siguiente paso es cotejar los resultados de las simulaciones con resultados obtenidos mediante medidas experimentales. Para ello se ha trabajado con dos tipos de celdas:

- **Cu/HfO₂/Pt** fabricadas en el Laboratory of Nanofabrication and Novel Device Integration, Institute of Microelectronics, Chinese Academy of Sciences [112].
- **Ni/HfO₂/Si-n⁺** fabricadas en el Institut de Microelectrònica de Barcelona, IMB-CNM (CSIC) por el departamento de micro y nanosistemas [92].

El método de trabajo que se ha seguido consta de dos pasos. En primer lugar se ha calibrado el simulador para los dispositivos RRAM con los que hemos trabajado emulando las curvas experimentales I-V. De este modo aseguramos que el calibrado del simulador es correcto. Una vez reproducidos los resultados experimentales se obtienen otros resultados que no son accesibles experimentalmente como el tamaño de los CFs, distribuciones de temperaturas, resistencias, etc.

Estos nuevos resultados nos han permitido realizar varios estudios sobre el funcionamiento interno de estos dispositivos así como los mecanismos físicos que los controlan. De este modo, se ha realizado un profundo análisis de los distintos tipos de procesos de *reset* que podemos encontrar para este tipo de dispositivos.

Se han podido distinguir dos mecanismos de conducción distintos según el tipo de dispositivo. Las celdas RRAM tipo Cu/HfO₂/Pt sólo presentan conducción óhmica a través de los CFs metálicos. Por el contrario las RRAM tipo Ni/HfO₂/Si-n⁺ además de este mecanismo óhmico presentan otro mecanismo de conducción a través de una barrera de potencial que se produce en la zona próxima a la interfaz HfO₂/Si-n⁺, en el contacto del CF con el electrodo. Este último mecanismo también ha sido estudiado en profundidad.

4.2 Celdas tipo Cu/HfO₂/Pt.

Estos dispositivos RRAM presentan un comportamiento lineal a bajas tensiones. Por este motivo para todas las simulaciones realizadas se ha usado el modelo óhmico únicamente (ver sección 3.2.2.1) [6].

En primer lugar se calibró el simulador de acuerdo a los materiales utilizados en la celda, modificando los parámetros indicados en el bloque de configuración (ver Tabla 2). Para esta celda los valores son:

Parámetro	Valor
k_{th}	4 W K ⁻¹ m ⁻¹
h	4 x 10 ¹⁰ W K ⁻¹ m ⁻²
σ_{ox}	1.25 Ω ⁻¹ m ⁻¹
σ_{CF0}	5 x 10 ⁶ Ω ⁻¹ m ⁻¹
α_T	1.7 x 10 ⁻³ K ⁻¹
k_{diff}	3 x 10 ¹⁰ s ⁻¹
E_a	0.8 eV
T_m	3085 K
r_{at}	6.9 x 10 ⁻¹¹ m
t_{ox}	20 nm
T_{ox}	300 K
$\sigma_{Cto} [Cu]$	5.81 x 10 ⁷ Ω ⁻¹ m ⁻¹
$\sigma_{Cbo} [Pt]$	9.96 x 10 ⁶ Ω ⁻¹ m ⁻¹
R_{setup}	13 Ω

Tabla 5: Parámetros de caracterización empleados en las simulaciones para caracterizar la celda de memoria Cu/HfO₂/Pt.

Aunque los CFs contengan átomos de cobre, la estructura física real de éstos aún no está suficientemente clara. En este sentido muchas publicaciones han tratado de arrojar luz sobre esta cuestión [113, 114, 58] pero aún no tenemos una respuesta adecuada. Lo que sí queda claro es que no podemos usar los valores de conductividad térmica y eléctrica del Cu puro cristalino ya que la configuración real del CF, y por lo tanto su conductividad, son muy distintas.

En este caso, los valores de los parámetros mostrados en la Tabla 5 provienen del calibrado del simulador. Para este proceso se ha tenido en cuenta siempre los valores de otros trabajos previos como son [115] y [91] junto con los propios resultados experimentales con los que se ha trabajado.

La selección de valores de los parámetros mostrados en la Tabla 5 nos ha permitido reproducir los resultados experimentales para una amplia gama de ciclos de *reset*, en diferentes condiciones de operación y temperatura externa. En este sentido puede afirmarse que el modelo adoptado junto con el conjunto de variables seleccionadas es coherente y refleja correctamente la física.

Otros parámetros necesarios para la simulación corresponden a la rampa de tensión que se va a aplicar. En este caso se optó por una rampa de pendiente 0.1 V/s acorde con la rampa usada en las medidas experimentales.

Si analizamos en detalle las curvas I-V experimentales podemos observar que existen dos tipos de ciclos de *reset*. En unos casos la curva I-V sólo presenta una única caída brusca de la intensidad como se ve en la Figura 48a. En otros casos la intensidad decae a través de varios niveles de intensidad intermedios creando varios escalones en sus curvas I-V (Figura 48b).

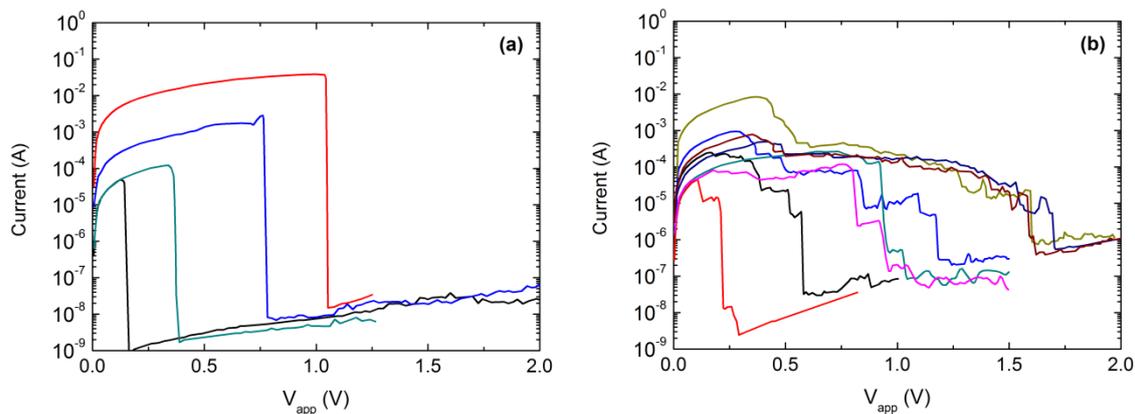


Figura 48: Curvas I-V experimentales de la celda Cu/HfO₂/Pt. En (a) se muestran curvas de varios ciclos de *reset* con una sola caída abrupta de la intensidad mientras que en (b) tenemos otros ciclos de *reset* de la misma celda en los que la intensidad cae formando varios escalones.

La aparición de uno o varios escalones se asocia con el número de filamentos que conforman la estructura de conducción de la celda. En las siguientes secciones se justificará que en los ciclos con una única caída abrupta de la intensidad la estructura de conducción está formada por un único CF. En los casos en los que aparecen más de una caída, la estructura de conducción está compuesta al menos por tantos CFs como escalones aparecen.

4.2.1 Ciclos *reset* con un único filamento conductor. Dependencia de la tensión de *reset* con la resistencia del dispositivo.

Como hemos visto en la Figura 48a, en muchos casos se registran ciclos de *reset* donde sólo aparece una caída abrupta de la corriente. En este caso la estructura de conducción está formada por un único CF. El ciclo de *reset* comienza con el CF en el estado de baja resistencia (LRS). En el momento que éste se rompe no queda ningún otro camino conductor a través del óxido (despreciando la conducción por Poole-Frenkel (ver sección 8.2)) con lo que la celda entra en el estado HRS.

En este caso, para realizar las distintas simulaciones de los datos experimentales los únicos parámetros que se consideran son el radio del CF y la forma de la zona más estrecha. En la Figura 49, mostramos algunas curvas I-V que presentan un comportamiento de este tipo.

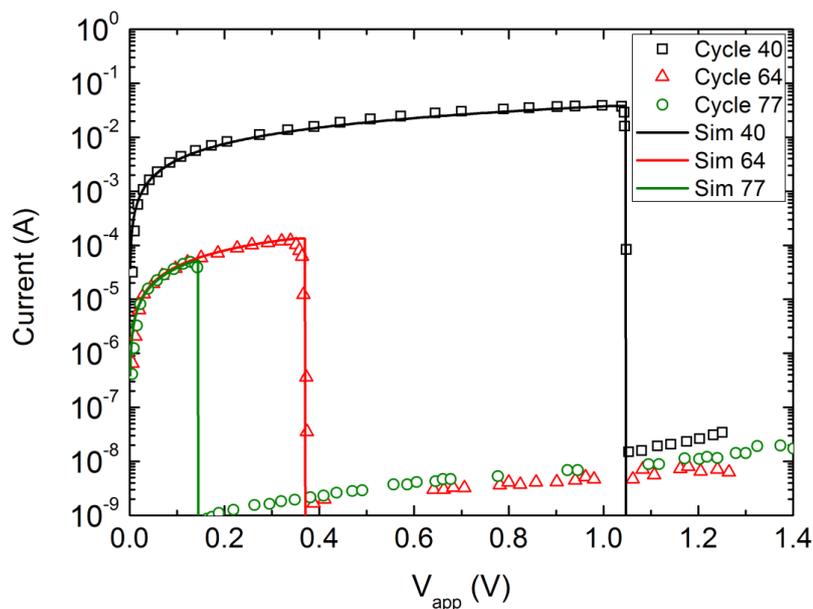


Figura 49: Curvas I-V de las celdas RRAM de Cu/HfO₂/Pt. Los resultados experimentales se muestran mediante símbolos mientras que las curvas simuladas se corresponden con las líneas. En todos los casos se consideró un único CF.

Puede apreciarse que los datos simulados se ajustan con precisión a las medidas experimentales en sus dos principales aspectos: la tensión de *reset* y el nivel de corriente. Los datos experimentales tras la tensión de *reset* se corresponden con la conducción que se realiza a través del óxido. Aunque este tipo de conducción se ha tenido en cuenta dentro del modelo (ver Capítulo 8), no se incluye en estas simulaciones debido a su papel irrelevante en el proceso de *reset*.

Para simular las curvas de la Figura 49 se han utilizado filamentos con forma gaussiana (ver sección 2.2) con las siguientes dimensiones:

Simulación	r_{CFmax} (nm)	C_{CF0}
Sim 40	37.0	98%
Sim 64	0.9	48%
Sim 77	2.0	10%

Tabla 6: Dimensiones de los CFs usado para simular las curvas experimentales de la Figura 48. Los CFs tienen perfil Gaussiano con la zona más estrecha situada en el centro.

donde r_{CFmax} es el radio máximo que tiene el filamento y C_{CF0} es el tamaño porcentual, en función del radio máximo, de la zona más estrecha (ver Tabla 4).

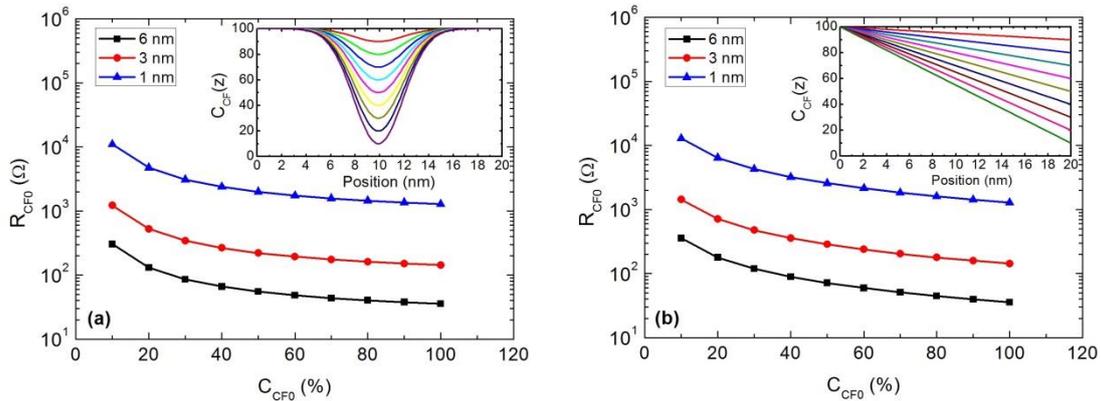


Figura 50: Dependencia de la resistencia inicial del CF con su forma para (a) CFs con un perfil Gaussiano, (b) CFs con forma de tronco de cono. En la gráficas interiores se muestra $C_{CF}(z)$ en función de la posición.

Con el fin de entender en profundidad los mecanismos que controlan el proceso de *reset*, vamos a estudiar la influencia sobre las variables principales (nivel de intensidad, tensión de *reset*, etc.) de distintos parámetros.

En primer lugar, analizamos el papel que juega la forma del CF en el proceso de *reset*. Con este objetivo se han estudiado dos tipos de CFs:

- (a) CFs con un perfil gaussiano, cuya zona más estrecha se encuentra en su parte central como muestra en la gráfica situada dentro de la Figura 50a.
- (b) CFs con forma de tronco de cono (ver gráfica interior de la Figura 50b). Según se muestra en [61] y [116], este tipo de CF es el modelo más próximo a la forma real que toman los filamentos en los dispositivos.

En la Figura 50 se ha representado la resistencia inicial del CF en función del parámetro C_{CF0} (con el que controlamos la zona más estrecha del CF) en ambos casos. Se observa que la forma del CF es esencial para explicar el comportamiento de la resistencia del dispositivo RRAM. Tanto el grosor como la forma definen la resistencia total del CF y por tanto cómo será su evolución dado que su resistencia, entre otros factores, define la intensidad que circulará por él.

Por otro lado, en la Figura 50a se puede ver un gran incremento de la R_{CF0} para valores inferiores al 50% del C_{CF0} . En el caso de la Figura 50b, se obtienen valores ligeramente más altos de R_{CF0} ; sin embargo, desde el punto de vista de la forma del CF, se pueden extraer conclusiones similares.

Como se ha dicho anteriormente, la resistencia total afecta a la tensión de *reset*. Con el fin de traducir los datos de la Figura 50 en términos de esta tensión, ya que es una de los parámetros más importantes desde el punto de vista de la caracterización, se ha calculado esta relación y se ha representado en la Figura 51. En esta figura se han usado tres estructuras de conducción diferentes de un solo CF cuyos radios máximos se suponen fijos. Para las sucesivas simulaciones se ha variado el grosor de uno de los extremos de cada CF como se mostró en las gráficas interiores de la Figura 50. Se utilizan CFs con un perfil gaussiano, correspondientes con las curvas identificadas con (G), y filamentos con forma de tronco de cono (C).

Analizando la Figura 51 vemos que para un grosor máximo del CF dado, se obtiene una gran reducción de la tensión de *reset* cuanto más estrecho se hace el cuello de botella del CF siendo esta reducción mayor para los radios más pequeños (ver la curva correspondiente al 1 nm CF). Esta reducción de la tensión de *reset* es consecuencia del incremento local de la temperatura debido a la concentración de las líneas de corriente en la zona estrecha del CF, es decir, el CF se calienta más rápido cuanto más estrecha sea su constricción.

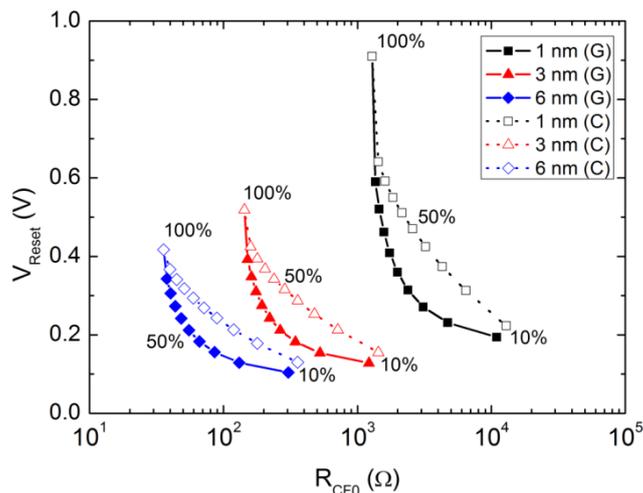


Figura 51: Tensión de *reset* en función de la resistencia inicial del CF con diferentes formas (sin tener en cuenta la resistencia serie por claridad). Las formas de los CFs son las usadas anteriormente en la Figura 50 donde G y C se corresponden con el perfil gaussiano y tronco de cono respectivamente [6].

A la vista de los resultados, no sólo la resistencia inicial determina la tensión de *reset*, sino que también la forma inicial del CF tiene una importante influencia. Nótese que para los CFs completamente formados, es decir, para filamentos cilíndricos con $C_{CF0} = 100\%$, el más grueso presenta la menor tensión de *reset*. Esto se debe a que la resistencia del filamento (R_{CF0}) es menor y por tanto mayor es el calentamiento que se produce ya que circula una corriente mayor por ellos.

Esto puede ser visto como que para dos CFs del mismo valor de R_{CF0} , uno completamente formado y el segundo con un perfil gaussiano, el CF gaussiano tendrá una tensión de *reset* menor ya que en la zona estrecha el calentamiento, o lo que es lo mismo, la disolución de éste es más rápido.

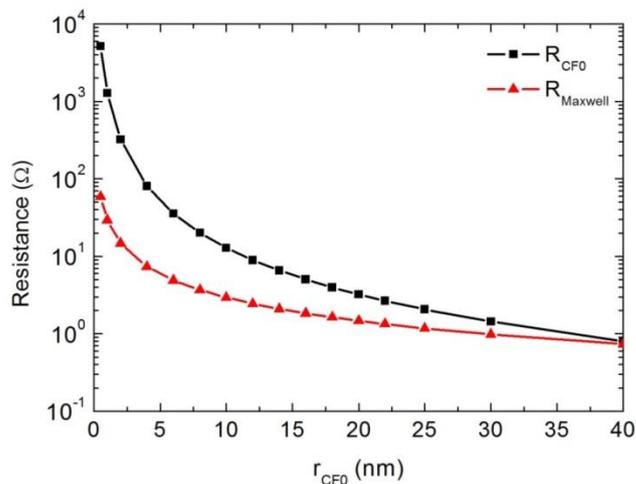


Figura 52: Resistencia inicial y de Maxwell en función del radio para filamentos perfectamente formados (cilíndricos).

Otros de los parámetros que afectan al comportamiento de la celda de memoria, y que hasta ahora no se ha tenido en consideración es la resistencia de Maxwell. En la Figura 52 se ha representado la resistencia inicial y la de Maxwell (ver Ecuación 1) para filamentos perfectamente cilíndricos en función de su radio. Como vemos, la resistencia de Maxwell tiene valores comparables a la resistencia del propio CF teniendo un papel más importante cuanto más grueso sea el CF. Esta resistencia, que está en serie con la del propio CF (ver Figura 33), también puede tener un papel importante en la modulación de la intensidad que circula por el CF y por ende, en la velocidad con que se calienta. Si el radio del CF es grande, la resistencia de Maxwell incluso tiene un papel predominante sobre la resistencia del propio CF. Como veremos más adelante (ver Figuras 53 y 58) este hecho produce un comportamiento característico que se ha usado en el calibrado de las constantes de simulación (Tabla 5).

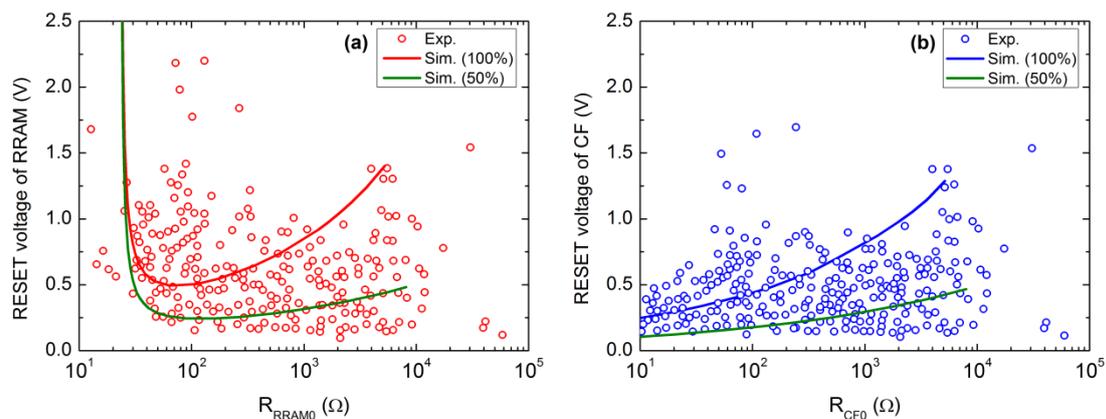


Figura 53: (a) Tensión de *reset* en función de la resistencia total inicial de la celda ($R_{RRAM0} = R_{SETUP} + R_{Mf} + R_{CF0} + R_{Mb}$) para diferentes radios y (b) tensión de *reset* en función de la resistencia inicial del CF para distintos radios (la resistencias serie y de Maxwell no se han tenido en cuenta en este caso). En ambos caso los datos experimentales se han tomado de [112] y las simulaciones se corresponden a CFs cilíndricos (Sim. (100%)) y CFs con perfil gaussiano cuyo $C_{CF0} = 50\%$ (Sim. (50%)).

Con el fin de clarificar el papel que juegan las resistencias externas al CF dentro del proceso de *reset*, en la Figura 53 se ha estudiado la dependencia de la tensión de *reset* del CF con la resistencia inicial (variando el radio de los CFs), con y sin estos efectos externos. El planteamiento usado para esta figura es diferente al usado en la Figura 51, es decir, en este caso se ha mantenido fija la forma del CF, por un lado CF cilíndrico ($C_{CF0} = 100\%$) y por otro lado CF gaussiano con $C_{CF0} = 50\%$ en su parte central, y se ha variado el radio máximo para variar así la resistencia. Esto ayuda a interpretar la distribución de las tensiones de *reset* en términos del tamaño de los CFs.

La distribución de tensiones de *reset* experimentales se abre al aumentar R_{CF0} . Una explicación de esta cuestión, en línea con los resultados de la Figura 53, se vincula a las diferentes formas de los CFs que probablemente pueden ser encontrados después de varios ciclos *set/reset* de los dispositivos experimentales. Además, la presencia de

varios CFs puede también llevar a los resultados experimentales fuera de las líneas sólidas que se muestran debido a la interacción que existe entre ellos mediante el acoplamiento eléctrico. No obstante, nótese que la mayoría de los datos experimentales se encuentran entre las dos curvas simuladas correspondientes a RRAMs con un solo CF lo que confirma el buen calibrado del simulador así como la validez del modelo.

4.2.2 Ciclos *reset* con múltiples filamentos conductores.

Otro tipo de ciclos *reset* de interés son los que presentan varios saltos en la corriente en su curva I-V antes de alcanzar el estado de HRS como se mostró en la Figura 48b. Este comportamiento se asocia a la presencia de estructuras de conducción complejas formadas por varios CFs, o por un CF principal del que parten varias ramificaciones, que se pueden ir rompiendo sucesivamente a lo largo de todo el ciclo de *reset*. Cada salto de corriente se corresponde con la ruptura de uno de los CFs, produciendo así una brusca disminución de la corriente total que circula por la celda.

Al igual que se hizo en la Figura 49, se han simulado varias curvas experimentales para este tipo de comportamiento. En este caso se selecciona el número de CFs (uno por cada salto que presente la curva I-V) y se le asigna una forma y dimensiones determinadas a cada uno de ellos de manera independiente. En la Figura 54 se muestra el resultado de estas simulaciones junto con sus correspondientes curvas experimentales:

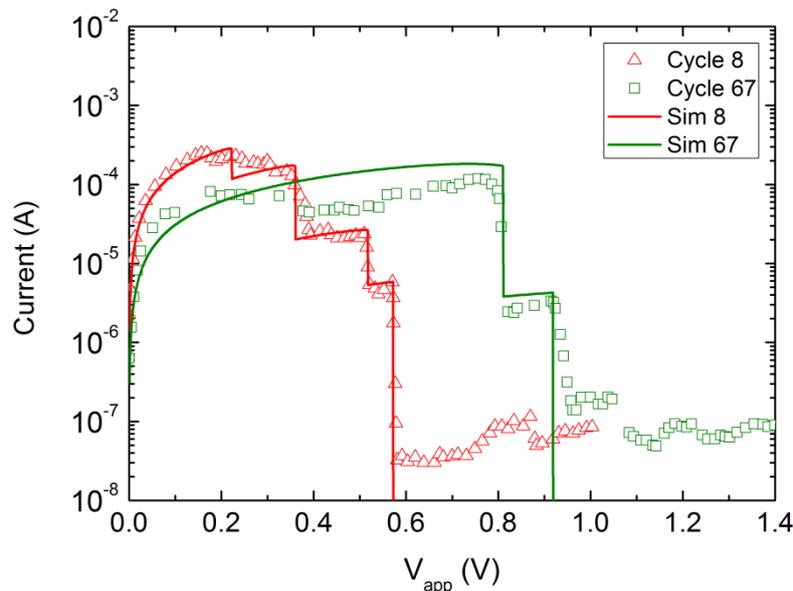


Figura 54: Curva I-V con varios escalones correspondientes a la celda RRAM de Cu/HfO₂/Pt. Las curvas experimentales se representan mediante símbolos mientras que las curvas simuladas se muestran con líneas. Cada escalón se corresponde con la ruptura de uno de los CFs que componen la estructura de conducción.

Para realizar las simulaciones de la figura anterior se usaron los siguientes CFs en cada caso:

Simulación	r_{CFmax} (nm)	C_{CF0}
Sim 8	1.70	30%
	1.00	49.7%
	0.53	42%
	0.50	47%
Sim 77	0.70	98%
	0.50	71%

Tabla 7: Valores de los radios de los CFs usados para realizar las simulaciones mostradas en la Figura 53. Todos los CFs tienen un perfil gaussiano.

Los diferentes saltos de corriente de la Figura 54, es decir, los *reset* parciales, se corresponden con la ruptura de cada uno de los filamentos (esto puede verse como la rotura parcial de un único CF [117]) que forman la estructura de conducción de la celda en ese ciclo. En este contexto, se han incluido CFs con zonas estrechas extremadamente delgadas (ver Tabla 7). Aunque a priori estos CFs no tienen sentido físico nos permiten, dentro del contexto de la simulación macroscópica, cuantificar de manera aproximada los efectos cuánticos de transporte que tienen lugar en la zona de ruptura y que afectan a la conducción, produciendo un incremento de la resistencia del CF [118, 119, 120].

Para clarificar la relación de cada uno de los CF con estos *reset* parciales, en la Figura 55 mostramos la curva I-V de una celda RRAM simulada compuesta por cuatro CFs de diferentes tamaños. Comparando la gráfica interior, donde se han representado las curvas de intensidad de cada CF por separado, se puede ver que cada uno de los escalones de corriente que aparecen en la curva I-V global se corresponde perfectamente con la ruptura de los diferentes CFs que forman la estructura de conducción, como se apunta en la ref. [117]. El nivel de intensidad total se corresponde con la suma de la intensidad que circula por todos los CFs. De este modo, con este modelo podemos explicar y simular las curvas de corrientes que se han medido (Figura 54), así como otras similares que se pueden encontrar en la literatura [115, 117, 121].

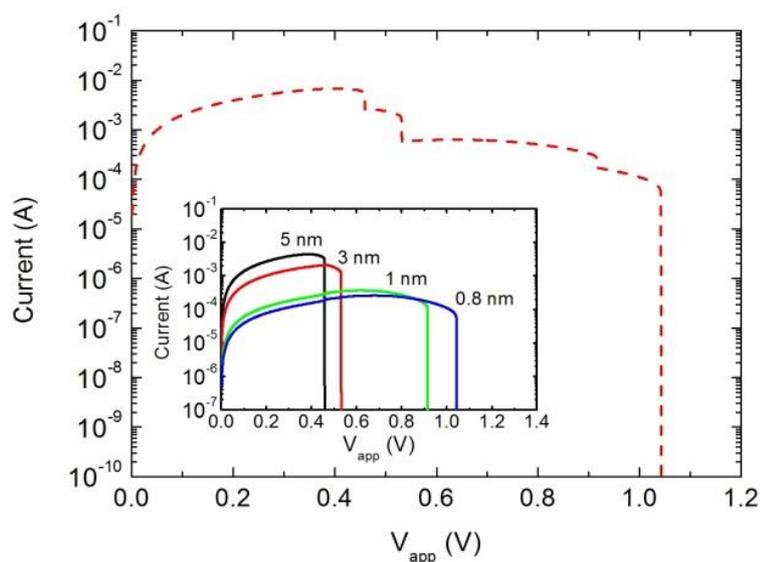


Figura 55: Simulación de la curva I-V de una celda RRAM con cuatro CFs con perfil gaussiano de diferentes tamaños. Las curvas I-V de cada uno de estos CFs por separado se han representado en la gráfica interior.

Siguiendo con esta filosofía se ha podido simular un gran número de dispositivos creando diferentes configuraciones de CFs. Los resultados obtenidos se muestran en la Figura 56 (líneas continuas) acompañados por un gran número de curvas experimentales (líneas discontinuas), poniendo de manifiesto el acuerdo que se ha conseguido entre los datos experimentales y los simulados.

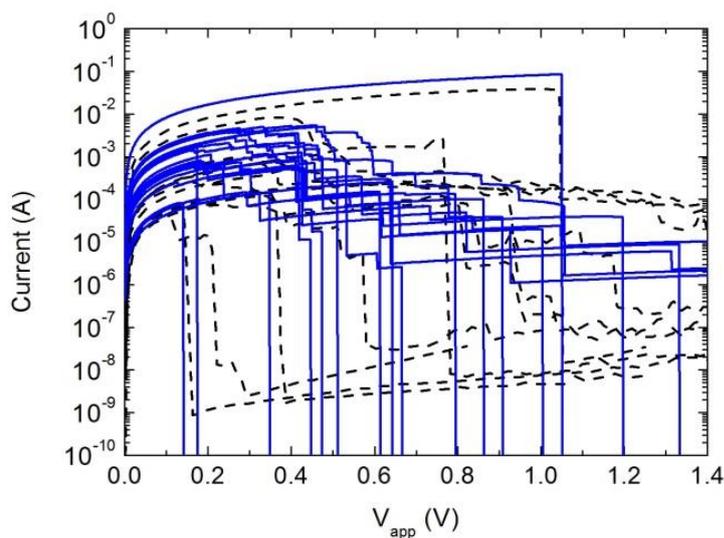


Figura 56: Comparación de una serie de curvas I-V experimentales, representadas por líneas discontinuas, con los resultados obtenidos mediante simulaciones. Cada simulación se ha realizado con diferentes estructuras de conducción variando tanto el número de CFs como su tamaño y forma [6].

Las estructuras de conducción simuladas en la Figura 56 se han obtenido de manera automática seleccionando en cada caso de manera pseudoaleatoria el número de CFs, los tamaños y su forma (pudiendo ser cilíndricos o de perfil gaussiano). Por selección pseudoaleatoria hay que entender que, como es lógico, se fijaron ciertas condiciones a la hora de determinar los parámetros de simulación con el fin de crear estructuras de conducción con sentido físico que nos aporten información de interés. Estas condiciones son:

- El número de CFs no puede ser mayor de 5: esta condición se impuso tras estudiar un gran número de curvas experimentales donde en general no se observaban una cantidad mayor de escalones que se pudieran achacar a *reset* parciales.
- El radio mayor y menor de cada CF debe de estar entre el radio iónico de la especie metálica que forma el CF (en este caso Cu) y la cota máxima de 40 nm obtenida durante el proceso de calibrado del simulador.

Una vez que el simulador está perfectamente calibrado y sabemos que podemos simular el comportamiento de este tipo de celdas con la suficiente precisión, se ha estudiado la distribución de las tensiones y corrientes de *reset*.

Para hacer este estudio se han definido dos puntos de *reset* diferentes [118] como se muestra en la Figura 57. El primero se corresponde con el nivel de intensidad máxima que se alcanza durante el proceso de *reset*, ya que es el punto donde comienza el proceso de destrucción de la estructura de conducción, es decir, del primer CF que se rompe. A este punto se le ha llamado RESET 1. El segundo, RESET 2, se ha definido como la tensión a la que se produce la ruptura del último CF y se llega a la zona donde la conducción se realiza mediante la corriente de Poole-Frenkel descrita en la sección 8.2. En definitiva, RESET 2 es definido como la transición final hacia el estado de HRS. Para las curvas en las que sólo hay un solo escalón (ver curva roja de la Figura 57) el punto RESET 1 y RESET 2 coinciden. En este caso se ha tomado el convenio de llamar a este punto RESET 1.

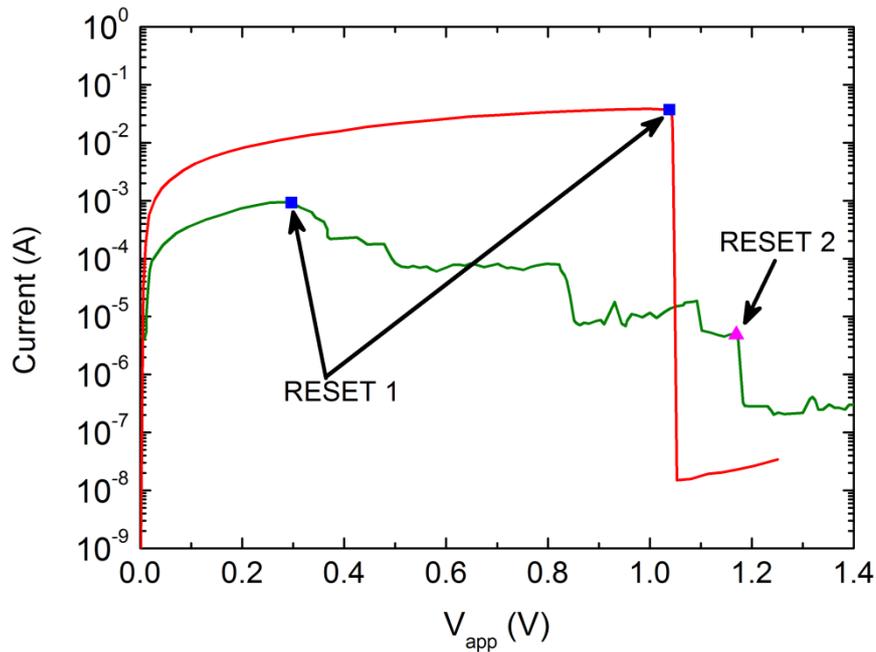


Figura 57: Definición de los puntos RESET 1 y RESET 2 para dos curvas I-V experimentales. Para las curvas que sólo presentan un único escalón se considera que sólo tienen RESET 1.

Habiendo estudiado una gran cantidad de curvas experimentales y otras tantas simuladas, en la Figura 58 se han representado la corriente de *reset* en función de la tensión de *reset* tanto para los RESET 1 como para los RESET 2.

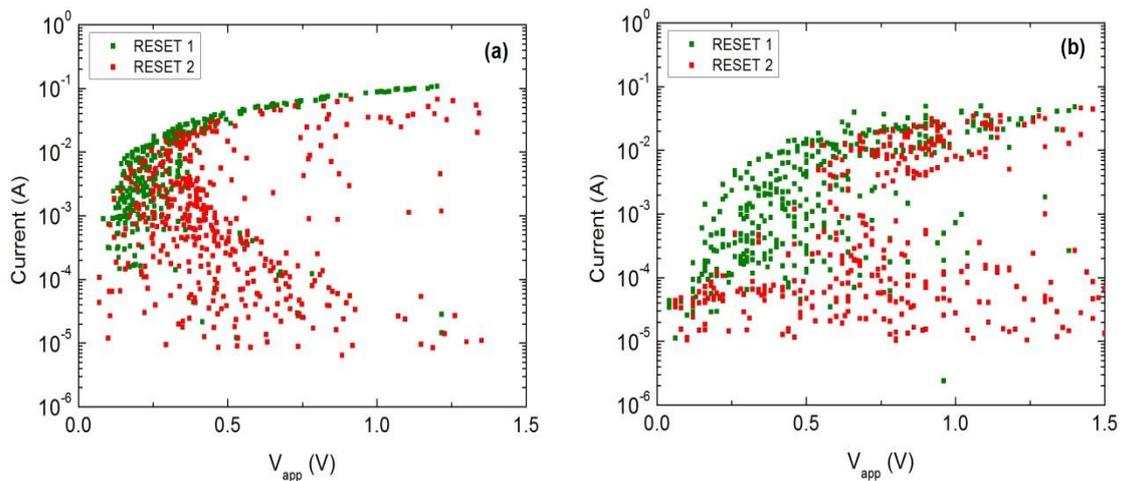


Figura 58: Corriente en función de la tensión de *reset* para una determinada celda RRAM en ciclos *set/reset* sucesivos. En (a) tenemos los resultados obtenidos a partir de curvas simuladas mientras que en (b) tenemos los resultados obtenidos a partir de los datos experimentales en línea con lo mostrado en [112, 6]. Parte de las curvas usadas para realizar ambas gráficas son las mostradas en la Figura 56.

Teniendo en cuenta las aproximaciones inherentes al modelo macroscópico con el que hemos simulado, la concordancia de los datos simulados con los datos experimentales es reseñable. En este respecto, la distribución de los puntos de RESET 1 y RESET 2 se asemeja bastante en ambas gráficas. También se puede destacar que la mayoría de los puntos de ambas distribuciones están comprendidas en los mismos intervalos de corriente y tensión (ambas figuras utilizan la misma escala); incluso la cola a bajas intensidades se puede ver en ambos casos. Una vez más, se demuestra que no sólo el tamaño de filamentos, sino también su forma y la composición de la estructura de conducción es importante para determinar la tensión de *reset*. Estos resultados sugieren que la mayoría de los efectos físicos que caracterizan el proceso de *reset* en estos dispositivos están bien descritos en nuestro simulador.

En la Figura 59, donde se ha representado la intensidad de *reset* en función de la tensión de *reset* de una celda RRAM con un CF cilíndrico que aumenta su radio, vemos que si la estructura de conducción estuviera compuesta por un único CF las tensiones e intensidades de *reset* se encontrarían distribuidas de una manera muy definida. La presencia de un mayor número de CFs, de la interacción entre ellos y de las variaciones de forma de los mismos da lugar a la distribución de valores que vemos en la Figura 56.

También es destacable la forma parecida a una “C” que toman los resultados de las simulaciones y de las medidas experimentales. Esta forma está relacionada con el papel que juega la resistencia en serie de los CFs. Al ir aumentando el radio de un CF cilíndrico, por tomar el caso más simple, esperaríamos que su tensión de *reset* (RESET 1 en la Figura 58) fuera disminuyendo al disminuir su resistencia como se puede deducir de la gráfica interior de la Figura 55. No obstante, si el CF tiene un radio lo suficientemente grande, la resistencia de Maxwell más la R_{setup} (ver Figura 34) toma un papel predominante sobre la del propio CF, provocando que no se siga esta tendencia. En estos casos, las resistencias externas al CF fijan un límite a la disminución de la tensión de *reset* del sistema debido a que la resistencia R_{setup} , la cual es la predominante en estos casos, es fija e independiente de la estructura de conducción. En la Figura 59 se ha representado la tensión de *reset* frente a la intensidad de *reset* para un CF cilíndrico variando su grosor teniendo en cuenta la resistencia serie ($R_{serie} = R_{Maxwell} + R_{setup}$) o eliminándola. Si nos fijamos en la línea verde, para la cual se ha eliminado R_{serie} , sigue la evolución esperada disminuyendo la tensión de *reset* conforme aumentamos el radio. Por el contrario, en cuanto consideramos esta resistencia externa (línea roja) aparece la mencionada forma de “C”.

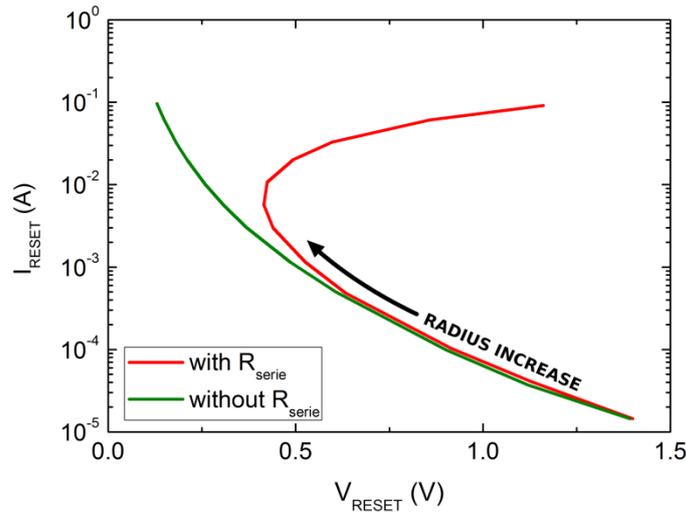


Figura 59: Comparativa de la evolución de la tensión y la corriente de *reset* en una celda RRAM con un único CF cilíndrico que va aumentando su grosor. Para la línea verde se ha eliminado R_{serie} ($R_{serie} = R_{Maxwell} + R_{setup}$) con lo que desaparece la evolución en forma de “C”.

Esto pone de manifiesto que los electrodos de la celda, responsables de R_{setup} , también tienen un papel relevante en el comportamiento de la celda como se apunta en [117].

4.2.3 Ciclos con *reset* progresivo.

Además de los ciclos de *reset* expuestos en las secciones anteriores, que se caracterizan por la existencia de uno o varios saltos abruptos de la intensidad en sus curvas I-V, existen otros tipos de ciclos *reset* para los cuales este decaimiento de la intensidad es mucho más suave. Estos son los denominados ciclos con *reset* progresivo [122].

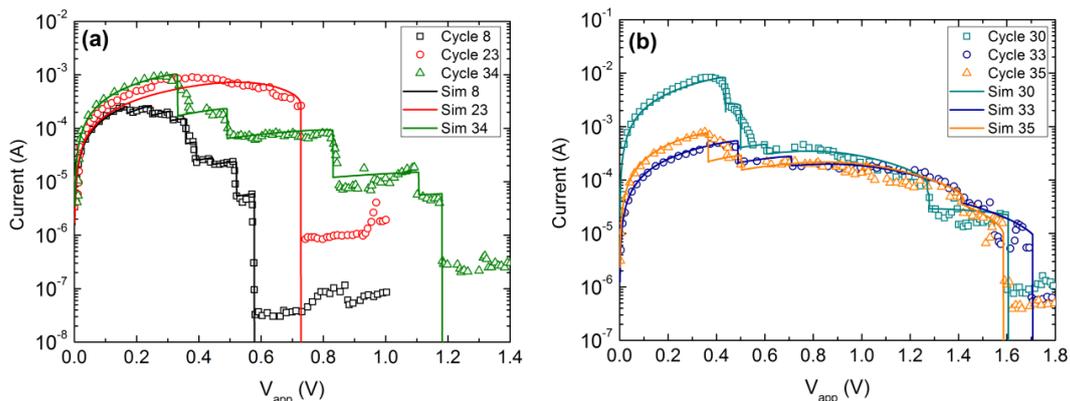


Figura 60: Corriente total que circula por la RRAM en función de la tensión aplicada. Los datos representados por símbolos se corresponden con las medidas experimentales de las celdas Cu/HfO₂/Pt descritas en la sección 4.2.4 y las líneas son resultados simulados. (a) Para la curva Sim 8, se han usado 8 CFs; Sim 23, 1 CF; Sim 34, 5 CFs; (b) Sim 30, 6 CFs; Sim 33, 4 CFs y Sim 35, 4 CFs [122].

Las curvas mostradas en la figura anterior se corresponden con las medidas experimentales obtenidas para la celda Cu/HfO₂/Pt descrita en la sección 4.2.4 y que mostramos en la Figura 56. A diferencia de las curvas representadas en las Figuras 49 y 52 (donde mostramos curvas I-V como ejemplos de ciclos de *reset* con uno o varios CFs) la caída de la corriente no es abrupta sino que va disminuyendo de manera progresiva. A la vista de las curvas de la Figura 60, podemos distinguir dos tipos de procesos de *reset* progresivo relacionados con dos diferentes configuraciones de la estructura de conducción: *reset* progresivo por acumulación de CFs y *reset* progresivo producido por un CF muy estrecho.

Reset progresivo por acumulación de CFs.

En dispositivos con varios CFs, como vimos en la sección anterior, cada escalón que aparece en la curva I-V de *reset* se corresponde con la ruptura de uno de los CFs que conforman la estructura de conducción de la celda. En el caso de que haya un gran número de CFs, y éstos sean de dimensiones parecidas, los saltos de corriente que se producen debido a la sucesiva ruptura de estos podrían solaparse y/o concatenarse con lo que no se puede distinguir una caída definida de la intensidad. En estos casos, las curvas I-V se componen de una sucesión de pequeñas caídas de la intensidad como podemos ver en los ciclos 34 y 8 de la Figura 60a y la parte inicial de las curvas de la Figura 60b. Dependiendo de cada combinación de CFs se puede encontrar una gran variedad en este tipo de procesos pudiendo tener una pendiente negativa relativamente regular como ocurre en el ciclo 8 (Figura 60a) o una sucesión de pequeños escalones que separan intervalos con decrecimiento continuado y progresivo como podemos ver en los ciclos 34 (Figura 60a) o el ciclo 33 (Figura 60b).

Reset progresivo producido por un CF muy estrecho.

Este tipo de *reset* progresivo se caracteriza por la presencia de un CF muy estrecho el cual se disuelve lentamente en comparación los procesos de *reset* no progresivos. El ejemplo más claro de este proceso lo podemos ver en el ciclo 23 mostrado en la Figura 60a. Como vemos, la caída de corriente desde que comienza a disolverse el CF hasta que se rompe se extiende durante unos 0.3 V aproximadamente, para este caso concreto, mientras que lo habitual es que este proceso no supere unos pocos milivoltios debido al efecto de la auto-aceleración [64] (ver Figura 49). En las curvas que se muestran en la Figura 60b también podemos ver este fenómeno pero acompañado por una caída progresiva previa debido a aglomeración de varios CFs.

Para entender este fenómeno debemos analizar la Ecuación (8), que recordamos a continuación, la cual da cuenta de la velocidad de difusión de la especie metálica que compone el CF (ver sección 2.2).

$$v_{diff}(z) = k_{diff} e^{\frac{-E_a}{k_B T_{CF}(z)}}$$

Existe una gran dependencia de la velocidad con la que se disuelve el CF con la temperatura ($T_{CF}(z)$) y la energía de activación (E_a) al estar incluidos dentro de la exponencial. Por este motivo, si simulamos un ciclo de *reset* para un dispositivo con un CF cilíndrico de radio medio (por ejemplo, de 10 nm), la difusión de la especie metálica tiene lugar de una manera rápida y localizada (Figura 61). En este caso, el aumento de la temperatura del CF mediante efecto Joule hace que la velocidad de difusión se “dispare” destruyendo rápidamente el CF, es decir, activado el proceso de autoaceleración [64].

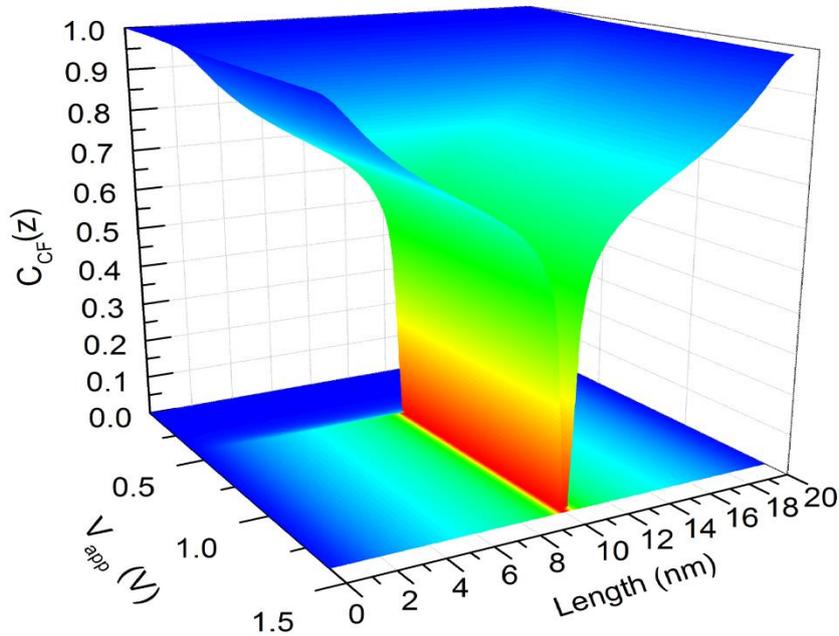


Figura 61: Concentración de especie metálica $C_{CF}(z)$ a lo largo del CF en función de la tensión aplicada a una celda RRAM de Cu/HfO₂/Pt de radio máximo 10 nm (el CF es completamente cilíndrico).

Como se puede ver en la Figura 61, la disolución del CF se produce de manera muy localizada (en el centro para el caso de los CFs cilíndricos). Dado que el proceso de auto-aceleración se activa en cuanto la temperatura comienza a subir, debido a la gran dependencia térmica de la velocidad de difusión, se produce una ruptura muy abrupta. Esta ruptura produce la consecuente caída, igualmente abrupta, de la intensidad en la curva I-V de *reset* correspondiente.

En el caso de un proceso de *reset* progresivo tenemos un CF muy delgado, en el que su resistencia interna (ver Ecuación (5)) y su resistencia de Maxwell (ver Ecuación (1)) asociada son muy altas, la corriente que circula por él es muy baja por lo que el

calentamiento por efecto Joule es muy lento. De este modo, al aumentar la temperatura lentamente, se puede “contener” la velocidad de difusión evitando así la destrucción instantánea del CF. Este efecto lo podemos ver de manera gráfica en la Figura 62, donde se ha dibujado el parámetro $C_{CF}(z)$ correspondiente a un dispositivo RRAM simulado con un único CF de 0.5 nm de radio máximo en función de la posición a lo largo del CF y de la tensión aplicada a la celda durante el proceso de *reset*.

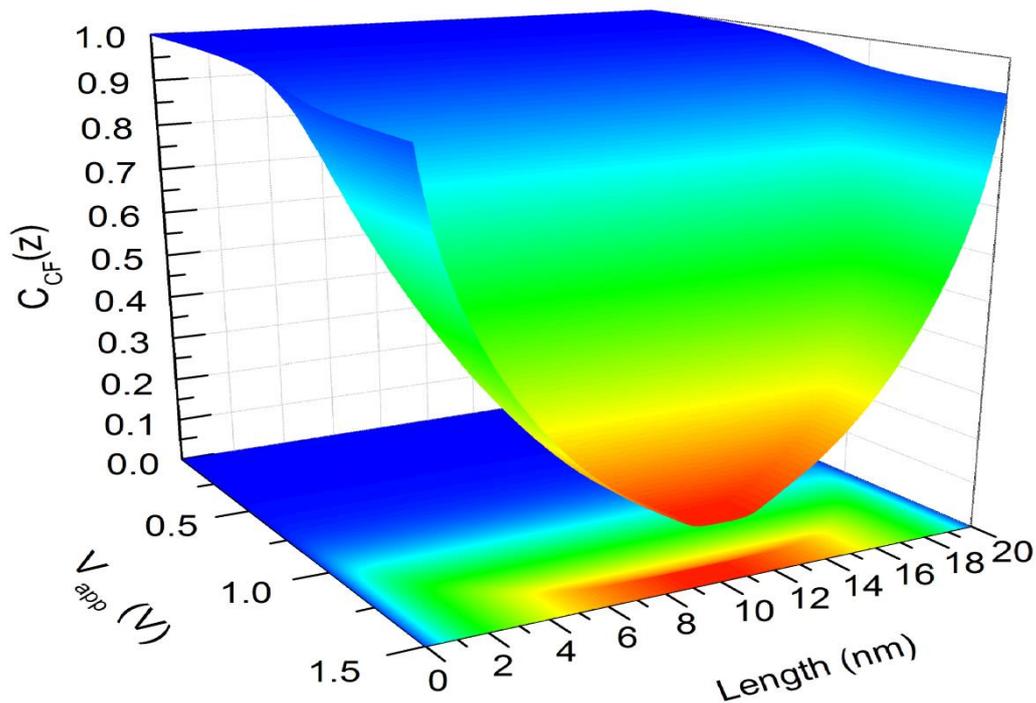


Figura 62: Concentración de especie metálica $C_{CF}(z)$ a lo largo del CF en función de la tensión aplicada a una celda RRAM de Cu/HfO₂/Pt de radio máximo 0.5 nm (el CF es completamente cilíndrico). Para este tamaño de CF el proceso de *reset* es progresivo.

Como se observa, este tipo de CFs sufre una suave reducción del radio del CF durante el proceso de *reset* mostrado en la Figura 62. La progresiva reducción del radio evoluciona hasta llegar a su completa rotura alcanzando así el estado de HRS. Este proceso de destrucción da como resultado la caída progresiva de la intensidad, como por ejemplo la correspondiente al ciclo 23 (ver Figura 60a), es decir, da lugar a un *reset* progresivo.

Con el fin de dejar patente la relación del *reset* progresivo con el grosor de los CFs, en la Figura 63 mostramos varias curvas I-V de *reset* simuladas para varias celdas RRAM con un único CF cilíndrico de diferentes grosores.

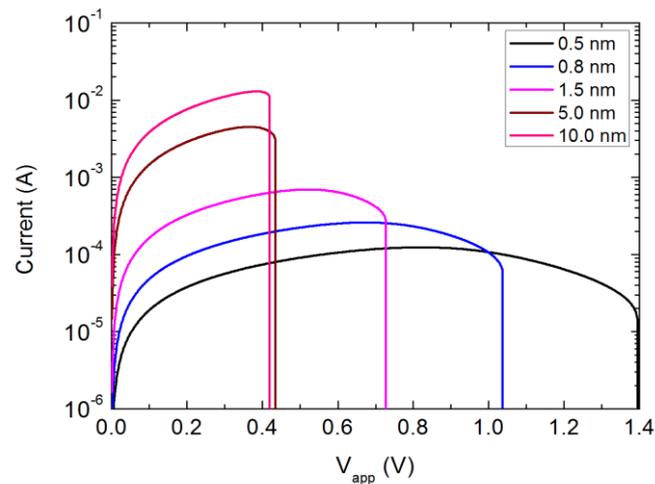


Figura 63: Corriente que circula por una celda RRAM en función de la tensión aplicada para varios dispositivos de un único CF cilíndrico para distintos grosores. Conforme aumentamos el radio del CF pasamos de un proceso de *reset* progresivo a uno abrupto [122].

Se puede observar (Figura 63) que los dispositivos que cuentan con un CF delgado sufren un *reset* progresivo (0.5 nm, 0.8 nm e incluso el de 1.5 nm). Sin embargo, los dispositivos con CFs gruesos (5 nm, 10 nm) muestran una caída abrupta de la intensidad como se esperaba. Comparando todas las curvas queda claro que conforme el radio va aumentando, y por tanto la intensidad que circula por ellos, el proceso de disolución de los CFs se va acortando pasando de un procesos de *reset* progresivo a uno abrupto.

4.2.4 Fabricación del dispositivo.

La estructura de la celda de Cu/HfO₂/Pt fabricada se muestra en la Figura 64. La celda RRAM propiamente dicha se corresponde con las tres primeras capas comenzando desde arriba. El resto de materiales se incluyen para dar más información de la tecnología utilizada [112].

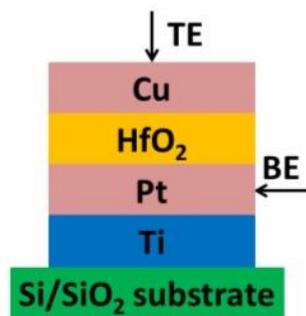


Figura 64: Esquema de la celda RRAM de Cu/HfO₂/Pt fabricada por *Laboratory of Nanofabrication and Novel Device Integration, Institute of Microelectronics, Chinese Academy of Sciences*.

La fabricación de la celda comienza con la deposición de una lámina de Pt de 70 nm de espesor como electrodo inferior (BE) mediante evaporación por haz de electrones sobre un sustrato de Ti/SiO₂/Si con Ti (10 nm), que se ha creado previamente como superficie adhesiva entre el BE y el SiO₂. Seguidamente se deposita sobre el BE la capa de 20 nm de HfO₂ mediante *ion beam sputtering*. Finalmente, el electrodo superior de Cu (TE) de 100 nm de espesor es depositado por evaporación mediante haz de electrones y modelado mediante *lift-off*.

Colocando las puntas de medida en los contacto BE y TE (ver Figura 64), los dispositivos son sometidos a ciclos de *set/reset* a temperatura ambiente usando el sistema de caracterización de semiconductores Keithley 4200-SCS [112]. Durante las medidas, el BE se mantuvo siempre conectado a tierra mientras que el TE se polariza según el proceso que se esté midiendo, es decir, si se está realizando un ciclo de *set* o *reset*. Las medidas se realizaron aplicando una rampa de tensión creciente entre 0 V y 2 V para los procesos de *reset*, suficiente para alcanzar el estado de HRS en todos los ciclos. Para prevenir la rotura permanente del dieléctrico durante la transición *set*, se usó una intensidad límite (intensidad de *compliance*) de 0.1 mA la cual es adecuada para obtener una conmutación estable con suficiente durabilidad.

4.3 Celdas tipo Ni/HfO₂/Si-n⁺.

Como se describió en la sección 3.2.2.2 podemos encontrar celdas RRAM que presentan un comportamiento no lineal durante el proceso de *reset* en el régimen de bajas tensiones. Uno de estos dispositivos es la celda Ni/HfO₂/Si-n⁺ fabricada en el IMB-CNM (CSIC) de Barcelona.

Al igual que se hizo en la sección anterior, hemos usado el simulador SIM²RRAM para reproducir las medidas experimentales implementando para ello el modelo QPC descrito en la sección 3.2.2.2 [7]. Tras el correspondiente calibrado, realizado de forma análoga a la celda Cu/HfO₂/Pt, se han obtenido los parámetros que se muestran en la Tabla 8.

Junto con los parámetros mostrados en la Tabla 8, que describen los materiales que componen la celda y los CFs, hemos añadido aquellos que representan al modelo QPC. A diferencia de los parámetros mostrados en la Tabla 8, como cada CF se forma y evoluciona de diferente manera en cada ciclo *set/reset*, los parámetros asociados al modelo QPC no son comunes para todas las simulaciones sino que deben de ajustarse para cada caso concreto. Los parámetros necesarios para describir el modelo son los descritos en la Ec. 12, es decir, N , α , Φ y β . Dado que los tres últimos están relacionados mediante la Ec. 13, por simplicidad se han tomado como valores fijos para todas las simulaciones $\Phi=1.2$ eV y $\beta=0.9$ mientras que N y α se ajustan para cada CF.

Parámetro	Valor
k_{th}	$3 \text{ W K}^{-1} \text{ m}^{-1}$
h	$4 \times 10^{10} \text{ W K}^{-1} \text{ m}^{-2}$
σ_{ox}	$1.25 \Omega^{-1} \text{ m}^{-1}$
σ_{CF0}	$3 \times 10^5 \Omega^{-1} \text{ m}^{-1}$
α_T	$5 \times 10^{-3} \text{ K}^{-1}$
k_{diff}	$5 \times 10^8 \text{ s}^{-1}$
E_a	1.2 eV
T_m	2730 K
r_{at}	$7.8 \times 10^{-11} \text{ m}$
t_{ox}	20 nm
T_{ox}	300 K
$\sigma_{Cto} [\text{Ni}]$	$8.33 \times 10^6 \Omega^{-1} \text{ m}^{-1}$
$\sigma_{Cbo} [\text{Si-n}^+]$	$1.0 \times 10^4 \Omega^{-1} \text{ m}^{-1}$
R_{setup}	13Ω

Tabla 8: Parámetros utilizados en las simulaciones para caracterizar los materiales que conforman la celda de memoria Ni/HfO₂/Si-n⁺.

Una vez completado el calibrado del simulador, lo hemos usado para reproducir las medidas experimentales obtenidas para estos dispositivos cuya fabricación describiremos en la sección 4.3.2.

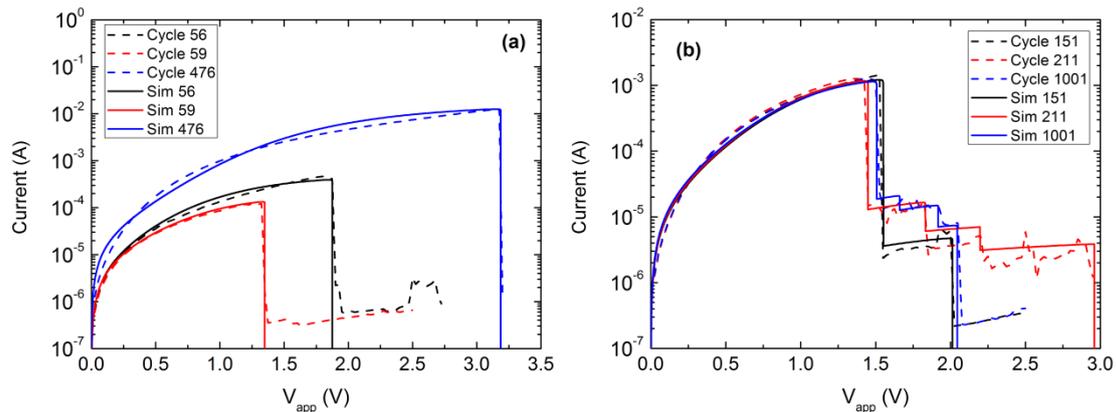


Figura 65: Intensidad en función de la tensión aplicada a la celda RRAM Cu/HfO₂/Si-n⁺. Las líneas continuas se corresponden con los resultados obtenidos a partir de las simulaciones realizadas con SIM²RRAM mientras que las líneas discontinuas han sido obtenidas experimentalmente. En (a) se representan ciclos de *reset* con una única caída brusca de la intensidad y en (b) tenemos ciclos en los que aparecen varias caídas.

Para reproducir las curvas experimentales mostradas en la Figura 65 se usaron CFs con forma de tronco de cono [95, 80, 96] para crear las estructuras de conducción, cuyas características se muestran en la Tabla 9. Continuando con la notación que hemos seguido en las secciones anteriores, el radio máximo de los CF usados lo denotamos como r_{CFmax} y la reducción respecto a éste de la parte más estrecha del CF, la cual se encuentra pegada al contacto de Si-n⁺, se describe por medio del parámetro C_{CF0} .

Simulación	r_{CFmax} (nm)	C_{CF0}	N	α
Sim 56	9	17%	276	5.5
Sim 59	12	6%	56	4.1
Sim 476	27	60%	500	4.9
Sim 151	30	9.5%	500	5.2
	1.5	6.0%	1	3.9
Sim 211	38	7.00%	500	0.9
	3	5.00%	1	0.9
	0.90	8.89%	1	0.9
	0.58	13.79%	1	0.9
Sim 1001	30	9.0%	500	0.9
	3	4.3%	1	0.9
	2.5	2.5%	1	0.9
	2	6.0%	1	0.9

Tabla 9: Relación de CFs usados en cada simulación mostrada en la Figura 65 para crear la estructura de conducción de cada celda así como sus correspondientes parámetros del modelo QPC. En todos los casos se han usado CFs con forma de tronco de cono.

Al igual que ocurre con las celdas Cu/HfO₂/Pt, se pueden encontrar también dos tipos de curvas I-V características para el proceso de *reset*: en la Figura 65a mostramos las curvas I-V correspondientes a estructuras de conducción compuestas con un solo CF, es decir, curvas en las que sólo aparece una caída brusca de la intensidad. En las curvas de la Figura 65b aparecen varios escalones durante el ciclo de *reset*. En estos casos se han empleado varios CFs para crear sus estructuras de conducción, concretamente 4 CFs para los ciclos 1001 y 211 y 2 CFs para el ciclo 151. Las estructuras de conducción que forman este tipo de dispositivos se caracterizan por tener un CF principal con forma de tronco de cono con un r_{CFmax} muy grande (alrededor de los 30 nm) pero estrecho en el lado opuesto, es decir, con un C_{CF0} bajo acompañado por otros CFs considerablemente más delgados (en el caso de haberlos).

Además, en la zona de bajas tensiones, región donde el comportamiento no lineal modelado mediante el QPC tiene un papel predominante, se reproduce la curva I-V correctamente en todos los casos. Aun así, con el fin de verificar que la elección de los parámetros del modelo QPC ha sido coherente, veamos los valores que toma el parámetro t_B (Ec. 13). Teniendo en cuenta todos los valores usados para las simulaciones mostradas en la Figura 65 (además de otras que no se muestran), todos los valores de t_B para los dispositivos analizados aquí están en el intervalo [0.51, 1.13] nm, considerando una masa efectiva en el dieléctrico de $0.44m_0$. Esto significa que el ancho de la barrera QPC del CF es menor que el 5% de la longitud total del CF en nuestro estudio, lo cual es aceptable dentro del modelo.

Por último, al igual que hicimos para la celda de Cu/HfO₂/Pt, hemos comparado una serie de valores de corriente y tensiones de *reset* experimentales (en ambos casos se han tomado los valores de los RESET 1) con una amplia muestra de curvas I-V provenientes de un gran número de simulaciones con diferentes estructuras de conducción (Figura 66). El modelo reproduce con precisión los resultados experimentales obtenidos para los dispositivos RRAM tipo Ni/HfO₂/Si-n⁺.

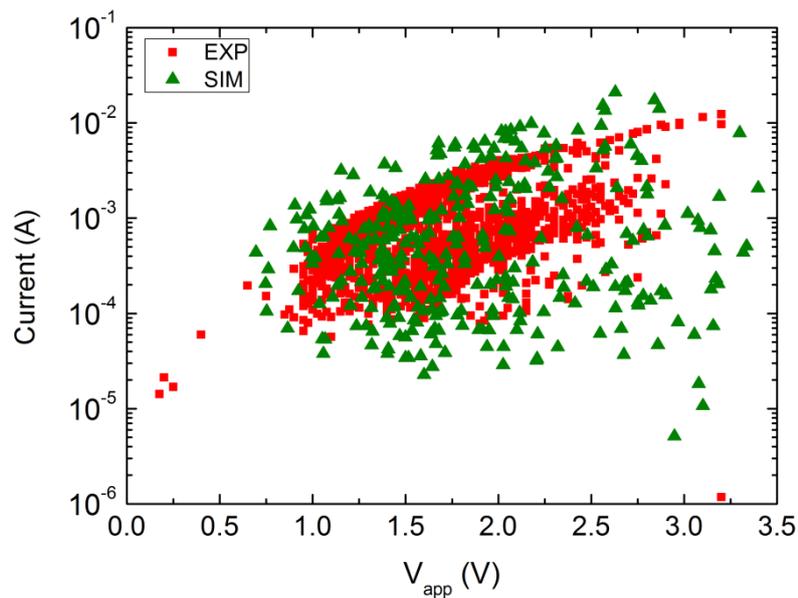


Figura 66: Comparación de las intensidades de *reset* en función de las tensiones de *reset* de las curvas I-V experimentales (símbolos rojos) y las curvas I-V obtenidas mediante simulación (símbolos verdes).

4.3.1 Efecto de la barrera túnel. Modelo *Quantum Point Contact*.

Este nuevo mecanismo físico que se ha añadido al modelo general respecto al de las celdas que presentan un comportamiento lineal (ver sección 4.2), añade una nueva componente de resistencia (R_{QPC}) a la celda que afecta al comportamiento global de la misma. Esta nueva componente resistiva es la responsable del comportamiento no lineal de la curva I-V a bajas tensiones.

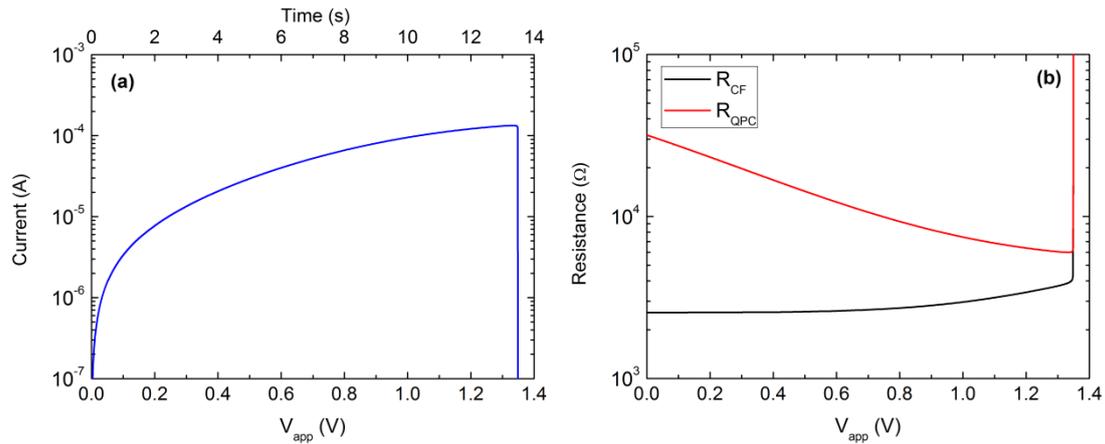


Figura 67: (a) Curva I-V simulada para un dispositivo con un solo CF. En (b) tenemos la resistencia del propio CF (R_{CF}) y la resistencia asociada a la interface QPC (R_{QPC}) en función de la tensión aplicada a la celda.

En la Figura 67a se muestra la curva I-V correspondiente a la simulación de un dispositivo con un único CF con forma de tronco de cono. Junto a ella, en la Figura 67b, mostramos la resistencia correspondiente al CF (R_{CF}) y la nueva resistencia asociada a la barrera QPC (R_{QPC}). R_{QPC} es la predominante a bajas tensiones en comparación con R_{CF} . De este modo, en este rango de tensiones, la corriente del dispositivo está controlada principalmente por la resistencia asociada a los caminos cuánticos. Sin embargo, conforme la tensión aplicada va aumentando, R_{QPC} pierde importancia frente a R_{CF} en la determinación de la corriente que circula por el CF. Según el grosor del CF el papel de estas resistencias se puede invertir, es decir, que R_{CF} sea la predominante. En el momento que la resistencia del CF predomina volvemos al régimen de transporte óhmico a tensiones altas. Una vez se alcanza la tensión de *reset*, ambas resistencias divergen debido a la ruptura del CF, alcanzando así el estado de HRS.

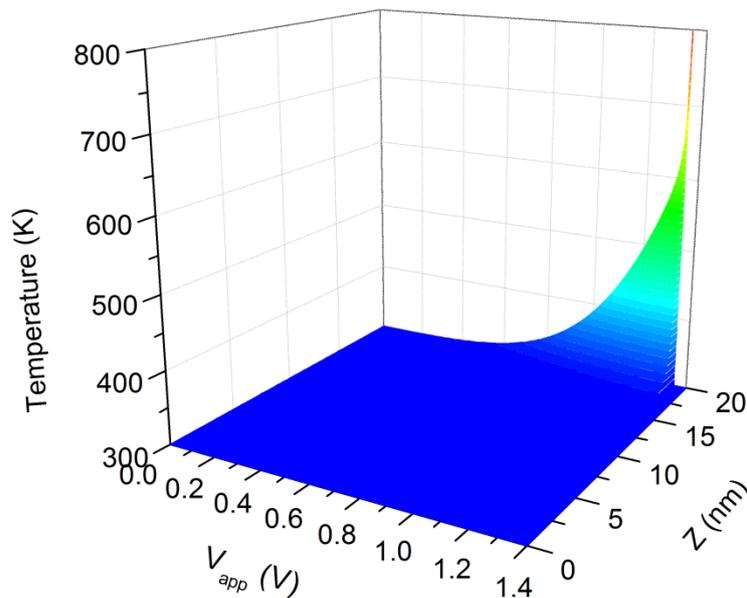


Figura 68: Temperatura punto a punto a lo largo del CF en función de la tensión aplicada para el CF usado en la Figura 67. La ruptura de este CF se produce en la región más caliente, que coincide con la zona más estrecha del mismo.

Aunque se haya añadido una nueva componente al modelo, ésta sólo altera la conducción a través de los CFs pero el proceso de ruptura sigue siendo térmico. En la Figura 68 podemos ver el proceso de *reset* mostrado en la Figura 67, en términos de la temperatura del CF en cada punto. La temperatura a lo largo del CF se muestra en función de la rampa de tensión aplicada. En el entorno de la tensión de *reset* encontramos un brusco aumento de la temperatura en la zona más estrecha del CF (el CF tiene forma de tronco de cono, la zona más estrecha se encuentra en $z = 20$ nm). Esta subida de la temperatura, junto con el pico de temperatura que se encuentra en la tensión de *reset*, es compatible con el proceso de auto-aceleración que tiene lugar cuando hay una ruptura del CF (ver sección 2.1). A la vista de este resultado, queda claro que el modelo QPC nos permite reproducir el comportamiento no lineal a bajas tensiones sin alterar los fundamentos del RS descritos anteriormente.

Con el fin de estudiar la influencia del parámetro α (factor de forma de la barrera QPC) en la conducción de la celda, en la Figura 69a mostramos dos curvas I-V simuladas para sendos dispositivos RRAM con CFs idénticos pero con diferentes valores del parámetro α (ver Ec. 12). Del mismo modo, en la Figura 69b se muestran las resistencias R_{CF} y R_{QPC} de las curvas I-V mostradas en la Figura 69a.

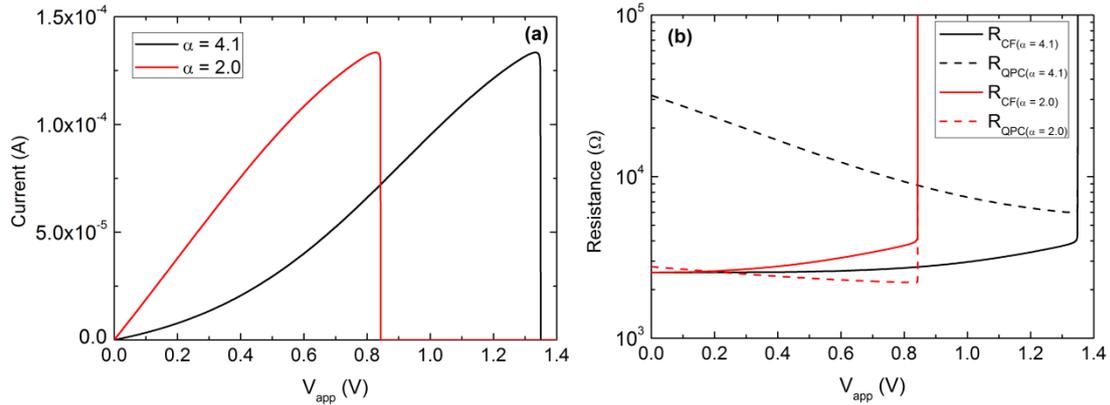


Figura 69: (a) Curvas I-V simuladas para dos dispositivos idénticos con distintos valores de α . En (b) se muestran sus correspondientes resistencias R_{CF} y R_{QPC} en ambos casos [122].

Como vemos, este parámetro tiene una gran influencia sobre la no linealidad de la curva de corriente a bajas tensiones y también sobre la determinación de la tensión de *reset*. Al aumentar el valor de este parámetro aumenta el papel que juega la R_{QPC} en comparación con el valor de la R_{CF} . Esto se debe a que al aumentar el valor de α se aumenta el ancho de la barrera de potencial en los caminos cuánticos (ver Ec. 13), o lo que es lo mismo, el ancho de la interfaz QPC (t_B).

4.3.2 Fabricación del dispositivo.

En la Figura 70a podemos ver un esquema de la sección transversal del dispositivo Ni/HfO₂/Si-n⁺ fabricado en el Institut de Microelectrònica de Barcelona, IMB-CNM (CSIC). Cada una de estas celdas, de área 80 x 80 μm^2 , fueron fabricadas en obleas de silicio Czochralski tipo n (100) con resistencia de (0.007–0.013) Ωcm . Sobre ellas se depositó una capa de 20 nm de espesor de HfO₂ ALD (*Atomic Layer Deposition*) a 200°C usando tetrakis (dimetilamida)-Hafnio (TDMAH), H₂O como precursor y N₂ como portador y gas de purga. Después del crecimiento de esta superficie dieléctrica se realizó un recocido a alta temperatura (800 °C) durante 30 min en un ambiente de N₂. Finalmente, el electrodo superior de Ni, de 200 nm de espesor, fue depositado por *magnetron sputtering* [92].

Para las medidas de las curvas característica I-V de los ciclos *set/reset* se ha usado el analizador de parámetros de semiconductores HP-4155B. El voltaje fue aplicado al electrodo superior de Ni mientras que el sustrato de silicio fue conectado a tierra.

Con el fin de automatizar las sucesivas medidas de las curvas I-V y poder detectar dinámicamente las tensiones de *set* y *reset*, se conectó el analizador de parámetros mediante un bus GPIB (*General Purpose Instrumentation Bus*) al PC permitiendo así controlar las medidas mediante MATLAB. Para la medida de los ciclos de *set* se fijó, mediante el software de control implementado en MATLAB, una intensidad de

compliance de 100 μA la cual es suficiente para permitir que se produzcan estos procesos preservando la integridad de la celda.

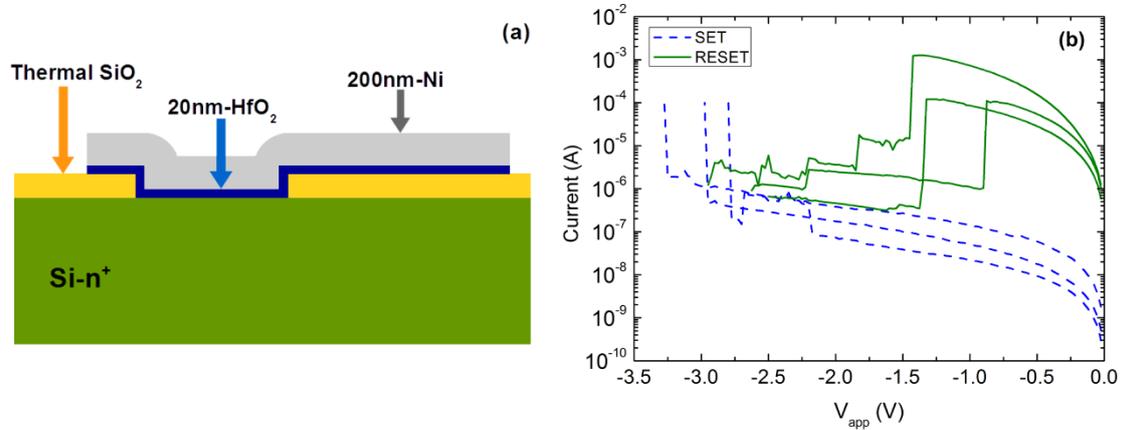


Figura 70: (a) Esquema de la sección transversal de la celda Ni/HfO₂/Si-n⁺, (b) curvas I-V experimentales características obtenidas durante las medidas de los ciclos *set/reset*. En los ciclos *set* se empleó una intensidad de *compliance* de 100 μA .

Para este estudio se midieron más de 3000 ciclos *set/reset* sucesivos. Una muestra de las curvas I-V, tanto de *set* (líneas azules) como de *reset* (líneas verdes), que se obtuvieron se puede ver en la Figura 70b.

5

Métodos de cálculo de la tensión de *reset*

5.1 Introducción.

Además del estudio de los mecanismos internos que controlan el funcionamiento de las RRAMs también es importante caracterizar estos dispositivos desde el punto de vista del modelado compacto. Esto quiere decir que es importante definir parámetros externos con los que se pueda caracterizar el comportamiento de la celda [123] con vistas a la implementación de modelos matemáticos en simuladores de circuitos para asistir en el diseño de circuitos con RRAMs. Para extraer estos parámetros es necesario definir algoritmos numéricos adecuados para aplicar a los datos experimentales.

De acuerdo con este planteamiento, y como complemento al simulador SIM²RRAM, hemos desarrollado y analizado varios algoritmos orientados a la extracción de la tensión de *reset* (V_{RESET}) de las curvas experimentales [122]. Esta variable es de gran interés debido a que, además de ser un parámetro al que se puede acceder externamente, puede usarse para definir la frontera entre los estados de LRS y HRS. No obstante, definir de manera exacta y unívoca qué es esta tensión de *reset* no es una cuestión trivial debido a la gran variabilidad de procesos de *reset* que podemos encontrar (procesos de *reset* con uno o varios CFs, *reset* progresivo, etc.), como ya vimos en la sección 4.2. Aunque esto pueda ser complejo, esta es una de las claves en el contexto del análisis físico y del modelado compacto de los dispositivos RRAM, teniendo en cuenta que la variabilidad es una de las piedras angulares de la investigación en RRAM [13, 124].

Además de la variabilidad de los procesos de *reset* ya comentada, en el análisis de las curvas I-V experimentales se debe tener en cuenta otros factores en la elaboración de algoritmos que nos permitan extraer la tensión de *reset* de manera eficiente. A diferencia de lo que ocurre con los ciclos de *reset* simulados, donde conocemos y controlamos qué está ocurriendo dentro de la celda en cada instante, en los ciclos experimentales se pueden solapar varios efectos internos en la operación de la celda, además del “ruido” propio de toda medida, sin posibilidad de discernir unos de otros. Por tanto hemos propuesto dos posibles definiciones de la tensión de *reset*, así como varios algoritmos de extracción con el fin de arrojar luz sobre esta importante cuestión.

5.2 Métodos de extracción de la tensión de *reset*.

La tensión V_{RESET} no es un parámetro que refleja las características físicas inherentes de un dispositivo electrónico como ocurre, por ejemplo, con la tensión umbral de los transistores MOSFETs [125]. Como consecuencia, el procedimiento de extracción de la V_{RESET} depende en gran medida de la definición que se dé para este parámetro. En esta tesis se ha optado por las dos definiciones siguientes:

- V_{RESET} se corresponde con la tensión aplicada a la celda en la que se inicia el proceso de destrucción de la estructura de conducción de la celda, es decir, la tensión a la cual se inicia la caída de la intensidad. A esta tensión la denominaremos en adelante V_{RSO} .
- V_{RESET} se corresponde con la tensión externa aplicada cuando se rompe completamente el primer CF de la estructura de conducción, la cual queda reflejada por una caída brusca de la intensidad. A esta tensión la hemos llamado V_{RSF} .

En la Figura 71 mostramos los valores que toman cada una de las dos definiciones de la tensión de *reset* para dos curvas de *reset* simuladas. Como vemos, la tensión de *reset* V_{RSO} , que se corresponde con el inicio de la disolución del CF, se detecta como el cambio de la pendiente de la curva, es decir, cuando se encuentra el máximo. Por otro lado, al corresponderse V_{RSF} con la tensión a la que se rompe completamente el primer CF de la estructura de conducción, ésta se detecta como la tensión a la que se produce una brusca caída de la intensidad. Según el tipo de proceso de *reset* que se dé, la diferencia entre V_{RSO} y V_{RSF} pueden variar. En los procesos de *reset* progresivo (línea azul de la Figura 71) la separación suele ser considerable. Conforme el proceso de *reset* es más brusco, estos dos valores se van acercando (línea marrón de la Figura 71) e incluso pueden llegar a coincidir.

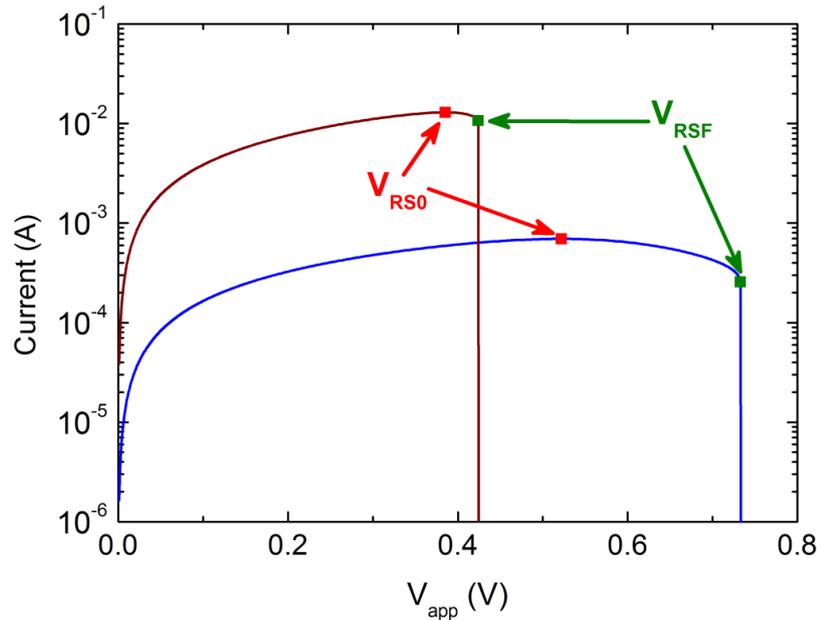


Figura 71: Corriente en función de la tensión aplicada para dos celdas RRAM simuladas con un único CF. Se han señalado las tensiones de *reset* según las definiciones de V_{RS0} y V_{RSf} . En el caso de la curva azul (correspondiente a un *reset* progresivo) estas dos tensiones se encuentran muy alejadas. Conforme el proceso se hace más abrupto, estas dos tensiones se van acercando.

No hay que olvidar que las curvas I-V experimentales no tiene un comportamiento tan “limpio” como las curvas simuladas mostradas en la Figura 71. Por este motivo, es necesario el desarrollo de algoritmos que permitan detectar estas tensiones de manera eficiente distinguiéndolas, en la medida de lo posible, de otros efectos. Teniendo en cuenta todos estos condicionantes, hemos creado varios algoritmos para la detección automática de la tensión de *reset* sobre las curvas I-V experimentales.

Método 1

Este método está orientado a la detección de la tensión de *reset* V_{RS0} . Por lo tanto, se busca la tensión a la que se produce el primer descenso de la intensidad sin importar la magnitud de esta reducción. Además, se requiere que la tensión seleccionada sea la asociada con la intensidad máxima de toda la curva I-V del proceso de *reset*.

Esta doble condición se impone con el objetivo de discriminar la caída de intensidad que se produce por el inicio de la destrucción del CF, que es la que nos interesa, de las caídas que se producen debido al ruido de la propia medida. Además, en el caso de que obtengamos varias tensiones consecutivas cuya intensidad asociada se corresponda con la intensidad máxima de la curva, nos aseguramos que se escoge la tensión en la que justo se produce el primer descenso de la corriente.

Método 2

El uso de este método requiere un análisis previo, el cual describiremos más adelante, de las curvas experimentales obtenidas para la celda RRAM que esté bajo nuestro estudio. El objetivo de este método no es el de detectar la primera caída de la intensidad que se produzca como hace el Método 1, sino que su objetivo es detectar una caída cuya pendiente esté dentro de un rango determinado como se muestra en la Figura 72.

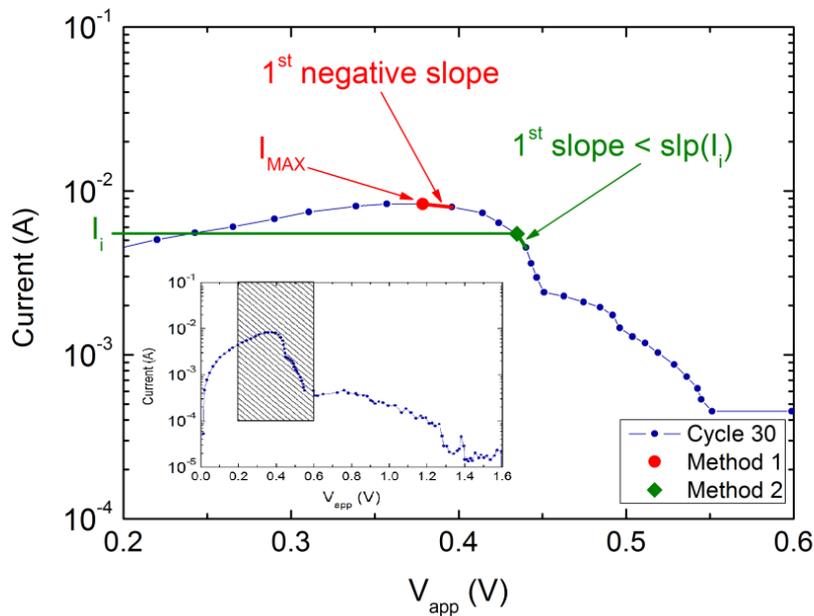


Figura 72: Corriente en función de la tensión aplicada de una celda RRAM simulada. Se describen gráficamente los métodos numéricos utilizados para el Método 1 (círculos) y el Método 2 (rombos) para extraer V_{RESET} . Los datos mostrados son parte de una curva de *reset* completa (mostrada en la gráfica interior). Notar que la tensión V_{RESET} determinada como la primera caída negativa de la corriente (Método 1) coincide con el máximo de la curva I-V. En el procedimiento descrito por el Método 2 se establece la V_{RESET} como la primera caída de intensidad con una pendiente menor (más pronunciada) que la obtenida mediante la ecuación (27).

Para definir cuál es el rango de pendientes que se quiere detectar como caída producida como consecuencia de un proceso de *reset*, previamente se tiene que llevar a cabo un análisis de las pendientes de las caídas de intensidad que se producen en un conjunto de curvas experimentales. Después de dicho análisis se obtiene una función que nos relacione la magnitud de la intensidad a la que se produce la caída con la pendiente de ésta.

Se ha aplicado este método a la celda RRAM tipo Cu/HfO₂/Pt descrita en la sección 4.2.4. Tras un análisis de unas 20 curvas I-V de *reset* hemos realizado un ajuste polinómico de segundo orden que aproxima la relación que existe entre la magnitud de

la intensidad donde comienza la caída (I) y la pendiente con la que ésta cae en este punto respecto al siguiente, ($slp(I)$) (ver Figura 72).

$$slp(I) = -18006 \cdot I^2 + 70.54 \cdot I + 0.1, \quad (27)$$

De este modo, la tensión de *reset* se determina como la primera tensión donde la caída de corriente cumple el siguiente requisito: la pendiente de la caída de intensidad debe ser menor, teniendo en cuenta que ésta siempre será negativa, que el valor obtenido usando la Ecuación (27) (siendo $slp(I)$ la pendiente calculada para la corriente bajo consideración). Con este método no sólo buscamos una reducción de corriente sino que además esta caída debe tener cierto grado de “brusquedad”. Como es lógico, cuanto mayor sea la muestra de curvas I-V empleadas en el análisis, mejor serán las predicciones dadas por la Ecuación (27).

Método 3

El Método 3 obtiene la tensión de *reset* según la siguiente relación entre dos medidas consecutivas de la intensidad:

$$V_{RS2} = V_i \text{ si } I_{i+1} \leq (1 - a)I_i, \quad (28)$$

siendo a un parámetro que toma valores entre 0 y 1.

Este método se centra en el análisis del comportamiento de la corriente entre dos valores de la tensión consecutivos, por lo que su eficiencia está relacionada con el paso de tensión usado para la medida. Si se usa un paso cuyos incrementos de tensión sean demasiado pequeños, por ejemplo, no se podrán distinguir las caídas de intensidad producidas por un proceso de *reset* de las producidas por cualquier otro efecto (ruido de la medida, estados intermedios del proceso de *reset* entre V_{RS0} y V_{RSF} , etc.). En definitiva, para este método es necesario escoger un paso de tensión adecuado como para poder diferenciar todos los procesos que tiene lugar.

Gracias al parámetro de ajuste a este método se puede modular para buscar caídas de la intensidad de mayor o menor magnitud. Por este motivo, en principio, este método se podría usar para detectar tanto V_{RS0} como V_{RSF} según el valor de a . No obstante, con el fin de ser lo más eficiente posible desde el punto de vista computacional, no se ha incluido en este método ningún filtro para discriminar el ruido experimental. Por este

motivo, es recomendable usarlo sólo con valores de a que permitan buscar saltos de intensidad mayores y, por tanto, es adecuado para extraer V_{RSF} .

Método 4

El Método 3 tiene una gran dependencia con el incremento entre los valores de tensión aplicados a la celda RRAM. Este hecho no tiene por qué ser un problema siempre y cuando el paso sea fijo y suficientemente pequeño. Para los casos en los que esto no sucede se ha desarrollado el Método 4.

El Método 4 busca una caída de corriente determinada, como ocurre en el Método 3, pero ahora se elige como referencia la intensidad máxima del ciclo de *reset* (I_{MAX}). Usando I_{MAX} , referenciamos todo el proceso de extracción a un parámetro que es independiente de la forma que se haya realizado la medida. De este modo evitamos el problema de la variación de los pasos de tensión. Siguiendo este planteamiento la tensión de *reset* se detecta del siguiente modo:

$$V_{RS2} = V_i \text{ si } I_{i+1} \leq (1 - b)I_{MAX} . \quad (29)$$

En este caso se usa el parámetro de ajuste b , el cual se encontrará siempre dentro del intervalo $[0, 1]$.

Al igual que ocurre con el Método 3, a este método tampoco se le han añadido filtros orientados a la eliminación del ruido experimental por lo que su aplicación se centra en la obtención de V_{RSF} .

Método 5

Con el objetivo de comparar y abarcar el mayor número de posibilidades en cuanto a los métodos de extracción de la tensión de *reset* se ha propuesto este método.

En esta ocasión se utiliza un criterio arbitrario y fijo para todas las curvas, es decir, se detecta la tensión de *reset* como la primera tensión donde la intensidad sea inferior a un cierto valor arbitrario I_{LIMIT} . Además, como es lógico, la tensión detectada debe encontrarse en la región de pendiente negativa de la curva I-V, o lo que es lo mismo, en la región de disminución neta de la intensidad.

A diferencia de los métodos anteriores (Método 1 – 4) este método no se ciñe a las definiciones dadas de V_{RS0} y V_{RSF} para extraer la tensión de *reset* sino que lo hace de forma arbitraria. Por esta razón, como veremos en la siguiente sección, en algunos casos este método se ha mostrado totalmente ineficiente al no obtener ninguna tensión de

reset asociada a ciertas curvas. No obstante, en los casos en los que sí se obtiene un resultado, la tensión resultante se podría asociar con la definición de V_{RSF} .

5.3 Aplicación de los métodos de cálculo de la tensión de *reset*.

Como vimos en la sección 4.2 son varios los tipos de procesos de *reset* que podemos encontrar para una misma celda a lo largo de una serie de ciclos *set/reset*. Para analizar los pros y contras de cada uno de los métodos de extracción de la tensión de *reset* hemos seleccionado una serie de curvas experimentales que abarcan todos los posibles tipos de ciclos de *reset* (ver Figura 73) que puede presentar la celda RRAM del tipo Cu/HfO₂/Pt (ver sección 4.2.4). En la Figura 73a tenemos una serie de ciclos de *reset* con múltiples CFs (ver sección 4.2.2), en la Figura 73b encontramos ciclos de *reset* progresivos (ver sección 4.2.3) y por último procesos *reset* con un solo CF en la Figura 73c (ver sección 4.2.1).

A continuación analizaremos los resultados obtenidos al aplicar cada uno de los métodos de extracción de V_{RESET} a las curvas seleccionadas.

Métodos 1, 2 y 5

Hemos empleado los métodos 1, 2 y 5 para obtener la tensión de *reset* del conjunto de curvas I-V de *reset* seleccionadas como muestra. En la Tabla 10 mostramos los resultados obtenidos en cada caso:

Ciclo	Método 1		Método 2		Método 5	
	V_{RS} (V)	I_{RS} (A)	V_{RS} (V)	I_{RS} (A)	V_{RS} (V)	I_{RS} (A)
8	0.157	$2.48 \cdot 10^{-4}$	0.157	$2.48 \cdot 10^{-4}$	0.253	$1.86 \cdot 10^{-4}$
23	0.379	$9.05 \cdot 10^{-4}$	0.379	$9.05 \cdot 10^{-4}$	0.743	$8.42 \cdot 10^{-7}$
34	0.278	$9.38 \cdot 10^{-4}$	0.278	$9.38 \cdot 10^{-4}$	0.445	$1.75 \cdot 10^{-4}$
30	0.379	$8.32 \cdot 10^{-3}$	0.435	$5.48 \cdot 10^{-3}$	1.066	$1.53 \cdot 10^{-4}$
33	0.425	$4.92 \cdot 10^{-4}$	0.425	$4.92 \cdot 10^{-4}$	0.715	$1.81 \cdot 10^{-4}$
35	0.352	$7.91 \cdot 10^{-4}$	0.352	$7.91 \cdot 10^{-4}$	0.838	$1.78 \cdot 10^{-4}$
40	0.997	$3.86 \cdot 10^{-2}$	1.044	$2.89 \cdot 10^{-2}$	1.048	$8.31 \cdot 10^{-5}$
64	0.340	$1.21 \cdot 10^{-4}$	0.340	$1.21 \cdot 10^{-4}$	NA	NA
77	0.129	$4.93 \cdot 10^{-5}$	0.129	$4.93 \cdot 10^{-5}$	NA	NA

Tabla 10: Valores de V_{RESET} e I_{RESET} obtenidos al aplicar los Métodos 1, 2 y 5 a las curvas de *reset* experimentales seleccionadas como muestra del comportamiento de la celda RRAM tipo Cu/HfO₂/Pt.

Con el fin de clarificar los resultados de la Tabla 10 y facilitar su análisis se han dibujado estos resultados en la Figura 73. Los métodos 1 y 2 dan buenos resultados y muy parecidos entre ellos.

El Método 1 es muy interesante ya que está vinculado al valor de la corriente máxima (I_{MAX}) de la curva. Como consecuencia, este método también localiza otro valor de referencia como es esta intensidad además de obtener V_{RSO} .

El Método 2 obtiene resultados semejantes a los que obtiene el Método 1 pero con la desventaja que requiere un mayor coste computacional a lo que hay que sumarle el análisis previo. No obstante, debemos recordar que este método permite una mayor versatilidad a la hora de definir la tensión de *reset*.

El Método 5 es el que se ha mostrado como el menos eficaz. Como vemos en la Figura 73 se ha definido como intensidad de referencia $I_{LIMIT} = 0.2 \text{ mA}$. Como se ha comentado, este método no tiene en cuenta ninguna propiedad física o de funcionamiento para detectar V_{RESET} . Por esta razón podemos encontrar tensiones de *reset* a medio camino de la disolución total de la estructura de conducción como ocurre en las curvas mostradas en la Figura 73b. También este método se ve afectado por el paso usado en la rampa de tensión. En el ciclo 23 (ver Figura 73a) vemos que la I_{RESET} detectada está muy alejada de la I_{LIMIT} debido a que no hay ninguna medida intermedia entre la intensidad mayor que I_{LIMIT} y la menor. Por último, como vemos en la Figura 73c, se puede dar el caso en el que el método no de ningún resultado. Esto se debe a que toda la curva I-V de *reset* tiene una intensidad menor que la I_{LIMIT} como ocurren en los ciclos 64 y 77.

En definitiva, eliminado el Método 5, que se ha mostrado totalmente ineficaz, los Métodos 1 y 2 se muestran como unos buenos algoritmos de extracción de la tensión de *reset*. La elección de uno y otro dependerá de las necesidades de rendimiento y versatilidad que requiera el usuario.

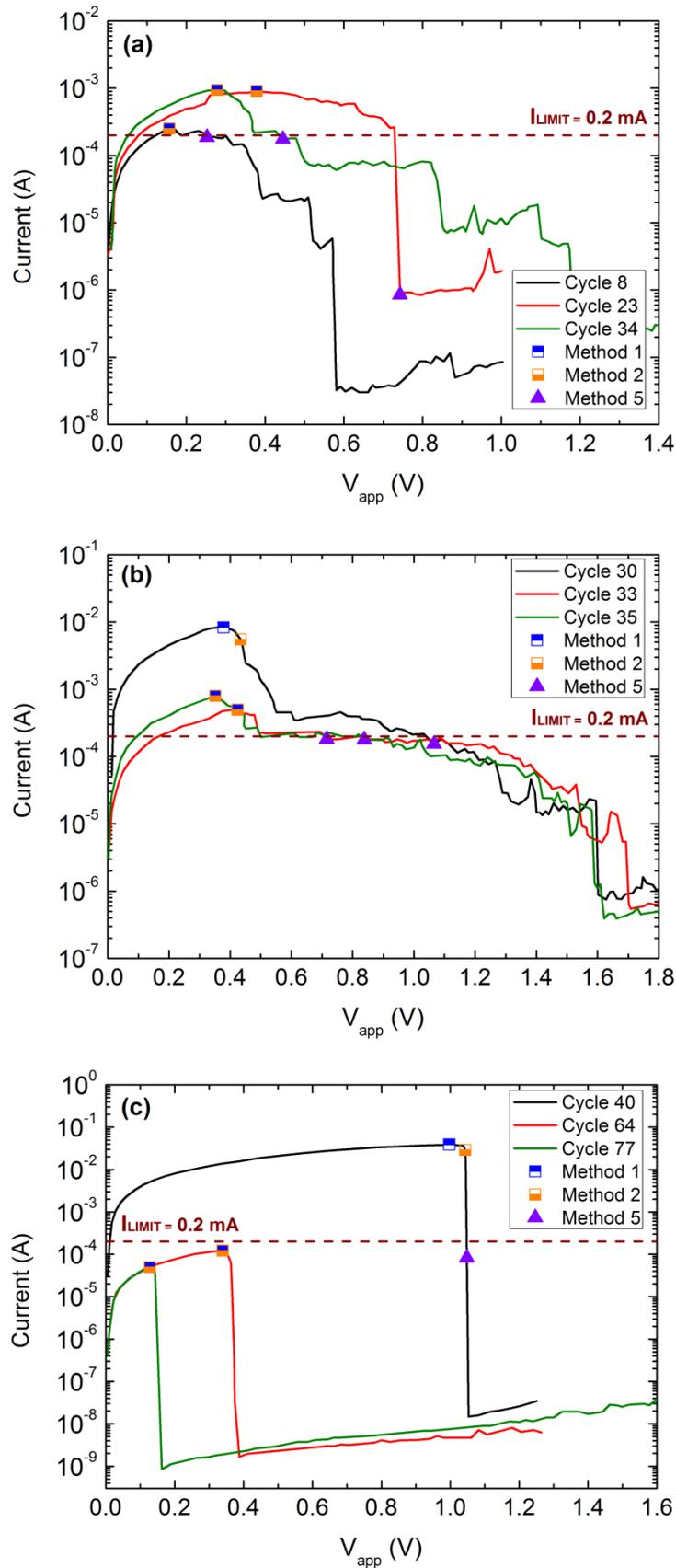


Figura 73: Corriente medida en función de la tensión aplicada en una celda RRAM. Se han añadido los resultados dados por los Métodos 1, 2 y 5 para los valores de V_{RESET} .

Método 3

Comencemos ahora el estudio de la tensión de *reset* con el Método 3. La clave de este método es la correcta elección del parámetro a . En este caso hemos utilizado diferentes valores del parámetro a (0.1, 0.2, 0.3, 0.4 y 0.5). Los resultados obtenidos los mostramos en la Tabla 11.

Ciclo	V_{RS} (V)	$I_{a=0.1}$ (A)	V_{RS} (V)	$I_{a=0.2}$ (A)	V_{RS} (V)	$I_{a=0.3}$ (A)	V_{RS} (V)	$I_{a=0.4}$ (A)	V_{RS} (V)	$I_{a=0.5}$ (A)
8	0.169	$2.48 \cdot 10^{-4}$	0.352	$1.29 \cdot 10^{-4}$	0.385	$3.94 \cdot 10^{-5}$	0.515	$1.60 \cdot 10^{-5}$	0.572	$3.68 \cdot 10^{-6}$
23	0.525	$6.99 \cdot 10^{-4}$	0.628	$5.89 \cdot 10^{-4}$	0.729	$2.64 \cdot 10^{-4}$	0.729	$2.64 \cdot 10^{-4}$	0.729	$2.64 \cdot 10^{-4}$
34	0.297	$9.25 \cdot 10^{-4}$	0.361	$4.31 \cdot 10^{-4}$	0.844	$2.23 \cdot 10^{-5}$	0.844	$2.23 \cdot 10^{-5}$	0.844	$2.23 \cdot 10^{-5}$
30	0.414	$7.34 \cdot 10^{-3}$	0.599	$4.53 \cdot 10^{-4}$	1.265	$8.52 \cdot 10^{-5}$	1.265	$8.52 \cdot 10^{-5}$	1.594	$2.21 \cdot 10^{-5}$
33	0.425	$4.92 \cdot 10^{-4}$	0.479	$4.17 \cdot 10^{-4}$	0.479	$4.17 \cdot 10^{-4}$	0.479	$4.17 \cdot 10^{-4}$	1.530	$3.80 \cdot 10^{-5}$
35	0.352	$7.91 \cdot 10^{-4}$	0.447	$4.05 \cdot 10^{-4}$	1.330	$7.41 \cdot 10^{-5}$	1.502	$1.97 \cdot 10^{-5}$	1.502	$1.97 \cdot 10^{-5}$
40	1.038	$3.71 \cdot 10^{-2}$	1.038	$3.71 \cdot 10^{-2}$	1.044	$2.89 \cdot 10^{-2}$	1.044	$2.89 \cdot 10^{-2}$	1.043	$1.60 \cdot 10^{-2}$
64	0.340	$1.21 \cdot 10^{-4}$	0.352	$1.03 \cdot 10^{-4}$	0.364	$6.25 \cdot 10^{-5}$	0.364	$6.25 \cdot 10^{-5}$	0.364	$6.25 \cdot 10^{-5}$
77	0.138	$4.50 \cdot 10^{-5}$	0.143	$3.90 \cdot 10^{-5}$						

Tabla 11: Valores de V_{RESET} e I_{RESET} obtenidos al aplicar el Método 3 a las curvas de *reset* experimentales seleccionadas como muestra del comportamiento de la celda RRAM tipo Cu/HfO₂/Pt. El método se ha aplicado tomando distintos valores del parámetro a .

En la Figura 74 hemos representado todos estos resultados con el fin de poder analizarlos más fácilmente. Para los dispositivos con un solo CF este método es muy eficiente para todos los valores del parámetro a , como podemos ver en la Figura 74c. Por el contrario, si el dispositivo tiene un comportamiento progresivo o su estructura de conducción está compuesta por varios CFs, los resultados cambian mucho con la elección que se haga de a (Figuras 74a y 74b). En estos casos, los valores obtenidos se encuentran bastante dispersos a lo largo de la curva I-V. Además, este efecto es más pronunciado si las curvas presentan una caída abrupta seguida de un *reset* progresivo como ocurre en las curvas mostradas en la Figura 74b.

No obstante, debe observarse que para $a=0.1$ los resultados que se obtienen son semejantes a los obtenidos usando los Métodos 1 ó 2. Como se enfatizó en la sección anterior, según el valor usado para el parámetro a este método se podría usar para calcular tanto V_{RS0} como V_{RSF} .

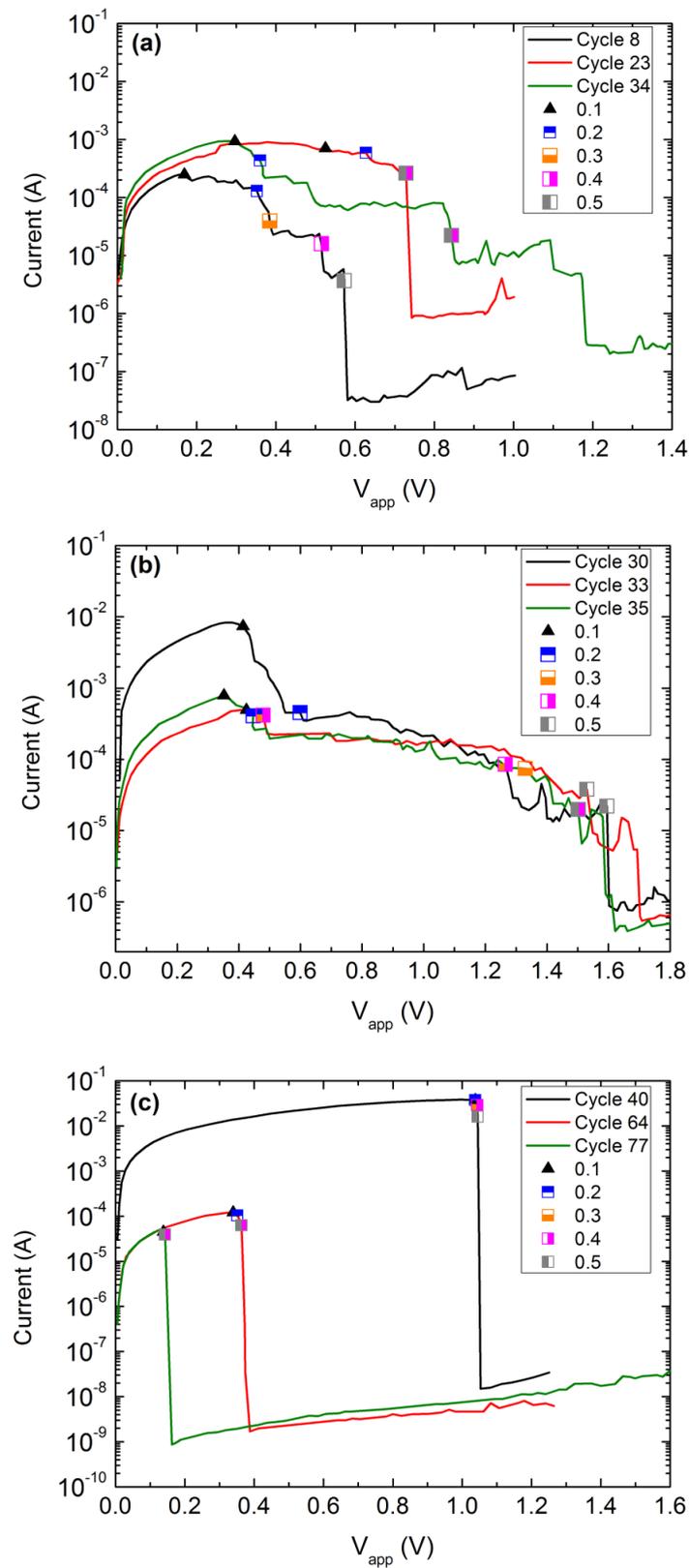


Figura 74: Corriente medida en función de la tensión aplicada en una celda RRAM. Se han añadido los resultados para V_{RESET} dados por el Método 3 usando distintos valores del parámetro a .

Método 4

Al igual que se ha hecho con el método anterior, el Método 4 también se ha puesto a prueba con el mismo conjunto de curvas de *reset* seleccionadas para distintos valores del parámetro b (0.1, 0.2, 0.3, 0.4 y 0.5). Los resultados obtenidos se muestran en la Tabla 12:

Ciclo	V_{RS} (V)	$I_{b=0.1}$ (A)	V_{RS} (V)	$I_{b=0.2}$ (A)	V_{RS} (V)	$I_{b=0.3}$ (A)	V_{RS} (V)	$I_{b=0.4}$ (A)	V_{RS} (V)	$I_{b=0.5}$ (A)
8	0.169	$2.48 \cdot 10^{-4}$	0.179	$2.17 \cdot 10^{-4}$	0.305	$1.78 \cdot 10^{-4}$	0.305	$1.78 \cdot 10^{-4}$	0.352	$1.29 \cdot 10^{-4}$
23	0.458	$8.30 \cdot 10^{-4}$	0.479	$7.84 \cdot 10^{-4}$	0.525	$6.99 \cdot 10^{-4}$	0.628	$5.89 \cdot 10^{-4}$	0.638	$4.55 \cdot 10^{-4}$
34	0.297	$9.25 \cdot 10^{-4}$	0.313	$7.64 \cdot 10^{-4}$	0.312	$7.64 \cdot 10^{-4}$	0.337	$6.31 \cdot 10^{-4}$	0.344	$5.15 \cdot 10^{-4}$
30	0.396	$7.98 \cdot 10^{-3}$	0.414	$7.34 \cdot 10^{-3}$	0.424	$6.38 \cdot 10^{-3}$	0.434	$5.48 \cdot 10^{-3}$	0.440	$4.51 \cdot 10^{-3}$
33	0.425	$4.92 \cdot 10^{-4}$	0.479	$4.17 \cdot 10^{-4}$						
35	0.352	$7.91 \cdot 10^{-4}$	0.371	$6.97 \cdot 10^{-4}$	0.392	$5.74 \cdot 10^{-4}$	0.415	$5.35 \cdot 10^{-4}$	0.447	$4.05 \cdot 10^{-4}$
40	1.038	$3.71 \cdot 10^{-2}$	1.038	$3.71 \cdot 10^{-2}$	1.044	$2.89 \cdot 10^{-2}$	1.044	$2.89 \cdot 10^{-2}$	1.044	$2.89 \cdot 10^{-2}$
64	0.340	$1.21 \cdot 10^{-4}$	0.352	$1.03 \cdot 10^{-4}$	0.352	$1.03 \cdot 10^{-4}$	0.358	$8.03 \cdot 10^{-5}$	0.364	$6.25 \cdot 10^{-5}$
77	0.138	$4.50 \cdot 10^{-5}$	0.138	$4.50 \cdot 10^{-5}$	0.143	$3.90 \cdot 10^{-5}$	0.143	$3.90 \cdot 10^{-5}$	0.143	$3.90 \cdot 10^{-5}$

Tabla 12: Valores de V_{RESET} e I_{RESET} obtenidos al aplicar el Método 4 a las curvas de *reset* experimentales seleccionadas como muestra del comportamiento de la celda RRAM tipo Cu/HfO₂/Pt. El método se ha aplicado tomando distintos valores del parámetro b .

Los resultados de la Tabla 12 han sido representados en la Figura 75. Podemos ver, como viene siendo habitual, que este método también trabaja bien (incluso mejor que los métodos previos) para los dispositivos con un único CF que presentan una abrupta caída de la corriente (Figura 75c). En comparación con el Método 3 para las curvas con diferentes tipos de *reset* progresivo (Figuras 75b y 75c) este método trabaja mejor y es menos variable con el parámetro b . En efecto, obsérvese que la dispersión de las tensiones de *reset* es baja para los distintos valores de b . Esto es una gran mejora, en comparación con el Método 3, particularmente sensible para las curvas mostradas en la Figura 75b. También mejora los resultados de las curvas de la Figura 75a. No obstante, para el ciclo 23 al ser un *reset* progresivo “puro” los resultados presentan una cierta dispersión. En el ciclo 8 también se observa esta dispersión pero en menor grado.

En este caso, $b=0.3$ se muestra como la mejor opción, teniendo en cuenta las tensiones de *reset* obtenidas.

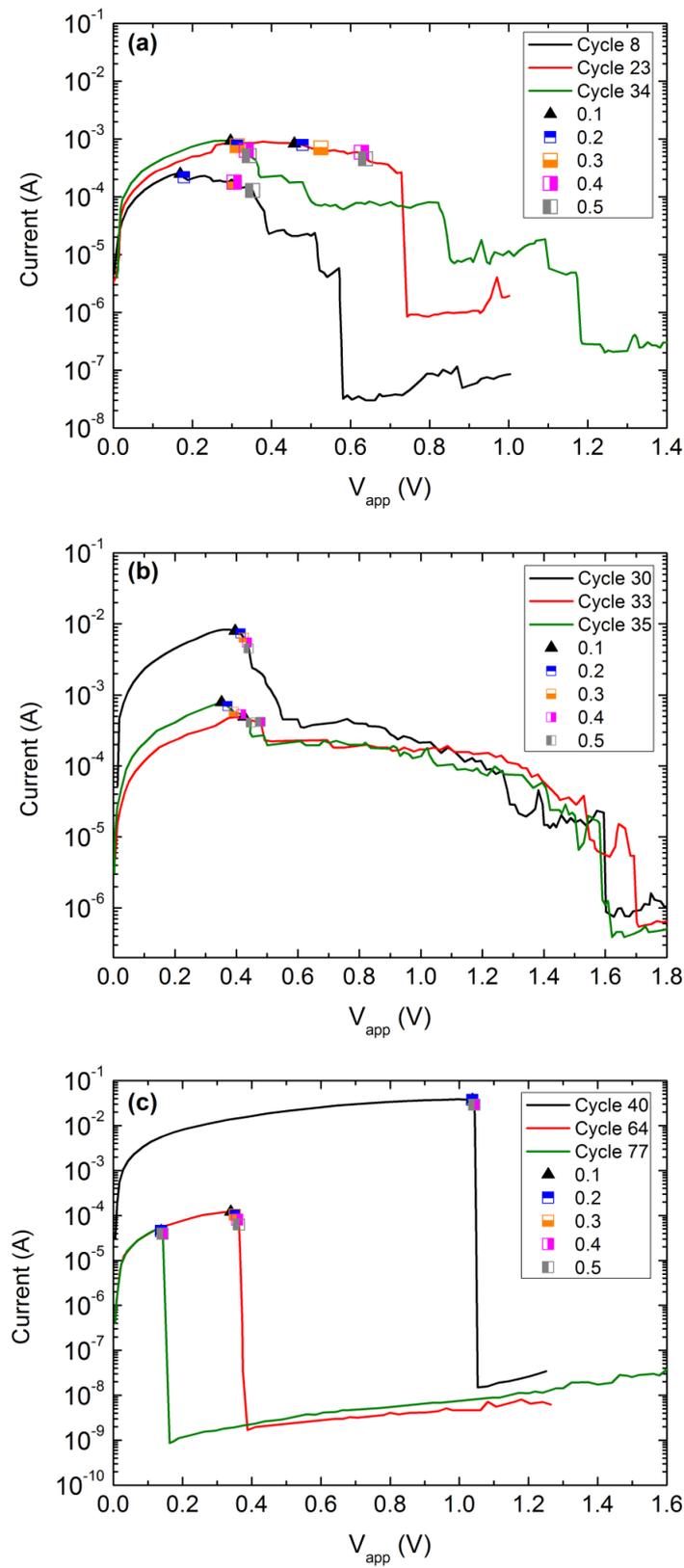


Figura 75: Corriente medida en función de la tensión aplicada en una celda RRAM. Se han añadido los resultados para V_{RESET} dados por el Método 4 usando distintos valores del parámetro b .

A la vista de los resultados obtenidos para cada método, ninguno de ellos destaca como la mejor opción a la hora de extraer V_{RESET} . No obstante, queda claro que existe una mayor exactitud en los resultados obtenidos considerando la definición de tensión de *reset* V_{RSO} . Esto se debe a que, tal como se definió esta tensión, la interferencia o mezcla de los distintos fenómenos físico y evolución de los diferentes filamentos es mucho menor para V_{RSO} que para V_{RSF} . Además, el uso de un parámetro independiente del método de medida como es I_{MAX} (ver métodos 1 y 4) hace que la extracción de la tensión de *reset* sea mucho más exacta y estable ante los distintos tipos de ciclos *reset* que se pueden producir.

En algunos casos (ver las Figuras 73c, 74c o 75c) los valores de V_{RSO} y V_{RSF} están muy cerca a pesar de corresponderse con diferentes estados del proceso de disolución del CF. Este hecho se debe a la presencia del fenómeno de la autoaceleración que precipita la disolución del CF [64, 6] cuando se activa el proceso de *reset*. Gracias a este fenómeno, la mayoría de los procesos de *reset* que se producen, el inicio de la ruptura del CF y la ruptura completa de éste están muy cerca (desde el punto de vista de la tensión aplicada). Esto hace que en muchas ocasiones las dos definiciones de la tensión de *reset* coincidan casi en el mismo valor de la tensión aplicada. Este hecho no ocurre en los procesos de *reset* progresivo (ver Figura 71).

Las características de la fabricación de cada dispositivo pueden conducir a que cada tipo de celda se comporte de una manera diferente. Un ejemplo claro de esto es el comportamiento puramente óhmico de las celdas Cu/HfO₂/Pt y la celda Ni/HfO₂/Si-n⁺ con su comportamiento no lineal (ver sección 4). Desde este punto de vista, los métodos de extracción modulables a través de un parámetro, como son los Métodos 3 y 4, son de gran interés ya que pueden ser particularizados rápidamente para cada tipo de estructura y comportamiento sin la necesidad de formular nuevos algoritmos.

6

Caracterización de los mecanismos de transporte. Tensión Umbral de *reset*

6.1 Introducción.

En todos los estudios realizados hasta ahora hemos utilizado las tensiones y sus correspondientes intensidades de *reset* como únicos parámetros para caracterizar los procesos de conmutación resistiva. Como hemos visto, podemos extraer mucha información de los mecanismos físicos que intervienen en el proceso de RS. No obstante, en el Capítulo 4 se demostró que para ciertos tipos de RRAM, en nuestro caso para la celda Ni/HfO₂/Si-n⁺, encontramos dos mecanismos distintos para el transporte de la carga: uno de carácter óhmico a través de los CFs metálicos y el segundo con efectos cuánticos a través de una barrera de potencial en la interface HfO₂/Si-n⁺. La competencia entre estos dos mecanismos de transporte de carga se ve reflejada en un cambio de la curvatura de la curva I-V del proceso de *reset* como mostramos en la Figura 76. De este modo, como ya vimos en la sección 3.2.2, a bajas tensiones el transporte a través de la barrera es el mecanismo que más influencia tiene, mientras que a altas tensiones la variación de la resistencia del CF es la predominante. En este contexto, encontrar un nuevo parámetro que dé cuenta del balance de cada uno de estos efectos es de gran utilidad.

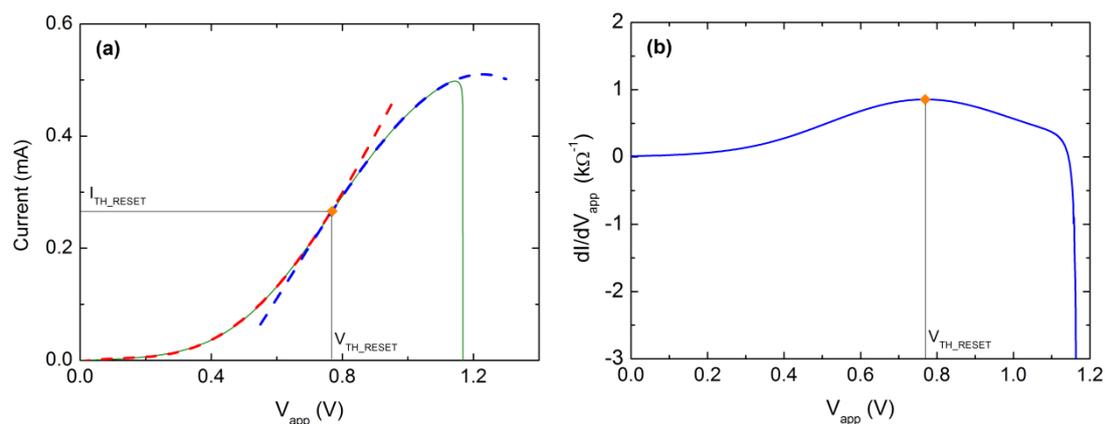


Figura 76: (a) Curva I-V simulada para un dispositivo RRAM tipo Ni/HfO₂/Si-n⁺ (línea continua). Las líneas discontinuas representan la curvatura que presenta la curva I-V antes (cóncava, línea roja) y después (convexa, línea azul) de la Tensión Umbral de *reset*, V_{TH_RESET} (símbolo naranja). (b) Derivada de la intensidad en función de la tensión aplicada. La tensión donde se alcanza el máximo de esta curva se define como Tensión Umbral de *reset*, V_{TH_RESET} (símbolo naranja).

Dado que existe este cambio de curvatura en la curva I-V de *reset* (ver Figura 76a), proponemos definir este nuevo parámetro como la tensión a la cual se alcanza el máximo de la derivada de la corriente en función de la tensión aplicada durante el proceso (Figura 76b). A esta tensión la hemos llamado Tensión Umbral de *reset*, V_{TH_RESET} (símbolo naranja en la Figura 76a y 76b).

En la Figura 77 mostramos tres curvas I-V experimentales (líneas continuas) y sus correspondientes derivadas (líneas discontinuas). En los tres casos encontramos que la derivada de la intensidad presenta un máximo (símbolo cuadrado), que se corresponde con el parámetro V_{TH_RESET} .

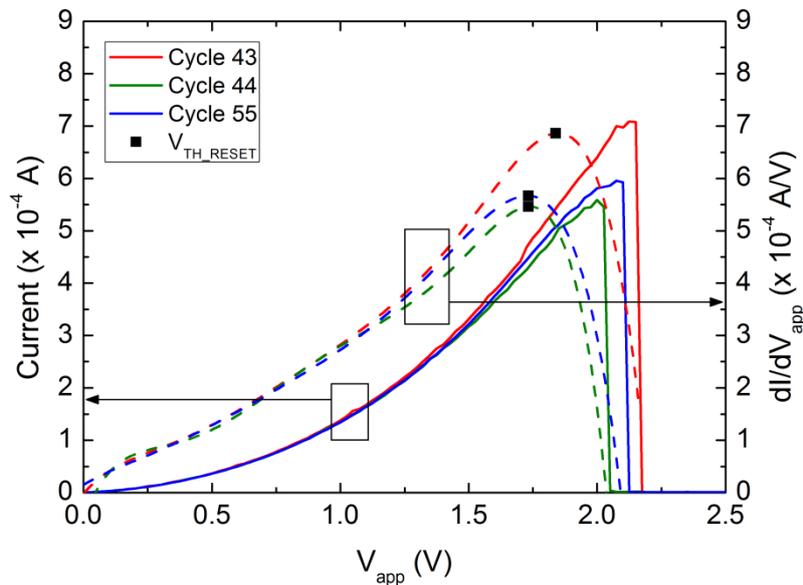


Figura 77: Curvas I-V experimentales (línea continua) y sus correspondientes derivadas numéricas (línea discontinua) de un dispositivo RRAM tipo Ni/HfO₂/Si-n⁺ (ver sección 4.3). La tensión para la cual se presenta el máximo de cada derivada define la tensión umbral de *reset*, V_{TH_RESET} (símbolos cuadrados).

El cálculo numérico de las derivadas se ha realizado aplicando las técnicas usadas para la extracción de parámetros para otros dispositivos [126, 127]. No obstante, previamente ha sido necesario aplicar otros métodos matemáticos [127] con el objetivo de reducir el ruido de la medida.

6.2 Fundamentos y determinación de la Tensión Umbral.

Si aproximamos, de forma muy general, el comportamiento de un dispositivo RRAM al de un circuito con una sola resistencia (ver esquema en la Figura 78), podemos analizar el cambio de la curvatura que presenta la función I-V con facilidad. En la Figura 78

mostramos la curva I-V correspondiente a este circuito (ver esquema en la Figura 78) donde hemos considerado tres casos posibles: la resistencia es constante, creciente o decreciente con la tensión aplicada (en la gráfica interior de la Figura 78 se muestra la evolución de la resistencia). Si la resistencia es decreciente la curvatura de la intensidad es cóncava mientras que si es creciente ésta es convexa.

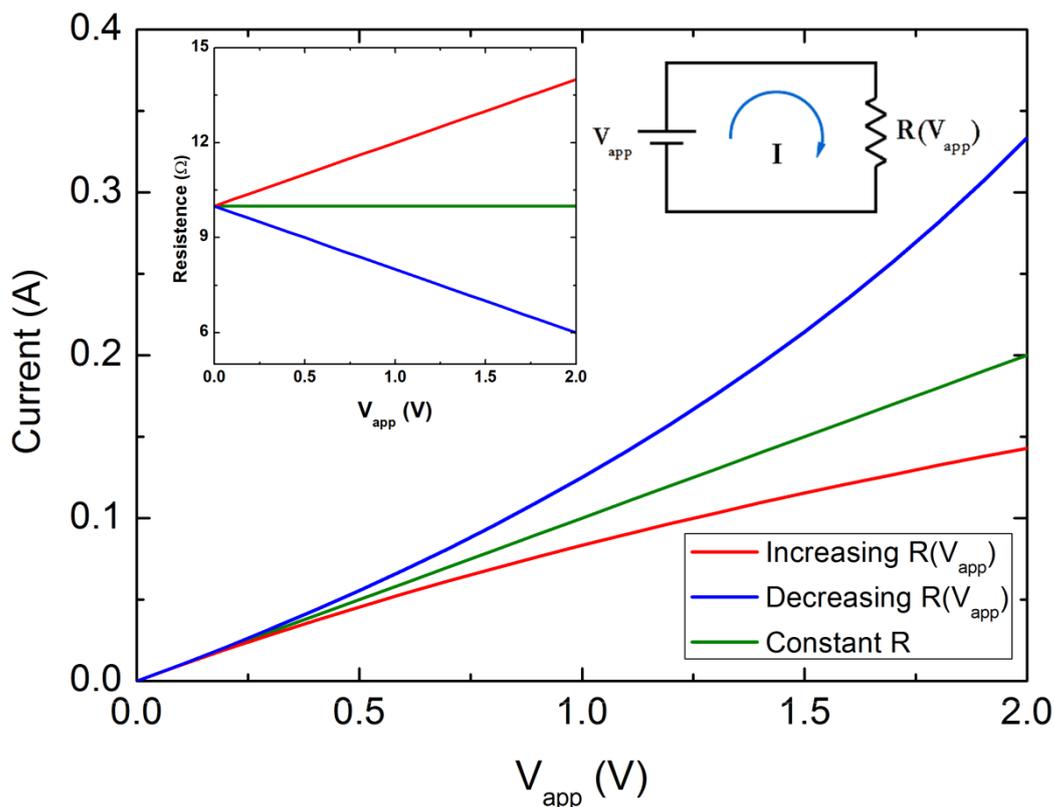


Figura 78: Curvas I-V correspondientes al circuito cuyo esquema se encuentra representado dentro del gráfico. Se han considerado los casos en los que la resistencia es constante, creciente o decreciente con la tensión aplicada. La evolución de la resistencia en función de la tensión aplicada se ha representado en la gráfica interna.

De este modo, a la vista de este resultado, para estudiar el comportamiento de la curva I-V de nuestro dispositivo RRAM podemos centrarnos en la evolución de la resistencia total. En concreto, siguiendo con la analogía mostrada en la Figura 78, debemos estudiar la inversa de la resistencia ya que según la Ley de Ohm la relación entre la intensidad y la tensión es $I = R^{-1} \cdot V_{app}$. En la Figura 79a mostramos la inversa de la resistencia, calculada como la derivada de la intensidad en función de la tensión aplicada (Figura 76b).

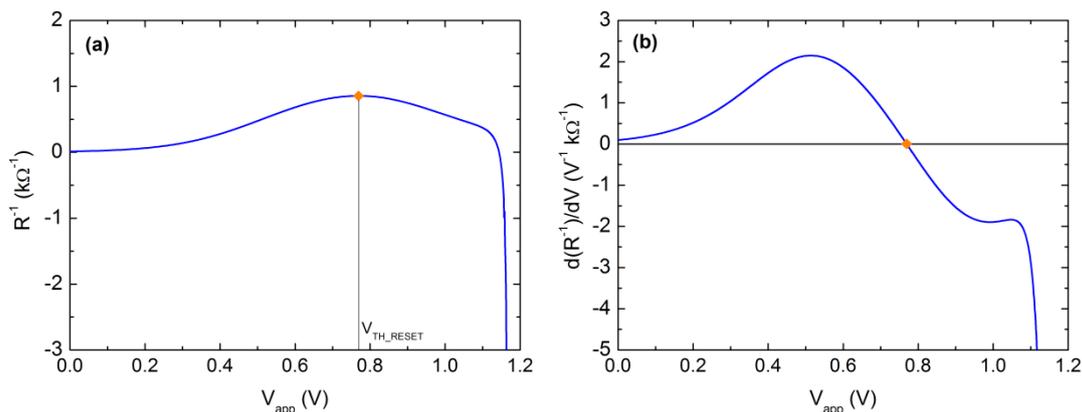


Figura 79: (a) Inversa de la resistencia total del dispositivo en función de la tensión aplicada. (b) Derivada de la inversa de la resistencia total en función de la tensión aplicada. V_{TH_RESET} (símbolo naranja) se puede definir como la tensión en la que se encuentra el máximo de la inversa de la resistencia total, el cual se corresponde con el máximo de la derivada de la corriente, o como la tensión a la que se produce el cambio de tendencia en la evolución de la resistencia.

Como vemos en la Figura 79b, en donde hemos representado la derivada de R^{-1} en función de la tensión aplicada, el cambio de curvatura de la intensidad (ver Figura 76a) se debe al cambio de la tendencia en la evolución de la resistencia total del dispositivo.

En nuestro modelo, esta resistencia total se corresponde con la suma de cuatro aportaciones: la resistencia de la estructura de conducción, la resistencia proveniente de la barrera de potencial en la interfase $\text{HfO}_2/\text{Si-n}^+$, la resistencia de Maxwell y la resistencia *setup* (ver sección 2.2). Dado que lo que nos interesa en este caso es la variación de estas resistencias a lo largo de la rampa de tensión, no su valor concreto, centraremos nuestra atención sobre las dos primeras ya que son las que varían a lo largo del proceso de *reset*. En la Figura 80, hemos representado la resistencia del CF (R_{CF}) y la resistencia asociada a la corriente túnel descrita con el modelo QPC (R_{QPC}) en función de la tensión aplicada. Como vemos, a bajas tensiones R_{QPC} disminuye progresivamente su valor mientras R_{CF} permanece prácticamente constante (Figura 80). El comportamiento de R_{QPC} produce el decrecimiento de la resistencia total, que se traduce en una evolución de la intensidad con una curvatura cóncava (Figura 76). Una vez alcanzada V_{TH_RESET} esta tendencia se invierte, es decir, la resistencia R_{QPC} disminuye más lentamente tomando el papel predominante la variación de la resistencia del CF por su dependencia con la temperatura (ver Ecuaciones (3) y (5)). Además, dado que la variación de R_{CF} es creciente, en contraposición al comportamiento que presentaba R_{QPC} a bajas tensiones, se produce el ya mencionado cambio de la curvatura de la curva I-V de cóncavo a convexo (ver Figura 76).

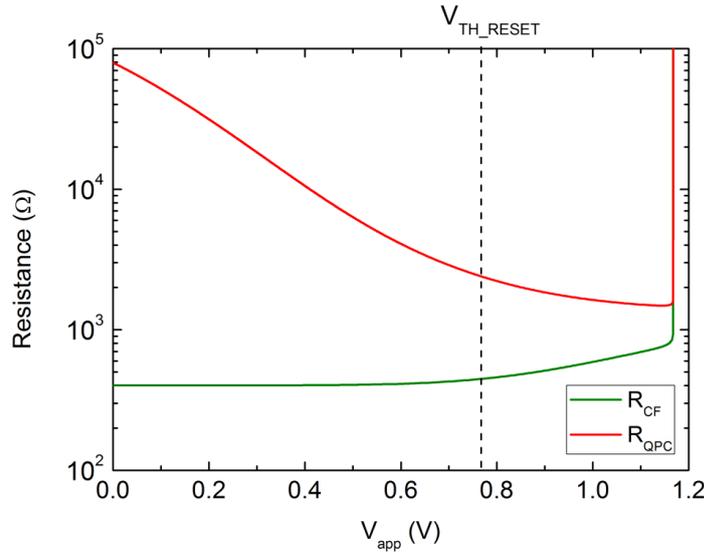


Figura 80: Resistencia del CF (R_{CF}) y resistencia asociada a la corriente túnel definida en el modelo QPC (R_{QPC}) en función de la tensión aplicada. El balance de las variaciones de las resistencias antes y después de la V_{TH_RESET} da como resultado la variación de la curvatura de la curva I-V de *reset* (Figura 76).

En definitiva, el balance entre las variaciones de estas dos componentes de la resistencia define el comportamiento de la curva de intensidad del dispositivo. Por esta razón se hace necesario estudiarlo.

La resistencia R_{CF} depende principalmente de la temperatura, ya que la conductividad eléctrica depende de ella (ver ecuación (3)), y de la forma del CF (ver ecuación (5)). Dado que, como se demostró en el Capítulo 4, en la mayoría de los casos la variación de la forma del CF es muy rápida justo en el entorno de la tensión de *reset*, nos centraremos en el estudio de su dependencia con la temperatura del CF. Esto lo haremos mediante la variación del coeficiente térmico de la conductividad eléctrica del CF, α_T (ver ecuación (3)). Variando este parámetro se modifica el peso de la dependencia térmica de la componente óhmica. En la Figura 81a mostramos las curvas I-V de *reset* para un mismo dispositivo variando el parámetro α_T desde 0 hasta 0.1. En la Figura 81b mostramos las correspondientes derivadas de las curvas que mostramos en la Figura 81a junto con sus correspondientes V_{TH_RESET} .

Del mismo modo, como mostraremos en el Capítulo 7, la barrera de potencial, o lo que es lo mismo R_{QPC} , depende de la temperatura. Esta dependencia la hemos modelado como una variación del ancho de la barrera en función de la temperatura, la cual modificamos variando el factor de forma del potencial parabólico, α (ver ecuación (13)). En la Figura 81c mostramos las curvas I-V de *reset* simuladas para el mismo dispositivo variando ahora el parámetro α del modelo QPC (dejando constante α_T) desde 0 hasta 5. Del mismo modo, en la Figura 81d, mostramos las derivadas de estas curvas I-V junto con la tensión V_{TH_RESET} de cada una de las simulaciones.

Vemos en la Figura 81b que V_{TH_RESET} aumenta cuanto menor es α_T . Esto se debe a que cuanto menor es α_T menor es la dependencia de R_{CF} con la temperatura como se deduce de la ecuación (3). En definitiva, la variación de R_{QPC} predomina sobre la variación de R_{CF} . Notar que, para $\alpha_T=0.0$, sigue existiendo el cambio de curvatura aunque se haya anulado la dependencia térmica de la resistencia del filamento. Esto es debido a que, como comentamos anteriormente, R_{CF} también depende de la forma de filamento, concretamente de la variación de grosor asociada al proceso de *reset*. Por este motivo, aunque podemos encontrar una V_{TH_RESET} ésta es prácticamente igual a la tensión de *reset*.

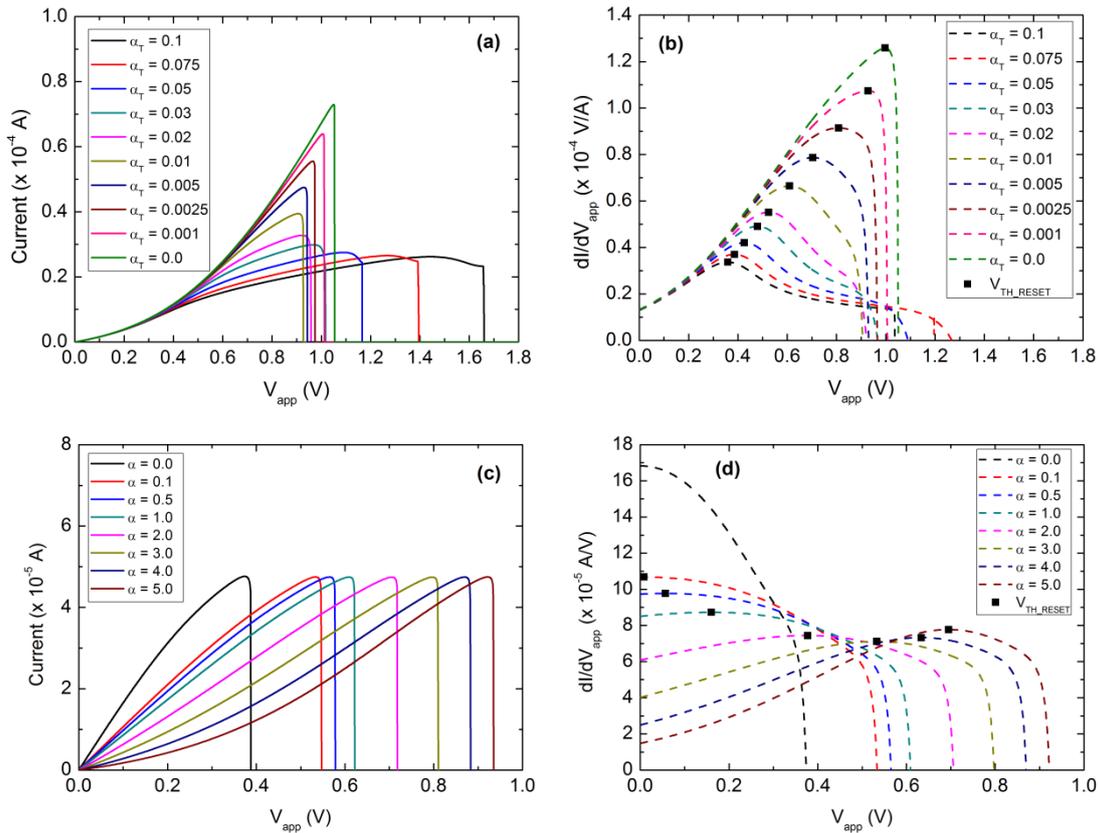


Figura 81: Curvas I-V simuladas para un dispositivo RRAM tipo Ni/HfO₂/Si-n⁺ donde (a) cambia la dependencia térmica de la conductividad eléctrica del CF mediante la variación del coeficiente térmico α_T o (c) cambia la barrera de potencial variando el ancho de la barrera a través del parámetro α . En (b) se muestra las derivadas de las curvas de intensidad mostradas en (a). En (d) se representan las derivadas de las curvas de intensidad mostradas en (c). En todas las simulaciones se ha empleado una estructura de conducción de un solo CF con forma de tronco de cono de dimensiones iniciales $r_{CFmax}=30$ nm y $C_{CF0}=5\%$.

Si aumentamos ahora α , también crece V_{TH_RESET} como vemos en la Figura 81d. En este caso, a mayor α más ancha es la barrera de potencial, es decir, mayor es la resistencia asociada a la conducción túnel en comparación con R_{CF} , que en este caso no cambia su dependencia. En la Figura 81c se muestra que la concavidad de la curva crece con el

parámetro α . Si eliminamos la barrera de potencial, es decir, cuando fijamos $\alpha=0.0$, ya no podemos encontrar una V_{TH_RESET} . Esto es coherente con el modelo, si no hay barrera de potencial la componente cuántica de la resistencia desaparece, siguiendo un comportamiento totalmente óhmico durante todo el proceso de *reset*. Además, si nos fijamos en su correspondiente curva I-V de la Figura 81c, ésta presenta una curvatura únicamente convexa, acorde a este comportamiento resistivo.

Con el fin de resumir todos los resultados expuestos hasta ahora, en la Figura 82 mostramos cómo evoluciona V_{TH_RESET} en función de α y α_T para distintos grosores de filamento.

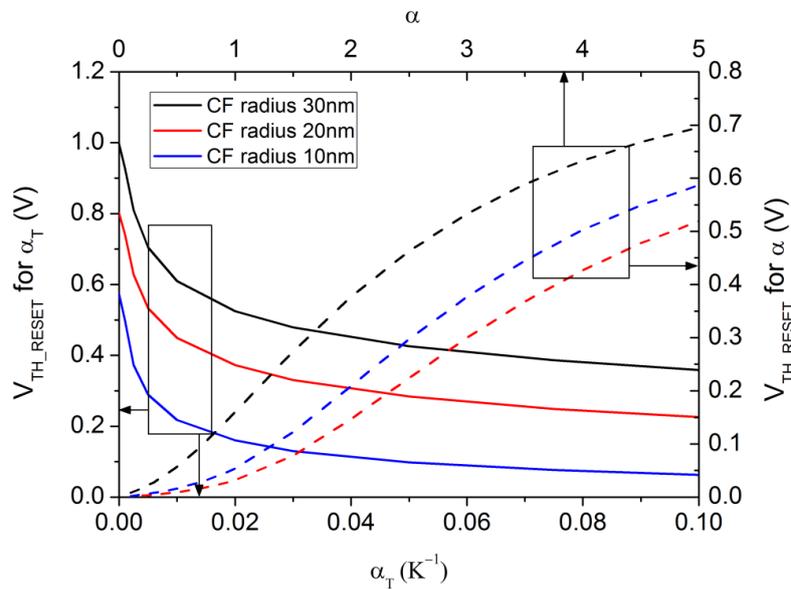


Figura 82: Tensión umbral (V_{TH_RESET}) en función del coeficiente térmico de la conductividad eléctrica del CF, α_T (líneas continuas) y del factor de forma del potencial parabólico, α (línea discontinua) para tres CFs diferentes. Para estas simulaciones se han empleado estructuras de conducción de un único CF con forma de tronco de cono cuyas dimensiones son ($r_{CFmax}=30, 20, 10$ nm, $C_{CF0}=1\%$).

Como se observa en la Figura 82, el aumento de α_T produce un crecimiento de la dependencia térmica de la R_{CF} lo que produce el aumento de la región de predominancia óhmica, es decir, V_{TH_RESET} disminuye. Del mismo modo, al aumentar α predomina la componente cuántica sobre la variación resistiva de la resistencia total. En otras palabras, aumenta la región cóncava de la curva I-V de *reset*.

Siguiendo el mismo método usado para obtener los resultados que mostramos en la Figura 77, hemos calculado V_{TH_RESET} para una gran serie de más de 2000 ciclos de *reset* experimentales correspondientes a la celda tipo Ni/HfO₂/Si-n⁺ descrita en la sección 4.3. Los resultados obtenidos se muestran en la Figura 83a acompañados por las

correspondientes V_{RESET} de cada ciclo, calculadas previamente en la sección 4.3 (Figura 66).

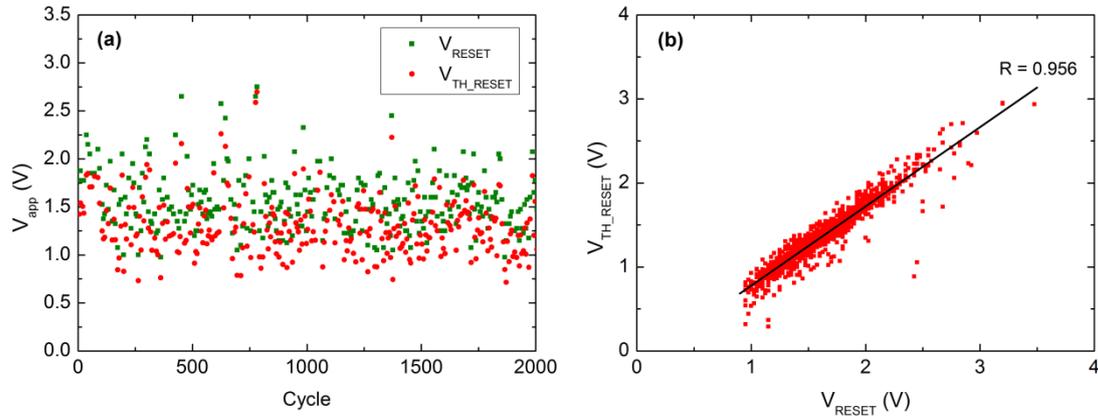


Figura 83: (a) Distribución de V_{RESET} y V_{TH_RESET} extraída de 2000 curvas I-V de procesos de *reset* experimentales consecutivos para el dispositivo Ni/HfO₂/Si-n⁺ (sección 4.3). (b) V_{TH_RESET} en función de V_{RESET} para los 2000 ciclos. Se ha obtenido una relación lineal entre estas dos variables con un coeficiente de correlación $R=0.956$.

En la Figura 83a, la distribución de V_{TH_RESET} tiene características similares a la de V_{RESET} , siendo V_{TH_RESET} entre 0.5 y 1 V más baja que V_{RESET} . Además, ambas distribuciones están altamente correlacionadas como muestra la Figura 83b (coeficiente de correlación lineal $R = 0.956$). Este resultado es de gran interés ya que V_{TH_RESET} , a parte de la información sobre los mecanismos resistivos que nos aporta, abre la puerta a la posibilidad de estimar el valor de V_{RESET} de manera anticipada. De esta manera, teniendo en cuenta que el valor de V_{TH_RESET} es menor que V_{RESET} , podríamos adecuar de manera dinámica el límite a la tensión aplicada para cada ciclo aumentando así su eficiencia temporal, a la vez que se disminuye el estrés al que se somete la celda.

Para algunas de las curvas I-V de *reset* experimentales no se ha podido determinar V_{TH_RESET} . Las razones por las que puede ocurrir este hecho son varias. Como vimos en la Figura 81d, si la barrera de potencial es muy estrecha, es decir, el parámetro α del modelo QPC es bajo, V_{TH_RESET} aparece a muy bajas tensiones. Este hecho dificulta su cálculo debido a que las curvas experimentales presentan ruido que puede enmascarar la extracción. Además, como apuntamos en la sección anterior, previamente al cálculo de la derivada numérica de la intensidad es necesario aplicar métodos numéricos avanzados para reducir este ruido numérico. Estos métodos, por lo general, no son tan eficientes en los extremos de las curvas bajo estudio. Este mismo problema puede ocurrir también a la hora de calcular V_{TH_RESET} en los ciclos donde la componente óhmica es pequeña y V_{TH_RESET} se encuentra muy cercana a V_{RESET} .

En definitiva, la Tensión Umbral del proceso de *reset* (V_{TH_RESET}) es un parámetro que nos permite obtener información de la relación que existe entre las variaciones de los dos principales componentes de la resistencia total del dispositivo: R_{CF} y R_{QPC} . Como hemos demostrado, en las RRAM tipo Ni/HfO₂/Si-n⁺ predomina la componente cuántica a bajas tensiones. De este modo, la curva I-V de *reset* presenta una curvatura cóncava característica de este hecho. Una vez alcanzado la Tensión Umbral, la variación de la resistencia del CF predomina porque la estructura de conducción comienza a calentarse por efecto Joule. De nuevo, este hecho se ve reflejado en la curva I-V cambiando su curvatura de cóncava a convexa.

V_{TH_RESET} sólo es un parámetro de caracterización para las RRAM que presenten mecanismos cuánticos de conducción. Por esta razón, para dispositivos, como por ejemplo, la celda tipo Cu/HfO₂/Pt, que también ha sido objeto de estudio en esta tesis (sección 4.2), éste parámetro carece de sentido ya que la conducción tiene únicamente carácter óhmico en todo el rango de tensiones.



Influencia de la temperatura externa sobre las tensiones y corrientes de *reset*

7.1 Introducción.

Un paso esencial en el camino hacia el uso de las memorias RRAM como dispositivo de almacenamiento masivo comercial es el de su caracterización a diferentes temperaturas externas. En los dispositivos comerciales, como puede ser por ejemplo un *pendrive*, la temperatura de trabajo de cada una de las celdas que conforman el *array* de la memoria no es la ambiente, ya que el propio funcionamiento del dispositivo hace que éste se caliente. Del mismo modo, hay que considerar la posibilidad del uso de estos dispositivos en entornos con temperaturas extremas.

Por estos motivos, el análisis y la caracterización de estos dispositivos a diferentes temperaturas externas son esenciales. Además, dado que la mayoría de los mecanismos físicos que intervienen en el proceso de conmutación resistiva están térmicamente asistidos [128], este estudio también nos será de gran ayuda para entender el papel que juega cada uno de ellos.

En este capítulo nos ocuparemos de esta cuestión analizando los resultados obtenidos experimentalmente por el IMB-CNM (CSIC) para la celda tipo Ni/HfO₂/Si-n⁺ descrita en la sección 4.3 y comparándolos posteriormente con los obtenidos a partir de las simulaciones realizadas con el simulador SIM²RRAM. Del mismo modo analizaremos el papel de cada mecanismo físico en juego (dependencia térmica de la conductividad eléctrica, resistencia de Maxwell, etc.) durante el proceso de *reset* y su dependencia con la temperatura [8].

7.2 Resultados y análisis de la dependencia térmica del proceso de *reset*.

Para el estudio del efecto de la temperatura externa sobre el comportamiento de la celda RRAM se ha sometido un dispositivo tipo Ni/HfO₂/Si-n⁺ (ver sección 4.3) a una gran cantidad de ciclos *set/reset* mientras se aumentaba la temperatura externa. Este aumento de la temperatura externa se llevó a cabo, en incrementos de 30 °C cada 50 ciclos aproximadamente, desde los -40 °C hasta los 200 °C, como se puede ver en la Figura 84 [129]. Después de haber obtenido las curvas I-V de cada ciclo de *reset* se ha procedido a la extracción de las correspondientes tensiones de *reset* experimentales, V_{RESET} , (Figura

84a) y sus intensidades de *reset* asociadas, I_{RESET} , (Figura 84b) haciendo uso del Método 4 de extracción de los parámetros de *reset* expuesto en la sección 5.2. Para la aplicación de este método se consideró una reducción mínima del 30% ($b = 0.3$, ver ec. (29)) de la intensidad límite para detectar esta tensión.

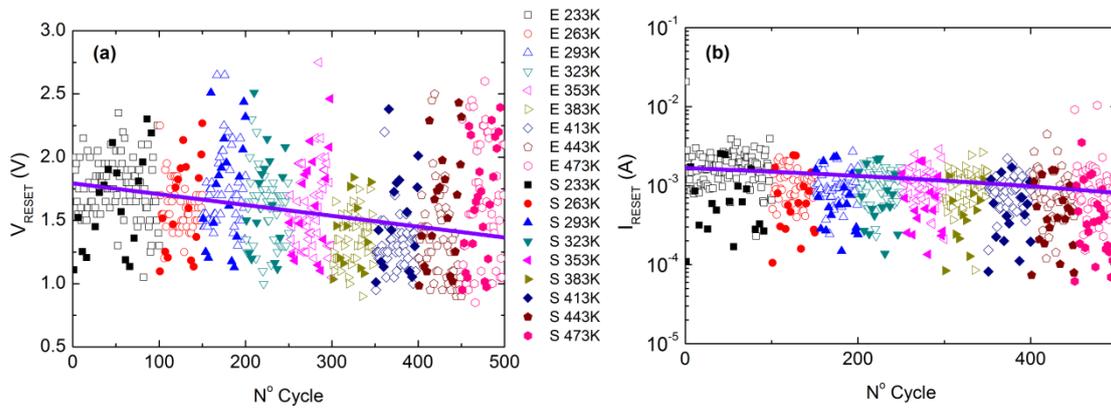


Figura 84: V_{RESET} (a) e I_{RESET} (b) en función del ciclo *set/reset* realizado. La serie de ciclos *set/reset* que se muestra se ha realizado aumentando la temperatura 30 °C cada 50 ciclos aproximadamente. Las medidas experimentales se corresponden con una celda RRAM tipo Ni/HfO₂/Si-n⁺ (ver sección 4.3.2) y se han representado con símbolos huecos mientras que los resultados simulados se han representado mediante símbolos rellenos. Para hacer más patente el descenso de V_{RESET} e I_{RESET} con los ciclos se ha añadido una línea morada que sigue el comportamiento medio de todos los ciclos.

Del mismo modo, también se han simulado varios ciclos de *reset* similares a los ciclos experimentales con ayuda del simulador SIM²RRAM. En la Figura 84 se muestran los resultados obtenidos de V_{RESET} e I_{RESET} para una serie de simulaciones de ciclos *reset* (símbolos sólidos). Estas simulaciones se han realizado escogiendo tanto las dimensiones de los CFs que forman la estructura de conducción como los parámetros de la barrera de potencial del modelo QPC (ver sección 3.2.2.2) de manera aleatoria dentro de los rangos físicamente admisibles.

Tanto los datos experimentales como los simulados presentan un decrecimiento de V_{RESET} e I_{RESET} conforme aumenta la temperatura externa, como se puede ver en la Figura 84 con ayuda de las líneas de tendencia media de todos los resultados obtenidos. Este resultado es esperable y coherente con nuestro modelo ya que los mecanismos que controlan el proceso de disolución de los CFs (difusión de las especies metálicas que forman los CFs, dependencia térmica de las diferentes resistencias, etc.) están térmicamente asistidos. Como ya se ha comentado en el Capítulo 2, el proceso de *reset* se lleva a cabo mediante la disolución de los CFs que componen la estructura de conducción promovida por el calentamiento que se produce al aplicar una tensión externa a la celda. El que la temperatura externa aumente implica que se necesita calentar menos los filamentos, mediante la aplicación de una tensión externa, para llegar

a las condiciones de temperatura del CF, resistencias, etc. que llevan a la ruptura del CF. Por este motivo, aumentar la temperatura externa tiene como resultado una disminución de la tensión de *reset*, como vemos en la Figura 84a.

Esta disminución de la tensión de *reset*, aunque evidente si analizamos un gran número de ciclos, como se ha hecho en la Figura 84, no es apreciable si analizamos ciclos aislados ya que la dependencia con la temperatura externa queda enmascarada con la alta variabilidad de estos dispositivos en sucesivos ciclos *set/reset*.

Para descartar la posible influencia de otros factores no térmicos en esta progresiva reducción de V_{RESET} e I_{RESET} , se han realizado también una serie de 2500 ciclos *set/reset* manteniendo en este caso la temperatura externa fija a 300 K. En la Figura 85 mostramos los resultados obtenidos.

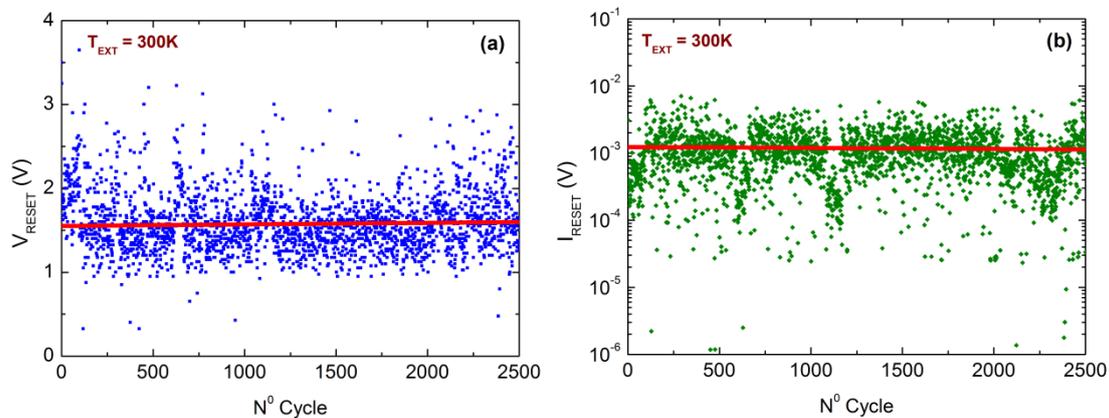


Figura 85: V_{RESET} (a) y I_{RESET} (b) en función del ciclo *set/reset* realizado. Se han realizado 2500 ciclos *set/reset* manteniendo la temperatura externa fija a 300 K durante todo el proceso de medida. La línea roja indica el comportamiento medio de todos los resultados obtenidos que deja patente que no hay ninguna variación de comportamiento medio con el paso de los ciclos que se realicen a una RRAM.

A la vista de la línea de tendencia media que se ha obtenido en este caso, y que se muestra en la Figura 85, queda confirmado que el paso de los ciclos *set/reset* no produce ninguna alteración en la celda que dé lugar al descenso de V_{RESET} e I_{RESET} descrito en la Figura 84. Con esto queda claro que dicha disminución está causada en exclusividad por el aumento de la temperatura externa y no por la propia evolución de la celda con el paso de los ciclos.

Una vez que ha quedado demostrado que éste fenómeno tiene un carácter puramente térmico, debemos identificar y analizar los procesos físicos que se ven influenciados por la variación de la temperatura externa con ayuda del simulador. En la Figura 86 se han representado las curvas I-V para dos celdas RRAM con un solo CF con forma de tronco

de cono en ambos casos. Las líneas sólidas se corresponden con un CF de 30 nm de radio máximo y 1.5 nm de radio mínimo. Del mismo modo, las líneas discontinuas se corresponden con un CF con un radio máximo de 5 nm cuya parte más estrecha tiene un radio de 1.75 nm.

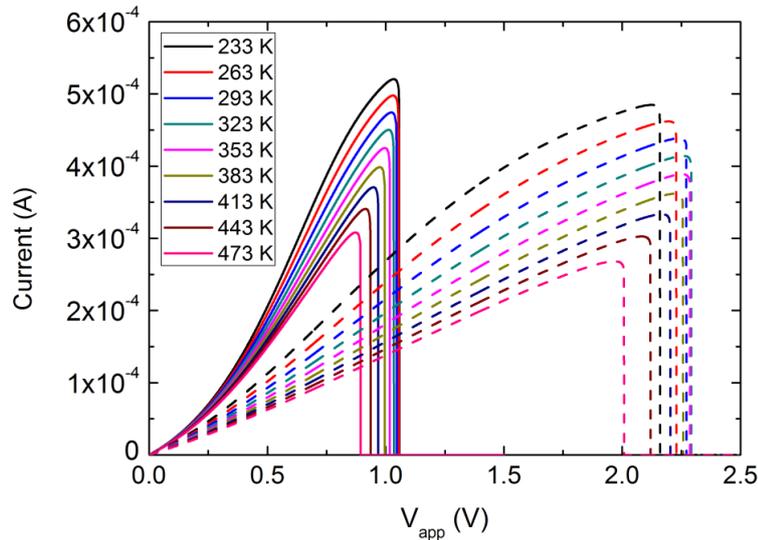


Figura 86: Corriente en función de la tensión aplicada para dos celdas RRAM distintas variando la temperatura externa. Las líneas continuas se corresponden con una celda de un solo CF (con forma de tronco de cono) cuyo radio máximo es de 30 nm y 1.5 nm de radio mínimo. Las líneas discontinuas se corresponden con un CF con un radio máximo de 5 nm cuya parte más estrecha tiene un radio de 1.75 nm.

A pesar de que, como se muestra en la Figura 84, de manera global un gran número de ciclos *set/reset* presentan una tendencia clara en cuanto a la disminución de V_{RESET} e I_{RESET} al aumentar la temperatura externa, el comportamiento particular de cada proceso de *reset* varía de un ciclo a otro, como mostramos en la Figura 86, debido a las variaciones de la estructura de conducción. Esto indica que no hay una dependencia simple y directa entre V_{RESET} y la temperatura externa.

Como ya se ha comentado en capítulos anteriores, son varios los procesos físicos que presentan una dependencia con la temperatura. Por este motivo, esta disminución de la tensión de *reset* se debe explicar atendiendo a la interrelación que existe entre los diferentes procesos físicos que tienen lugar, como son las dependencias térmicas de la conductividad eléctrica de los CF y los mecanismos que controlan la difusión. Además, para cada estructura RRAM, dependiendo de la configuración particular de su estructura de conducción, relacionada con la variabilidad ciclo a ciclo, el peso de cada uno de estos procesos varía según el tamaño y el número de CFs.

Para clarificar esta cuestión, hemos estudiado el comportamiento térmico de los mecanismos físicos que influyen en el proceso de *reset* aislando las dependencias

térmicas que influyen en ellos. En la Figura 87 se muestran los resultados de corriente (Figura 87a) y temperatura del CF (Figura 87b) en función de la tensión aplicada para una RRAM a la cual le hemos ido “activando” y “desactivando” cada uno de estas dependencias térmicas manteniendo la temperatura externa fija a 300 K.

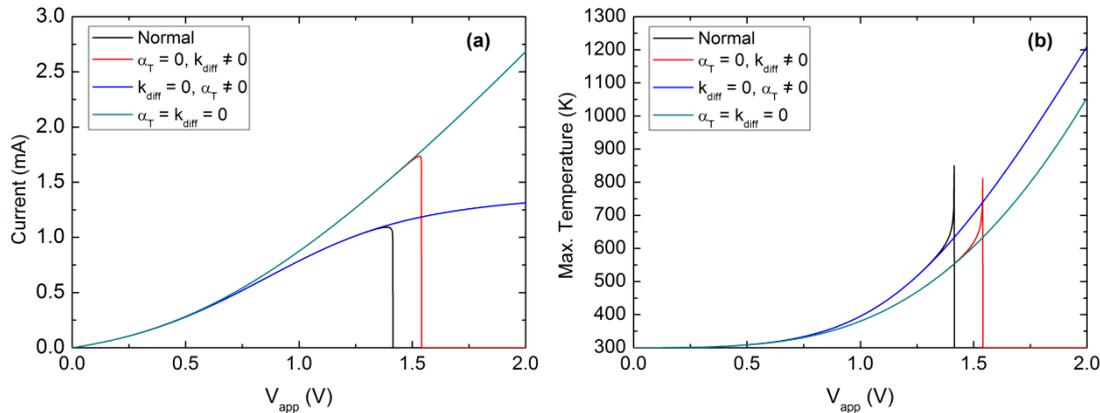


Figura 87: (a) Corriente en función de la tensión aplicada manteniendo la temperatura externa fija ($T_{EXT} = 300$ K). (b) Temperatura máxima del CF en función de la tensión aplicada. La influencia de la difusión de la especie metálica (controlada por el parámetro k_{diff}) y la dependencia térmica de la conductividad eléctrica del CF (controlada por el parámetro α_T) en la forma y evolución de la corriente se pone de manifiesto.

Los principales mecanismos físicos que influyen en la ruptura de los CFs durante el proceso de *reset* son dos. Por un lado, la difusión de la especie metálica, controlada por la constante cinética de difusión k_{diff} (ver Ec. 8 en la sección 2.2), modifica la geometría del CF a lo largo del proceso, y por tanto, la resistencia eléctrica del filamento. Por otro lado, la dependencia con la temperatura de la conductividad eléctrica del CF, caracterizada por el coeficiente de conductividad térmica α_T (ver Ec. 3 en la sección 2.2) también altera la resistencia del CF.

En la Figura 87 mostramos el resultado de eliminar el proceso de difusión fijando $k_{diff} = 0$. De esta manera, la forma del CF nunca cambia por lo que nunca llega a romperse, es decir, nunca se alcanza el estado de HRS, con lo que su temperatura aumenta indefinidamente como se ve en la Figura 87b. No obstante, al seguir existiendo una dependencia de la conductividad eléctrica con la temperatura ya que $\alpha_T \neq 0$, la pendiente de la curva I-V (Figura 87a) sí varía conforme aumenta la tensión aplicada, es decir, conforme el CF aumenta su temperatura. Por el contrario, si $\alpha_T = 0$ y $k_{diff} \neq 0$, el proceso de *reset* ahora sí tiene lugar gracias a la difusión pero a una tensión superior a la normal ya que la resistencia del CF no se incrementa al aumentar la temperatura del CF.

A partir de lo mostrado en la Figura 87, se puede determinar que la dependencia térmica de la conductividad eléctrica del CF contribuye a una reducción de la tensión de *reset* y define la pendiente que toma la curva I-V cuando ésta se encuentra en el régimen óhmico (ver Capítulo 6). Por su parte, el mecanismo de difusión es determinante en el

entorno de la tensión de ruptura. Esto se debe a que el cuello de botella que se produce en el CF al cambiar su forma, activa la auto-aceleración que domina la evolución del proceso, como se puede ver en la Figura 87b en los casos en que $k_{diff} \neq 0$. En definitiva, la temperatura externa es más importante cuanto más cerca esté su valor de la temperatura que dispara la difusión de la especie metálica necesaria para la ruptura del CF. Esto se debe a que ésta también influye de manera directa sobre los parámetros térmicos, ya que si inicialmente toda la estructura se encuentra a una temperatura alta los CFs también lo estarán

Particularmente, los dispositivos tipo Ni/HfO₂/Si-n⁺ además presentan, como ya se vio en la sección 4.3, dos regímenes de funcionamiento definidos: el régimen cuántico, que describimos mediante el modelo QPC (ver sección 3.2.2.2), y el régimen óhmico (ver sección 3.2.2.1). Seguidamente analizaremos cómo afecta la variación de la temperatura externa a estos dos regímenes y los parámetros que los definen.

En la Figura 88 se ha representado la diferencia entre V_{RESET} , la cual da cuenta de la ruptura del CF, y V_{TH_RESET} ⁷, que indica el cambio del régimen cuántico al régimen óhmico (ver Capítulo 6), en función de la temperatura externa para tres dispositivos diferentes con un solo CF. Como vemos, la diferencia entre estos dos parámetros cambia con la temperatura externa, es decir, la relación entre el rango de tensiones aplicadas sobre el que predomina el régimen cuántico o el régimen óhmico se ve alterada.

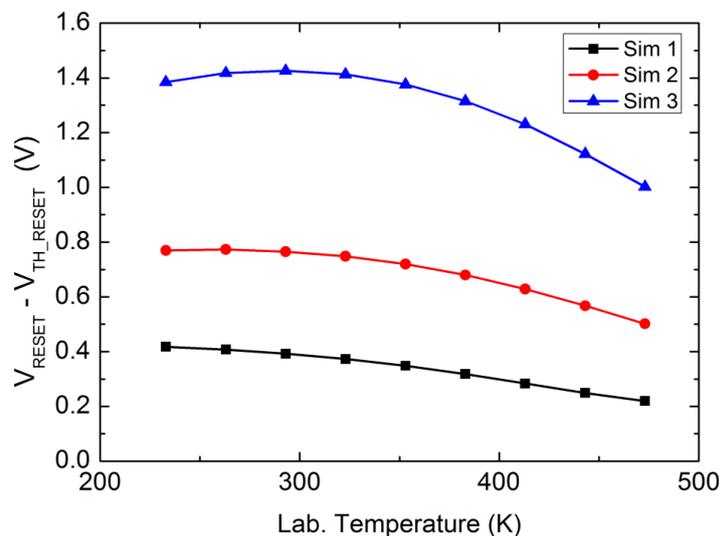


Figura 88: Diferencia entre V_{RESET} y V_{TH_RESET} en función de la temperatura externa para tres celdas de un solo CF con forma de tronco de cono. Sim 1 se corresponden con una celda cuyo CF tiene $r_{CFmax}=30$ nm y $C_{CF0} = 5\%$, Sim 2 se corresponde con CF de $r_{CFmax}=10$ nm y $C_{CF0} = 15\%$ y Sim 3 se corresponde con $r_{CFmax}=5$ nm y $C_{CF0} = 35\%$.

⁷ Tensión Umbral del proceso de *reset*. Esta tensión se define como máximo de la derivada de la intensidad en función de la tensión aplicada.

Este resultado es una prueba inequívoca de que los parámetros que controlan estos comportamientos, y su relación entre ellos, se ven afectados también por la variación de la temperatura externa a la celda. Estos parámetros se corresponden con la resistencia asociada a los caminos cuánticos (R_{QPC} , ver Ecc. 12 y 14) descritos por el modelo QPC [104], la resistencia del propio CF (R_{CF} , ver Ec. 5) y la resistencia de Maxwell (R_M , ver Ec. 1), ya que la conductividad eléctrica de los electrodos también depende de su temperatura. En la Figura 89 se muestra el valor de estas resistencias para dos dispositivos diferentes y para dos tensiones determinadas (0.5 V y 1.0 V) en función de la temperatura externa. La estructura de conducción de estos dispositivos está formada por un solo CF con forma de tronco de cono con las siguientes dimensiones: $r_{CFmax}=23$ nm y $C_{CF0}=12\%$ representadas mediante los símbolos rellenos y $r_{CFmax}=10$ nm y $C_{CF0}=30\%$ para los resultados representados por símbolos huecos.

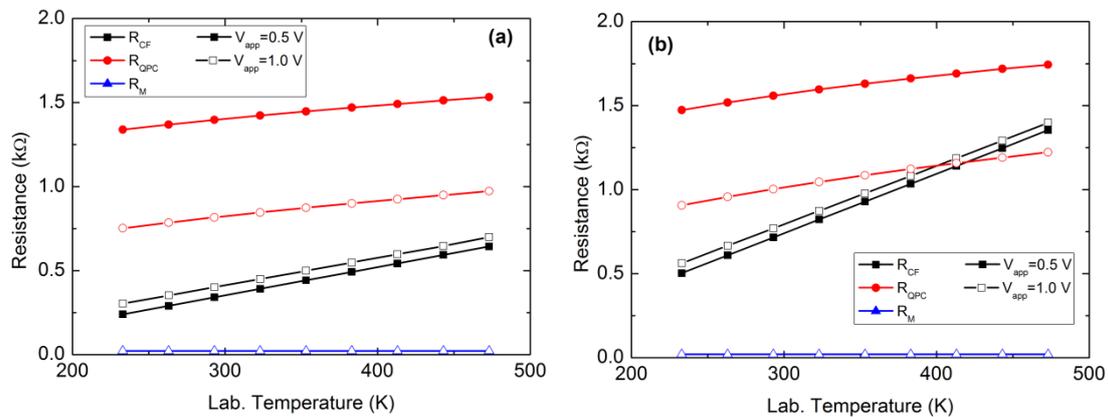


Figura 89: Resistencia para las tensiones de 0.5 V (símbolos rellenos) y 1.0 V (símbolos huecos) en función de la temperatura externa. En ambos casos se ha usado una estructura de conducción con un solo CF con forma de tronco de cono cuyas dimensiones son: (a) $r_{CFmax} = 23$ nm y $C_{CF0} = 12\%$ y (b) $r_{CFmax} = 10$ nm y $C_{CF0} = 30\%$. Se han representado las principales componentes de la resistencia total de la RRAM: resistencia del CF (R_{CF}), resistencia de los caminos cuánticos modelados mediante el modelo QPC (R_{QPC}) y la resistencia de Maxwell (R_M).

De los resultados mostrados en la Figura 89 se deduce que la resistencia de Maxwell (R_M) es siempre mucho más baja que las otras dos componentes resistivas, con lo que no juega un papel importante respecto a la variación de la tensión de *reset*. Por otro lado, se observa que la dependencia con la temperatura externa de R_{QPC} es más baja que la de R_{CF} , siendo este hecho coherente con [128]. Como ya vimos en la sección 3.2.2.2, lo que caracteriza el comportamiento global de la curva I-V es la relación entre estas dos resistencias (ver Figura 80). La desigual influencia de la temperatura externa sobre cada uno de estos parámetros hace que se altere la relación entre ellas, determinando el comportamiento global de la celda RRAM.

El comportamiento cuántico del dispositivo también tiene un papel relevante en el comportamiento global de la celda ante la variación de la temperatura externa, por tanto es importante analizar este efecto con detalle. Con este objetivo hemos analizado el efecto de la temperatura externa en la barrera de potencial de los caminos cuánticos que dan lugar a la corriente túnel caracterizada por R_{QPC} . Para ello se han realizado una serie de medidas experimentales y sus correspondientes simulaciones emulando dichos ciclos. Estas curvas I-V experimentales, aportadas por el IMB-CNM (CSIC), se obtuvieron al someter un dispositivo RRAM que se había llevado previamente al estado LRS, a una rampa de bajas tensiones variando la temperatura externa para cada medida (ver Figura 90). Al aplicar un rango de muy bajas tensiones se consigue que no se altere la estructura de conducción en cada uno de los procesos de medida. De esta forma, este procedimiento nos permite medir la respuesta del dispositivo a distintas temperaturas externas en el régimen cuántico sin el inconveniente de la variabilidad que se produce ciclo a ciclo.

Posteriormente se realizaron las correspondientes simulaciones emulando este mismo experimento. Los resultados se muestran en la Figura 90 junto con los resultados experimentales. En este rango de tensiones (entre 0 V y 0.2 V) predomina el régimen de transporte cuántico, es decir, la resistencia R_{QPC} es la predominante sobre la R_{CF} como se mostró en la Figura 89 (ver también sección 3.2.2.2). Para implementar la influencia de la temperatura externa en el modelo QPC se ha considerado que la variación de la temperatura produce una alteración de la barrera de potencial que definen los caminos cuánticos. Para reproducir los datos experimentales se ha hecho uso de la barrera de potencial descrita en la sección 3.2.2.2. Aunque la variación de la temperatura puede alterar la barrera en varios aspectos, como son la altura y/o la anchura, por simplicidad hemos asumido que todas las variaciones del potencial recaen sobre su anchura. De esta manera, se mantienen constantes los parámetros $\beta=0.9$ y $\Phi=0.59$ eV y sólo varía el parámetro α del modelo. Además, la estructura de conducción está compuesta por un CF con forma de tronco de cono con un radio máximo de 30 nm y un radio de 0.09 nm en su zona más estrecha. Aunque la celda real no tiene por qué estar compuesta por un único CF, como se ha supuesto para las simulaciones, según los resultados obtenidos en la sección 4.2, este tipo de celdas presentan una estructura de conducción formada por un CF muy grueso en su parte más ancha acompañado por otros mucho más delgados. Esto implica que a bajas tensiones casi toda la corriente circula por este CF grueso haciendo despreciable el efecto del resto de los CFs.

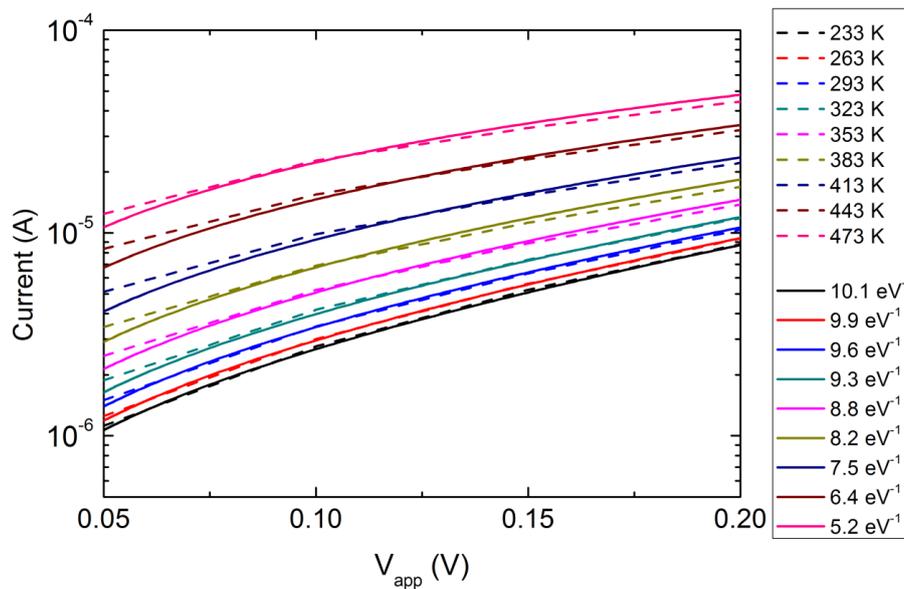


Figura 90: Corriente en función de la tensión aplicada para diferentes temperaturas externas. Los resultados experimentales (línea discontinua) y simulados (línea continua) que se muestran se corresponden con una misma celda RRAM en estado LRS, con la misma estructura de conducción en todos los casos. En la leyenda, junto a las líneas discontinuas se indican las temperaturas externas usadas en cada medida y junto a las líneas continuas los valores del parámetro α del modelo QPC usado en cada simulación.

Como se esperaba, el incremento de la temperatura externa, y el consecuente aumento del nivel de Fermi de la distribución de electrones en los extremos de la constricción descrita mediante el modelo QPC, puede ser implementado como una alteración de la barrera de potencial que definen los caminos cuánticos. Como vemos en la Figura 90, esta alteración de la barrera, que se ha modelado como una disminución del ancho de ésta con el aumento de la temperatura externa, produce un incremento de la intensidad que circula a través de la celda. Este resultado es consecuente con todo lo obtenido en este capítulo ya que un aumento de la intensidad que circula por la estructura de conducción implica una reducción de la tensión de *reset* al calentarse los CFs más rápidamente.

En resumen, la tensión y la intensidad de *reset* de las celdas RRAM tipo Ni/HfO₂/Si-n⁺ presentan una clara dependencia con la temperatura externa. No obstante esta dependencia no tiene un único y claro origen sino que viene dada por la dependencia térmica de todos los mecanismos físicos que intervienen durante el proceso de *reset*. Aunque cada uno de estos mecanismos presenta su propia dependencia con la temperatura, es la combinación y/o interacción entre ellos la que da lugar a esta dependencia global de V_{RESET} e I_{RESET} con esta temperatura externa. El aumento de la temperatura también hace que el proceso de auto-aceleración, que conduce a la ruptura

del CF, se alcance a tensiones más bajas ya que se necesita un menor auto-calentamiento. Del mismo modo, el aumento de la temperatura externa afecta a la relación entre la resistencia asociada al modelo QPC y la de los propios CFs. Este hecho produce una alteración en el rango de tensiones en los que tiene predominancia cada uno de los regímenes de transporte presentes en estas celdas. Del mismo modo, esta variación de la temperatura también afecta a la barrera de potencial que definen los caminos cuánticos, definidos en el modelo QPC, produciendo un aumento de la intensidad que circula por ellos al aumentar la temperatura externa.

8

Estudio del proceso de *set*

8.1 Introducción.

En este trabajo, la caracterización del proceso de *set* se realiza de manera análoga a como se lleva a cabo el proceso de *reset* en el caso de las celdas unipolares, es decir, se le aplica una rampa de tensión a la celda produciendo así la conmutación de la resistencia de la celda del estado HRS al LRS.

En el proceso de *set* se pueden distinguir dos fenómenos físicos que se producen de manera simultánea: una conducción a través de los defectos del óxido, la cual hemos modelado mediante una corriente de Poole-Frenkel, y el proceso de reconstrucción de la estructura de conducción propiamente dicha. En la Figura 91 mostramos cuatro curvas experimentales de la celda RRAM tipo Ni/HfO₂/Si-n⁺ descritas en la sección 4.3. En ellas podemos distinguir la corriente que se produce a bajas tensiones, la cual se corresponde con la conducción a través del cuerpo del óxido y que depende del área del dispositivo, ya que los CFs se encuentran destruidos. Simultáneamente a esta corriente, se está llevando a cabo la reconstrucción de la estructura de conducción cuya prueba la podemos ver experimentalmente cuando se produce un brusco aumento de la intensidad. Este hecho es la prueba de que el filamento conductor se vuelve a formar.

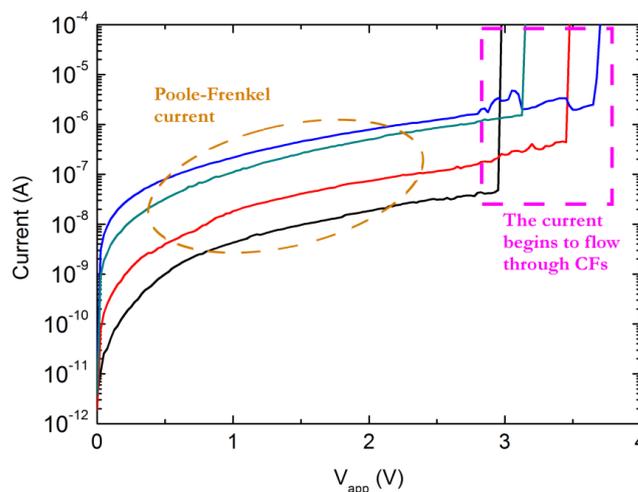


Figura 91: Curvas I-V de *set* de una celda de Ni/HfO₂/Si-n⁺. Inicialmente la conducción se lleva a cabo a través del óxido ya que la estructura de conducción se encuentra cortada. Este proceso se ha modelado como una corriente de Poole-Frenkel. Simultáneamente la estructura de conducción se ha ido reconstruyendo produciendo un brusco incremento de la intensidad cuando ésta se reconstruye.

Aunque estos dos procesos físicos ocurren simultáneamente durante el proceso de *set*, únicamente la reconstrucción de la estructura de conducción (ver sección 2.2), es la causante de la conmutación resistiva del estado HRS al LRS. No obstante, como estos dos procesos se producen simultáneamente y no se pueden separar, experimentalmente hablando, en ese capítulo los abordaremos como partes del mismo proceso. La formación de los CFs que da lugar al LRS es ahora mismo una cuestión en la que hay mucha controversia. Hay muchos grupos de investigación en todo el mundo tratando de establecer una teoría clara [49]. Sin embargo, se ha comprobado que el proceso de *set* depende del tipo de óxido y los electrodos en cada RRAM [130, 52, 131, 132]. Nosotros hemos fundamentado la física de los procesos de *set*, para ser coherentes con el modelo desarrollado en los Capítulos 2 y 3, en base a un planteamiento relacionado con reacciones redox y también con difusión de las especies metálicas que forman el CF.

8.2 Corriente de Poole-Frenkel.

Se ha demostrado experimentalmente (ver Figuras 91 y 92) que aun cuando la celda se encuentra en estado HRS ésta sigue conduciendo. Este tipo de conducción se produce con muy baja intensidad (para nuestros dispositivos en el entorno de los 0.1 – 100 nA a tensiones no superiores a 0.5 V) y aumenta conforme lo hace V_{app} .

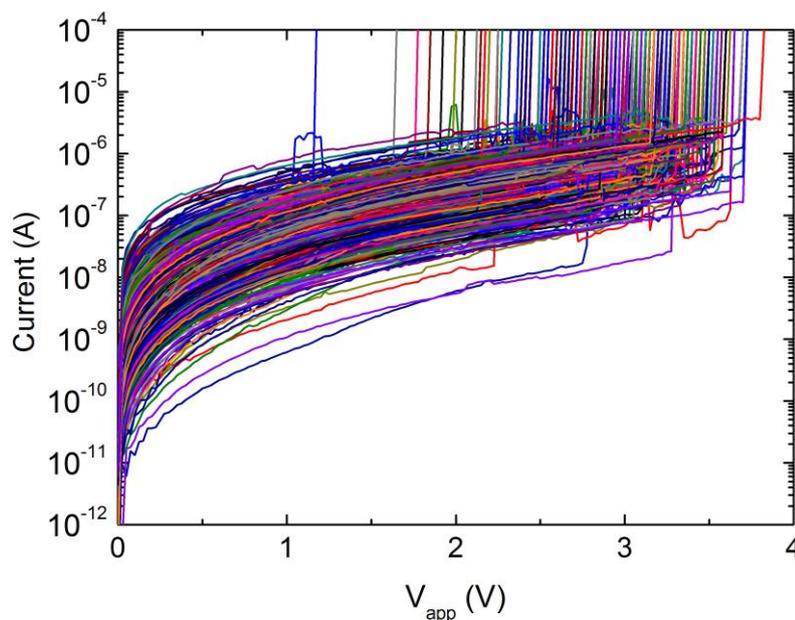


Figura 92: Conjunto de curvas I-V experimentales de *set* de una celda de Ni/HfO₂/Si-n⁺ correspondientes a 2000 ciclos *set/reset* consecutivos. Inicialmente esta celda se encuentra en estado de HRS con lo que la conducción de corriente que se observa hasta el salto abrupto de corriente, donde se vuelve a reconstruir el CF, no se puede producir través de los CFs sino a través de corrientes relacionadas con otros mecanismos.

Para modelar esta corriente que circula a través del dieléctrico se ha considerado que ésta se produce debido al transporte de portadores a través de las trampas del óxido, arrastrados por el campo eléctrico inducido al aplicar una tensión externa entre los electrodos. Este tipo de conducción se corresponde con la corriente de Poole-Frenkel cuya intensidad viene dada por [133]:

$$I_{PF} = aE e^{\frac{b\sqrt{E}-\varepsilon_T}{k_B T_{ox}}}, \quad (30)$$

siendo E el campo eléctrico inducido (se puede calcular en media como $E = V_{app}/t_{ox}$), ε_T la energía media de las trampas del óxido respecto al fondo de la banda de conducción, T_{ox} la temperatura del óxido, k_B la constante de Boltzmann. Finalmente, a y b son dos parámetros de ajuste. Como se puede ver en la Figura 92 y 93, los niveles de intensidad varían de ciclo a ciclo de forma cuasi-aleatoria, por lo que son necesarios estos parámetros para reproducir cada curva.

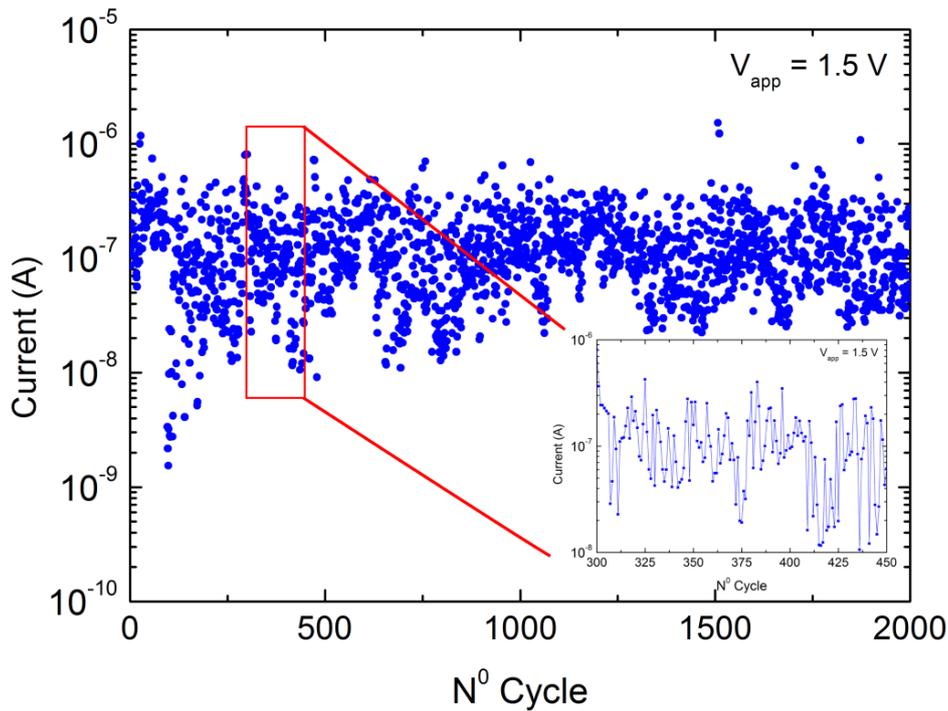


Figura 93: Intensidad en función del ciclo para una tensión $V_{app} = 1.5$ V. Aunque los valores de la intensidad varían entre 10^{-6} y 10^{-8} A en la mayoría de los casos, la variación entre ciclos consecutivos tiene un carácter cuasi-aleatorio. En la figura interior se muestran los ciclos desde el 300 hasta el 450 por claridad.

Por este motivo, no se ha encontrado ninguna regla que permita seleccionar los parámetros a y b de una manera secuencial para poder simular grandes series de ciclos *set/reset*. Una vez más queda patente la alta variabilidad que presentan estos dispositivos.

Esta intensidad, aunque se calcula durante la simulación, no tiene un papel relevante en el funcionamiento de ninguno de los bloques que forman el simulador (ver Capítulo 3). Esto se debe a que, aunque es una corriente que discurre a través de la celda, no circula propiamente por los CFs con lo que no influye en el proceso de calentamiento de éstos, es decir, no influye en la reconstrucción de los CFs. Además, teniendo en cuenta los resultados obtenidos para este tipo de celda (sección 4.3), el valor de esta intensidad es despreciable frente a la corriente que circula por los CFs en el estado de LRS.

8.3 Reconstrucción de la estructura de conducción. Intensidad de *compliance*.

Durante la aplicación de la rampa de tensión al dispositivo, la estructura de conducción, inicialmente cortada, se reconstruye gracias a la reacción de reducción que se produce en el óxido (ver Capítulo 2). Esta reacción, cuya velocidad viene dada por la Ecuación (6), está promovida por la aplicación de una tensión externa a la celda.

Además de las características propias de los materiales que forman el dispositivo, la tensión de *set* depende en parte de la estructura de conducción previa que se haya destruido en el ciclo anterior ya que ésta se vuelve a reconstruir. No obstante, también se crean, con el paso de los ciclos, nuevos CFs que modifican la estructura de conducción dando lugar así a la alta variabilidad que presentan estos dispositivos.

En el simulador SIM²RRAM, el proceso de *set* se lleva a cabo reconstruyendo los CFs cortados que forman la estructura de conducción previamente definida, como se muestra en la Figura 94b. En este caso se ha simulado un dispositivo con un único CF con forma de tronco de cono. En la Figura 94b se aprecia cómo la reacción química de reducción reconstruye el CF a lo largo de la rampa de tensión aplicada.

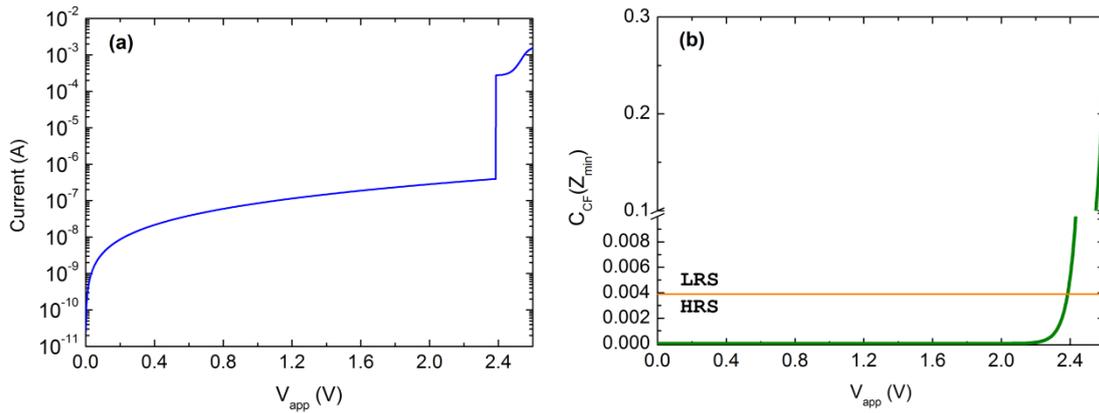


Figura 94: (a) Curva I-V y (b) concentración de la especie metálica de la zona más estrecha del CF en función de la tensión aplicada para un proceso de *set*, obtenidas mediante simulación. Por encima de 2 V se refuerza la reacción química de reducción que inicia la reconstrucción del CF, que inicialmente se encuentra cortado. Una vez que el grosor mínimo del CF supere el valor del radio atómico, r_{at} (ver Tabla 2) vuelve a conducir.

Si atendemos a la evolución de la concentración de la especie metálica del CF, la cual se muestra en la Figura 94b, observamos que en cuanto el proceso de reconstrucción se inicia el CF crece rápidamente. Si este proceso no se para, el CF seguirá creciendo, rellenando gran parte del área del dispositivo o incluso todo el área, provocando un cortocircuito masivo entre los electrodos. Este hecho, a efectos prácticos, deja el dispositivo inutilizado ya que quedaría en estado LRS de forma permanente. Como observamos en la Figura 95a, la intensidad total, después del brusco aumento que sufre al volver a conducir el CF, sigue aumentando debido al aumento del tamaño de éste. Por este motivo, para llevar a cabo un proceso de *set* sin inutilizar el dispositivo, se debe limitar la intensidad que circula por la celda, es decir, fijar una intensidad de *compliance* ($I_{compliance}$).

Esta limitación de la intensidad que circula por el dispositivo (ver Figura 95a) permite, indirectamente, el control del tamaño que alcanza el CF, y por extensión la resistencia del estado LRS final, evitando así que crezca de manera descontrolada, como se puede ver en la Figura 95b. Para estas simulaciones se ha fijado $I_{compliance} = 0.1$ mA, al igual que hicieron los investigadores del IMB-CNM (CSIC) en sus medidas experimentales (Figura 92). De este modo queda patente que este procedimiento genera estructuras de conducción con filamentos muy delgados en la parte estrecha del tronco de cono (ver Figura 95b). Este resultado es compatible con los estudios realizados para los procesos de *reset*, expuestos en la sección 4.3, donde los CFs generalmente se caracterizan por ser gruesos en la parte ancha del tronco de cono y muy delgados en su parte más estrecha. Este resultado también ha sido corroborado por otros autores en estructuras similares [80].

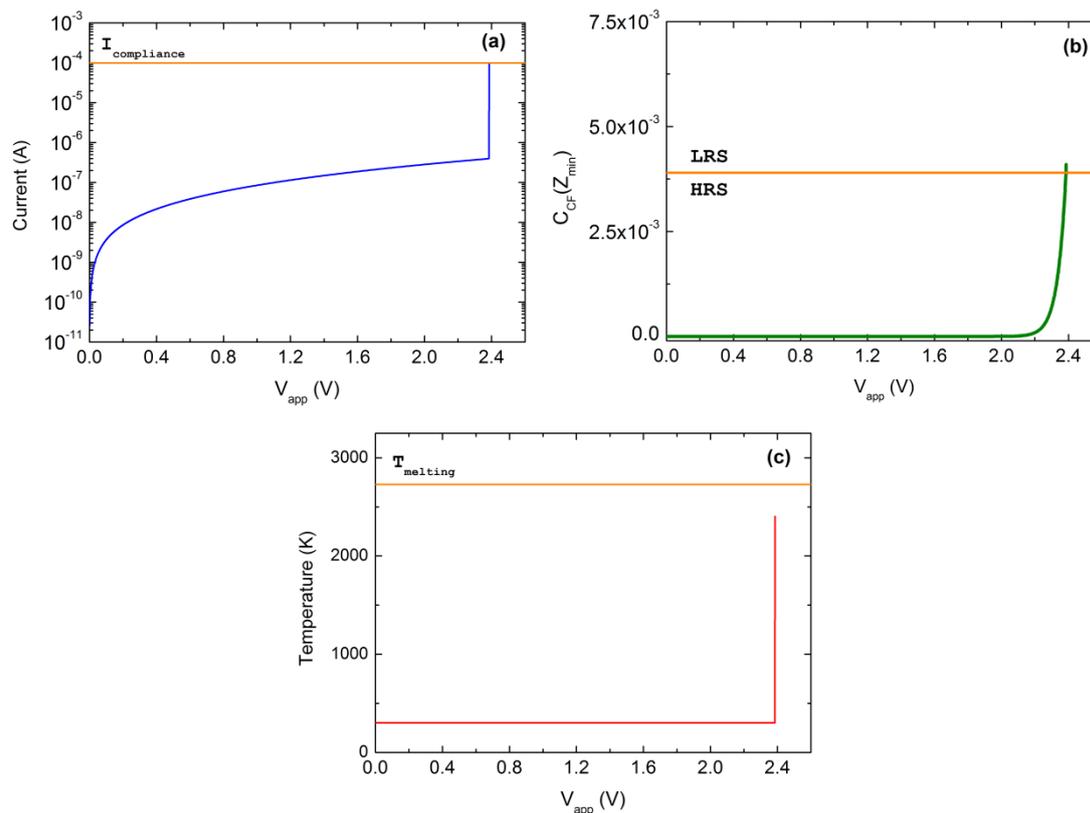


Figura 95: (a) Curva I-V y (c) curva de temperatura del CF simuladas del proceso de *set* en el que se ha establecido una intensidad límite ($I_{compliance} = 0.1$ mA) a la cual se termina el proceso de medida. En (b) tenemos la evolución de la concentración de la especie metálica de la zona más estrecha del CF en función de la tensión aplicada. Una vez que el grosor mínimo del CF supere el valor del radio atómico, r_{at} (ver Tabla 2) el CF vuelve a conducir.

La intensidad de *compliance* no sólo tiene un papel relevante en el proceso de *set*, sino que además afecta a la durabilidad del dispositivo [134, 92]. Como se mostró en la Figura 92, el proceso de *set*, al igual que ocurría al de *reset*, es muy variable. Por este motivo parece conveniente tomar una $I_{compliance}$ alta, junto con un amplio rango de tensiones, para asegurarnos así de que todos los procesos de *set* se llevan a cabo. Es decir, para evitar que algún ciclo pueda interrumpirse debido a que la propia intensidad de Poole-Frenkel alcance la $I_{compliance}$. En contrapartida, el aumento de esta intensidad límite implica someter al dispositivo a mayores temperaturas (ver Figura 95c) lo que es más agresivo para el dispositivo a lo largo de los ciclos, reduciendo así su vida útil. Esto quiere decir que debemos conseguir un equilibrio entre estabilidad de comportamiento y durabilidad a la hora de fijar este parámetro.

Aunque el proceso de *set* es muy variable, el conjunto de tensiones e intensidades de *set* se encuentran menos dispersas, si las comparamos que se obtienen para los procesos de *reset*. En la Figura 96 se han representado todas las intensidades de *set* (I_{SET}) en función de las tensiones de *set* (V_{SET}) experimentales para los dispositivos RRAM tipo Ni/HfO₂/Si-n⁺ descritos en la sección 4.3. Si comparamos este resultado con la gráfica

análoga que obtuvimos para el proceso de *reset* que mostramos en la Figura 66 (repetida como figura interior de la Figura 96) vemos que en este caso los datos se encuentran mucho más localizados. Del mismo modo, la distribución de puntos no presenta ninguna forma determinada, como por ejemplo la forma de “C” que mostraban las tensiones e intensidades de *reset* para la celda Cu/HfO₂/Pt (ver Figura 58).

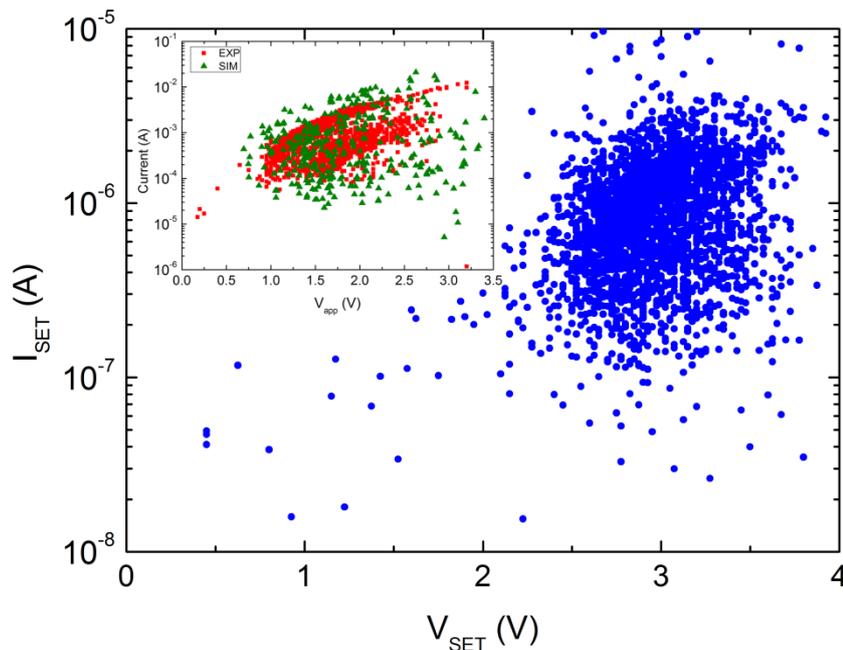


Figura 96: Intensidad de *set* en función de la tensión de *set* correspondientes con 2000 ciclos experimentales, para dispositivos basados en la estructura Ni/HfO₂/Si-n⁺.

En definitiva, durante el proceso de *set* tienen lugar dos procesos físicos distintos e independientes. Por un lado, se observa conducción a través del óxido gracias a procesos de Poole-Frenkel. La alta variabilidad de la estructura interna del óxido debido a la variación de la distribución de trampas y defectos a lo largo de los ciclos, hace que esta corriente sea muy variable. Por otro lado, gracias a la reacción química de reducción la estructura de conducción comienza a reconstruirse. Una vez que la estructura de conducción vuelve a conducir la celda pasa del estado HRS al estado LRS. El incremento abrupto de corriente que circula en este instante produce un calentamiento y un crecimiento excesivo del CF dando lugar a la destrucción de la celda. Por este motivo es necesario imponer una intensidad límite ($I_{compliance}$) con el fin de controlar, indirectamente, los daños estructurales.

En la Figura 97 mostramos las curvas I-V de cuatro ciclos de *set* experimentales (símbolos) y sus correspondientes simulaciones (líneas sólidas). Este modelo nos permite obtener resultados totalmente compatibles con los resultados experimentales obtenidos para este tipo de dispositivos.

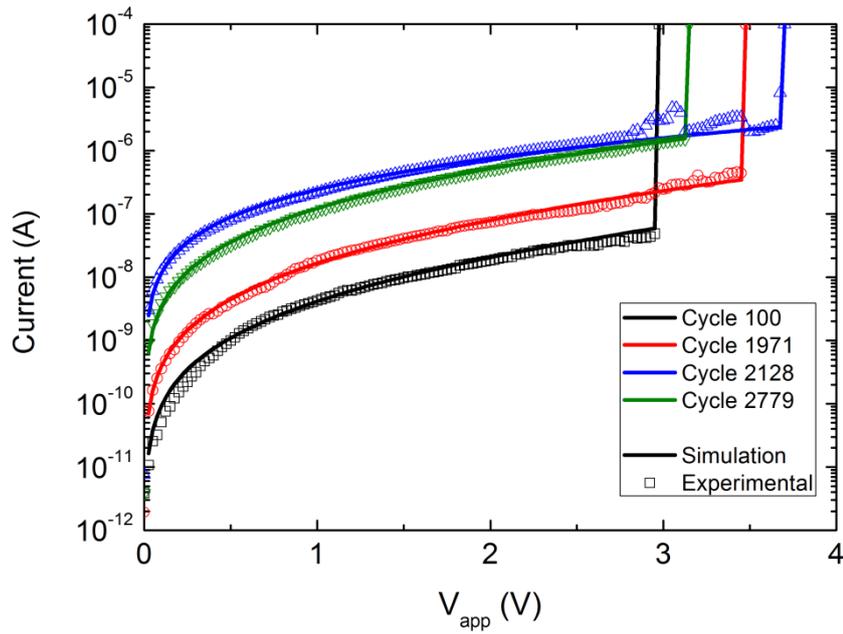


Figura 97: Curvas I-V experimentales (símbolos) y sus correspondientes simulaciones (líneas continuas) correspondientes a la celda RRAM tipo Ni/HfO₂/Si-n⁺. Los resultados obtenidos mediante simulación son compatibles con las medidas experimentales.

9

Modelo compacto para el proceso de *reset* en simuladores de circuitos

9.1 Introducción.

Como ya hemos comentado, a la hora de simular el comportamiento de los dispositivos RRAM se pueden dar varios enfoques y/o considerar distintas aproximaciones (ver sección 1.4). Con el simulador SIM²RRAM hemos abordado esta cuestión mediante un modelo macroscópico con el que hemos podido obtener mucha información del funcionamiento interno de la celda y de la física que está detrás de todo ello. No obstante, si tenemos en cuenta que una memoria RRAM real no está compuesta por una sola celda sino por un conjunto muy grande de ellas, este simulador necesita tiempos de computación demasiados grandes para obtener resultados en un sistema de este tipo. Por este motivo se hace necesario abordar este problema desde un punto de vista más enfocado a la eficiencia de la simulación que a la exactitud de los resultados desde el punto de vista físico. El análisis del equilibrio entre velocidad de computación y la exactitud de la descripción de la física es habitual en la simulación de cualquier sistema de ingeniería, y en particular, de los dispositivos electrónicos.

Para conseguir este objetivo, hemos desarrollado un nuevo modelo circuital [9] basado en el modelo físico usado por el simulador SIM²RRAM (ver Capítulo 2). Este nuevo modelo, desarrollado para SPICE, nos permitirá implementar de manera rápida cada una de las celdas que forma una memoria real.

En este nuevo modelo, los CFs que forman la estructura de conducción de la celda no se modelan mediante unos filamentos sin estructura interna, sino que la estructura de conducción está formada por una serie de subestructuras (en adelante bloques) conectadas entre sí en serie o paralelo. Estos bloques pueden ser conectados de distintas maneras para construir CFs con diferentes formas. La gran ventaja de este nuevo modelo es que estos bloques se pueden conectar tanto en serie, con lo que podemos simular un filamento cilíndrico por ejemplo, como en paralelo, con lo que podemos crear unas estructuras de conducción en forma de árbol con diferentes ramificaciones (ver Figura 98). Este punto supone una cierta ventaja respecto al modelo anterior donde la estructura de conducción debía estar formada siempre por uno o varios CFs independientes desde el punto de vista de su geometría.

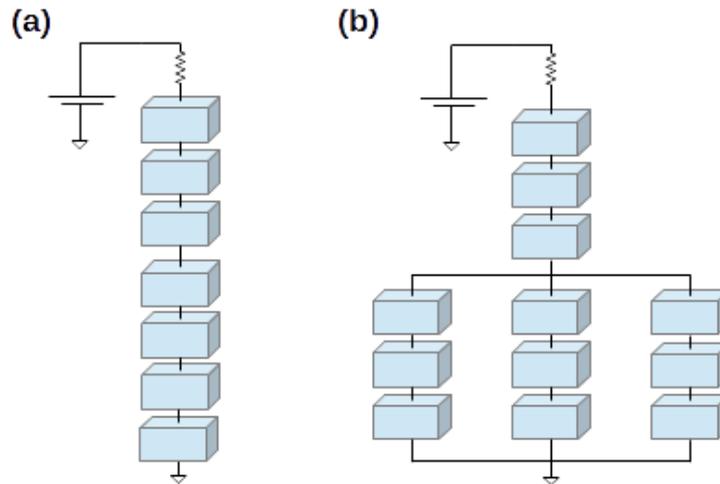


Figura 98: Esquema de la estructura de conducción formada por la unión de diferentes bloques. En (a) se muestra un dispositivo con un solo filamento mientras que en (b) se representa una celda cuya estructura de conducción tiene forma de árbol con tres ramas.

En la bibliografía se pueden encontrar varios modelos orientados a la simulación de dispositivos RRAM basados en SPICE, entre los que se pueden destacar: [76, 77, 73, 74, 71, 78]. No obstante, algunos de estos modelos no simulan dispositivos RRAMs propiamente dichos, sino que consideran estos dispositivos como un caso particular de una clase más grande de dispositivos llamados Memristores [10]. Por esta razón, en ellos se tiende a describir el comportamiento del dispositivo mediante una única variable de estado externa. De este modo, detalles de los procesos físicos internos como son la creación y destrucción de los CFs, temperaturas internas, etc. no son accesibles. De hecho, sólo algunos de estos modelos de SPICE para RRAMs incluyen explícitamente la temperatura del dispositivo como una variable que cambia con el tiempo de simulación [73].

Dado que creemos que el estado actual del desarrollo de estos dispositivos aún requiere profundizar más en la física de sus fenómenos internos, y para mejorar este tipo de aproximaciones, se propone en este capítulo un nuevo modelo para el análisis de los procesos de *reset*, con el cual podemos obtener una detallada descripción física de las propiedades internas a lo largo de la estructura de conducción bajo una liviana implementación en un simulador de SPICE. Además, este modelo cuenta con toda la potencia de ser un macromodelo de SPICE, con las posibilidades que esto abre a nivel de simulación de circuitos. Una vez se consigan RRAMs lo suficientemente fiables para poder integrarlas en el *back end of line* (BEOL) de circuitos integrados, serán necesarios buenos modelos compactos para asistir a los diseñadores en la simulación de circuitos.

9.2 Macromodelo para simulación de procesos de *reset*.

Entre los procesos físicos detrás de la ruptura de los CFs en las RRAMs, uno de los más comunes está relacionado con la activación térmica del proceso de *reset* [64, 63], cuyo estudio y simulación requiere la resolución de la ecuación del calor. Se pueden encontrar varios artículos en la literatura [63, 122, 64] donde se han considerado diferentes aproximaciones (incluyendo descripciones físicas en 1D y 2D) para abordar esta cuestión.

En el modelo que presentamos en el Capítulo 2, para el fenómeno de la conmutación resistiva, se resolvía la ecuación del calor (ver Ecuación (2)) a lo largo de cada CF que forma la estructura de conducción que atraviesa el óxido determinando la temperatura en cada punto de los CFs del dispositivo. Usando como base este modelo hemos desarrollado este nuevo simulador circuital.

Aunque el esquema matemático usado en este nuevo modelo es diferente a lo explicado en el Capítulo 2, los fundamentos físicos son similares porque se incluyen, aunque con un procedimiento diferente, para cada bloque el calentamiento por efecto Joule, las pérdidas de calor hacia el óxido, la conducción de calor a lo largo de toda la estructura de conducción, la variación de las resistencias de los CFs, etc. Para poder obtener una descripción detallada de la evolución del sistema, cada CF se ha subdividido en más de un bloque. No obstante, como se explica más adelante, con un número reducido de estos bloques se puede describir con la suficiente exactitud cualquier CF con lo que seguimos teniendo un modelo razonablemente simple computacionalmente hablando.

En la Figura 99 podemos ver de manera esquemática los pasos seguidos para plantear nuestro nuevo modelo, junto con el subcircuito de SPICE base (Figura 99c) empleado en el modelo de cada bloque mostrados en la Figura 99b. Como vemos, esta nueva aproximación toma el concepto de CF de nuestro modelo macroscópico previo para la conmutación resistiva y lo subdivide en una serie de bloques conectados en serie (Figura 99b). Cada uno de estos bloques a su vez se modela eléctricamente mediante un subcircuito (Figura 99c) que se convierte en un nuevo elemento electrónico que se puede implementar fácilmente en un simulador de SPICE. Con este modelo de RRAM, la simulación de estructuras de conducción formadas por un CF del que nacen diferentes ramas puede ser fácilmente realizada. Este tipo de estructuras de conducción tan complejas son muy difíciles de realizar para los simuladores que trabajan bajo modelos macroscópicos como los de [63, 64, 91, 6] por lo que rara vez son considerados.

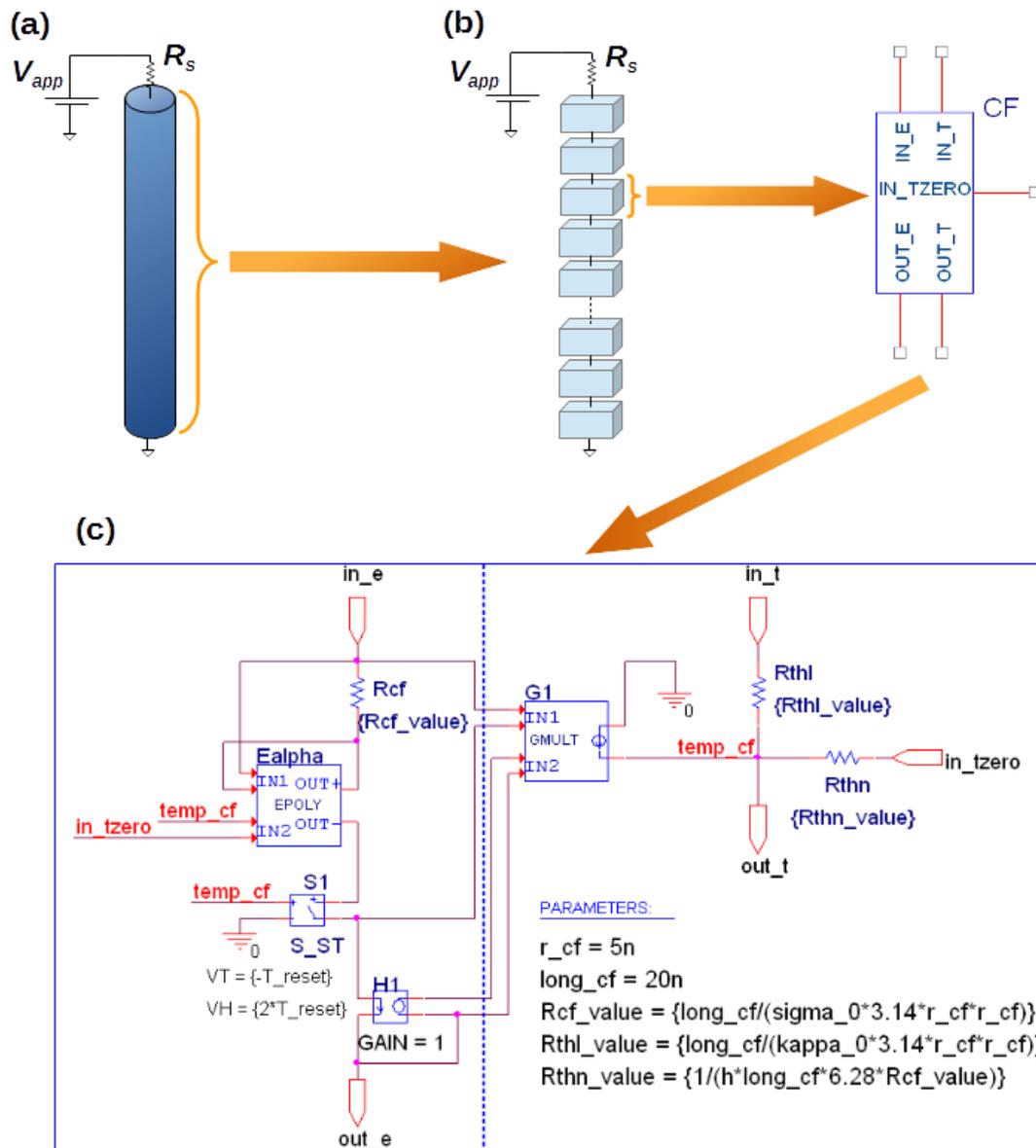


Figura 99: (a) Modelo simplificado de la estructura de conducción de una celda RRAM. (b) Esquema de la aproximación de la estructura de conducción usada en el macromodelo circuital donde los CFs se modelan mediante unos bloques interconectados. En (c) se muestra el subcircuito basado en SPICE usado para modelar cada bloque.

Como se observa en la Figura 99c, el modelo circuital está compuesto por dos partes diferenciadas: la parte de la derecha se encarga de modelar el comportamiento térmico mientras que los elementos que se encuentran a la izquierda de la línea discontinua simulan el comportamiento eléctrico. Este modelo está pensado para ser usado dentro de un simulador de circuitos como un elemento más por lo que para simular el comportamiento térmico del CF se ha utilizado un circuito eléctrico equivalente. En este circuito la temperatura se representa mediante una tensión y el flujo de calor mediante corrientes. Para la parte térmica hemos incorporado tres componentes que representan

los tres principales términos de la ecuación (2). La resistencia térmica R_{thn} , da cuenta del flujo lateral de calor desde el CF hacia el óxido y R_{thl} se encarga de modular el calor que fluye a través del CF. El calentamiento por efecto Joule que se produce al circular una corriente por el CF se modela en la parte térmica mediante la fuente de corriente GI , cuyo valor se obtiene multiplicando la corriente que circula por el CF, la cual se ha convertido en una tensión mediante la fuente dependiente HI con ganancia unitaria, y la caída de tensión entre los extremos del CF. La temperatura de cada bloque viene dada por la caída de tensión en el nodo interno del circuito llamado $temp_{cf}$. Finalmente, la entrada in_tzero fija la temperatura de referencia a partir de la cual se calcula el incremento de la resistencia del CF debido a la variación de la temperatura.

En todas las simulaciones que se han realizado para este capítulo, y que mostraremos más adelante, la entrada in_tzero de los bloques iniciales y finales se conectan a una fuente DC de 300 V, asemejándose así a las condiciones de contorno habituales que fijan la temperatura externa, y por tanto en la del interfaz electrodo-filamento, a 300 K [64, 63, 6]. Otros estudios para simuladores similares trasladan estas condiciones de contorno hacia la interfaz electrodo-contacto externo de la celda. Esta variación en las condiciones de contorno permite calcular, además de la temperatura de la estructura de conducción, el perfil de temperatura dentro de los electrodos. Los trabajos publicados que usan esta condición de contorno, como los de [135, 136], muestran un importante aumento de la temperatura en el interior de los electrodos que podría influir en la dinámica del dispositivo al aumentar la movilidad de las vacantes de oxígeno [135] en los dispositivos bipolares que ellos analizan.

Dado que en los dispositivos que vamos a estudiar en este trabajo el proceso de *reset* se produce gracias, principalmente, a la difusión térmicamente asistida de la especie metálica que forma el CF (ver Capítulo 2), este calentamiento de los electrodos no juega un papel relevante. Por lo tanto, y con el fin de poder comparar los resultados de nuestros dos simuladores o con otros similares que fijen la condición de contorno en la interfaz electrodo-filamento, hemos decidido establecer las mismas condiciones. De cualquier forma, otras condiciones de contorno como las que imponen [135] y [136] pueden ser fácilmente implementadas en nuestro modelo, incluyendo una resistencia térmica para tener en cuenta el comportamiento térmico de los electrodos.

La parte eléctrica de cada bloque se modela mediante una resistencia R_{cf} y el interruptor SI que controla cuándo el bloque, que representa una sección del CF, están abiertos después de un proceso de *reset*; es decir, cuándo se considera que el CF está roto o no. Al igual que ocurre con la resistencia del CF definida en el modelo macroscópico (ver ecuaciones (3 y 5)) que depende de la temperatura, en este nuevo modelo también debe existir una dependencia similar. Para tener en cuenta este fenómeno, la fuente dependiente E_{alpha} , la cual es de tipo polinómica, permite la implementación de una resistencia dependiente de tensión (que representa la temperatura) para dar cuenta de la variación de la resistencia debido a la temperatura. De esta forma, la resistencia total del bloque se obtiene mediante la ecuación (31):

$$R_{Total} = R_{cf_value} \cdot [1 + \alpha(T - T_0)], \quad (31)$$

donde T viene dada por $temp_cf$ y el parámetro α (*alpha*) se corresponde con el coeficiente térmico de la resistencia del CF y la temperatura de referencia T_0 está representada por la tensión en el nodo in_tzero . R_{cf_value} es la resistencia de la sección del CF que representa cada bloque a la temperatura de referencia.

Como ya se ha dicho, el interruptor controlado por tensión SI determina si el CF está roto o no después del proceso de *reset*. La entrada de control del interruptor es la temperatura del propio CF ($temp_cf$). Si esta temperatura es superior a la temperatura de ruptura del CF, previamente fijada mediante el parámetro T_reset , el interruptor se considera abierto. En el caso contrario SI permanecerá cerrado con lo que el CF no se ha roto. El interruptor SI es de tipo VSWITCH, el cual forma parte de las librerías de PSPICE [137]. Este tipo de interruptores se caracterizan por presentar un ciclo de histéresis en la transición abierto-cerrado para evitar la vuelta a cerrado inmediatamente después de ser abierto.

A modo de resumen, en la Tabla 13 mostramos todos los parámetros que son necesarios definir para la simulación de un dispositivo RRAM con este macromodelo circuital. En esta misma tabla también mostramos la equivalencia con los parámetros usados en el simulador SIM²RRAM.

PARÁMETROS DE CARACTERIZACIÓN DEL SUBCIRCUITO		
SPICE		SIM ² RRAM
σ_{CF0}	Conductividad eléctrica de referencia del CF	σ_{CF0}
k_{th}	Conductividad térmica del CF	k_{th}
α_T	Coefficiente térmico de la conductividad eléctrica del CF	α_T
r_{CF}	Radio del CF	r_{CF}
t_{ox}	Longitud del CF	t_{ox}
T_reset	Temperatura de <i>reset</i>	

Tabla 13: Definición de los parámetros necesarios para cada bloque en la simulación de dispositivos RRAM usando para ello el macromodelo circuital basado en SPICE. En la columna SIM²RRAM se muestran los símbolos equivalentes usados en el modelo macroscópico (ver Tabla 2).

9.2.1 Estimación de T_{reset} .

El parámetro T_{reset} controla la ruptura del CF ya que esta temperatura es la que determina cuando el CF se corta o no a través del interruptor SI (ver Figura 99). Por este motivo ésta es una magnitud esencial.

En varios macromodelos de RRAM, para definir la ruptura del CF se fija una temperatura de modo que el CF se asume roto cuando esta temperatura se alcanza [73]. Esto se trata de una aproximación del proceso real ya que el proceso de *reset* no ocurre de forma abrupta cuando se alcanza una temperatura determinada sino que depende de otros factores, como mostramos en el Capítulo 7. Además, como vimos en la sección 4.2.3, en el caso de los procesos de *reset* progresivos producidos por CFs muy estrechos, la ruptura del CF se produce lentamente, siendo este proceso gradual. Sin embargo, esta aproximación se basa en que en la mayoría de los casos que se producen en una serie larga de ciclos *set/reset* no encontramos estos casos particulares de *reset* (ver Figura 57). Como ya vimos, una vez que el proceso de disolución del CF se inicia, el efecto de la auto-aceleración hace que se alcance de manera muy rápida el estado de HRS para un CF [64].

Si consideramos T_{reset} fija, como hacen algunos autores [71], obtendríamos como resultado de las simulaciones curvas I-V independientes de la rampa de tensión empleada. Esto está en contraposición con los resultados mostrados en la sección 3.2.1 (ver Figura 30) donde queda demostrado que la curva I-V tiene una fuerte dependencia con la pendiente de la rampa usada para la medida. Con el objetivo de incluir este efecto en nuestro modelo, T_{reset} se calcula en cada caso para adecuarla al tipo de celda que se quiere simular y las condiciones de medida, es decir, la pendiente de la rampa de tensión aplicada.

Con el fin de obtener un método que nos permita calcular el valor de T_{reset} partimos de la ecuación (32). Esta ecuación, da cuenta de cómo varía la forma del CF con el tiempo debido a la difusión de las especies metálicas. Esta ecuación es una versión simplificada de la ecuación (9) usada en el modelo macroscópico. En este caso, se ha eliminado el término que da cuenta del proceso de oxidación debido a que su efecto es poco significativo frente al proceso de difusión, como ya se demostró en la sección 3.4.2. Del mismo modo se desprecia el término de reducción debido a que este modelo sólo se centra en el estudio del proceso de *reset*. En definitiva, la variación de la concentración de filamento a lo largo del eje z , $C_{CF}(z)$, viene dado por la siguiente ecuación:

$$\frac{dC_{CF}(z)}{dt} = -C_{CF}(z) \cdot k_{diff} \cdot e^{\frac{-E_a}{k_B T_{CF}(z)}}, \quad (32)$$

donde k_{diff} es la constante cinética de difusión, E_a la energía de activación de la difusión térmica, k_B es la constante de Boltzmann y $T_{CF}(z)$ se corresponde con la temperatura del CF en la posición z . La ecuación (32) es una ecuación diferencial de primer orden, similar a la ecuación que describe la descarga de un condensador con la siguiente constante de tiempo:

$$\tau(T_{CF}) = 1/[k_{diff} \cdot \exp(-E_a/k_B T_{CF}(z))]. \quad (33)$$

De acuerdo con la ecuación (32), para una temperatura distinta de cero, siempre se puede producir la ruptura del CF, es decir, el proceso de *reset* ocurrirá para cualquier temperatura siempre que el tiempo de duración del experimento sea lo suficientemente largo. Sin embargo, a bajas temperaturas la velocidad con la que se lleva a término este proceso es muy baja y por lo tanto la geometría del CF permanece casi sin cambios. Sólo cuando se alcanza una temperatura lo suficientemente alta como para hacer la constante de tiempo (ecuación (33)) comparable con el tiempo de observación se llegará al estado de HRS. Por lo tanto, T_{reset} debe estar relacionado con algún tiempo característico del experimento. En particular, para las rampas de tensión necesarias para calcular las curvas I-V, se ha elegido el siguiente tiempo por analogía con el tiempo de subida en circuitos RC:

$$2.2 \cdot \tau = \Delta t, \quad (34)$$

donde Δt es el tiempo necesario para aumentar un voltio la tensión aplicada durante la medida de la curva I-V. Teniendo en cuenta todo esto, usando las Ecuaciones (33) y (34), podemos calcular el parámetro T_{reset} mediante la siguiente ecuación:

$$T_{reset} = \frac{E_a}{k_B \ln(k_{diff} \Delta t / 2.2)}. \quad (35)$$

Es importante destacar que este procedimiento no añade ningún parámetro extra respecto al modelo macroscópico; sólo hay que calcular el valor de T_{reset} previamente al cálculo de la curva I-V de *reset* a partir de la ecuación (35), utilizando para ello los parámetros físicos E_a y k_{diff} ya introducido en el modelo macroscópico (ver Tabla 2).

9.2.2 Determinación del número de bloques necesarios para modelar un filamento conductor.

Por último, antes de comenzar con la simulación del dispositivo RRAM, es necesario estimar el número de bloques más adecuado para simular los CFs manteniendo el equilibrio entre exactitud de los resultados y eficiencia computacional de la simulación.

Para el estudio de este aspecto, hemos realizado una serie de simulaciones para dos dispositivos con un solo CF de radios 20 nm y 3 nm. Durante el proceso hemos ido aumentando progresivamente en cada simulación el número de bloques con que se modelaba el CF. En la Tabla 14 mostramos los resultados obtenidos de las tensiones e intensidades de *reset* en función del número de bloques usados en cada simulación para las dos estructuras.

r_cf = 20 nm		
Número de bloques	V _{RESET} (V)	I _{RESET} (mA)
3	1.16	5.21
6	1.25	5.20
12	1.30	5.21
20	1.32	5.22
90	1.32	5.23

Tabla 14A: Tensión e intensidad de *reset* en función del número de bloques usados para simular un CF de 20 nm de radio. Los parámetros usados para estas simulaciones son: $h=4 \cdot 10^{10}$ W/(K·m²), $\sigma_0=5 \cdot 10^6$ (Ω·m)⁻¹, $\kappa_0=4$ W/(K·m) y $T_{reset}=750$ K.

r_cf = 3 nm		
Número de bloques	V _{RESET} (V)	I _{RESET} (mA)
3	1.34	90.6
6	1.37	89.8
12	1.37	89.9
20	1.37	89.8
90	1.37	89.8

Tabla 14B: Tabla análoga a la Tabla 14A para un CF de radio 3 nm. Los parámetros de simulación usados son los mismos que se indican para la Tabla 14A.

A la vista de los resultados obtenidos, con tan solo 12 bloques podemos obtener unos resultados suficientemente exactos para la mayoría de los casos. No obstante, tenemos

la posibilidad de disminuir el número de bloques a la mitad, con lo que disminuimos considerablemente los tiempos de simulación, manteniendo niveles de exactitud suficientemente buenos.

En adelante, todos los resultados que mostraremos se simularán usando 12 bloques por CF ya que al usar el simulador para el estudio de una sola celda aislada no necesitamos un rendimiento tan alto.

9.3 Validación del modelo y resultados.

En primer lugar debemos validar las aproximaciones realizadas para el desarrollo de nuestro nuevo macromodelo circuital. Para ello vamos a comparar los resultados de este modelo con los obtenidos con el simulador SIM²RRAM, el cual ya ha sido validado suficientemente en los capítulos anteriores con datos experimentales.

En primer lugar, antes de realizar las correspondientes simulaciones, debemos determinar el valor del parámetro T_{reset} adecuado para cada una de las pendientes de las rampas de tensión que se van a utilizar. En la Figura 100 mostramos el valor de este parámetro calculado según la ecuación (35) para un amplio rango de pendientes de la tensión aplicada:

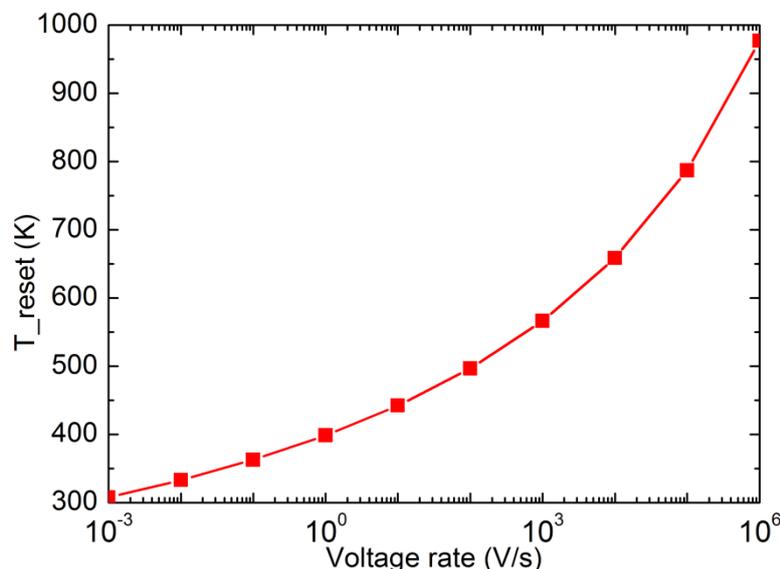


Figura 100: T_{reset} en función del valor de la pendiente de la rampa de tensión que se aplica a la celda. Los datos mostrados en esta gráfica se han calculado a partir de la Ecuación (35). Los valores de los parámetros de caracterización de la celda RRAM tipo Cu/HfO₂/Pt son los que se muestran en la Tabla 5.

Observando los resultados mostrados en la Tabla 15 para T_{reset} , los cuales se corresponden con el rango de pendientes para la rampa de tensión que se emplean habitualmente, puede parecer que los valores que toma este parámetro son bajos. Sin embargo, se debe tener en cuenta que T_{reset} depende del tiempo necesario para realizar la curva I-V de *reset*, como se discutió en la sección 9.2.1. Además, este parámetro no tiene por qué ser necesariamente igual a la temperatura máxima que alcanza el CF cuando se rompe [64], sino que T_{reset} puede ser considerada como una temperatura umbral que caracteriza el comienzo del proceso de disolución del CF. Por ello, este parámetro depende de las características particulares de la estructura y del material del que está compuesto el CF. Como veremos más adelante (ver Tabla 16) este parámetro toma valores más elevados para otro tipo de estructuras.

Pendiente de V_{app} (V/s)	T_{reset} (K)
0.0001	308
0.01	333
0.1	363
1	399
10	442

Tabla 15: Valores del parámetro T_{reset} para los distintos valores de la rampa de tensión usados en la Figura 101. Estos valores se corresponden con parte de los representados en la Figura 100.

En la Figura 101 mostramos los resultados obtenidos a partir de nuestro nuevo modelo circuital (líneas discontinuas) en comparación con los resultados obtenidos a partir del simulador SIM²RRAM (líneas continuas) para distintas rampas de tensión. Estas simulaciones se han realizado para un dispositivo RRAM tipo Cu/HfO₂/Pt, similar a los mostrados en la sección 4.2, con estructuras de conducción de igual tamaño. Ambos modelos muestran resultados compatibles en cuanto a su dependencia con la pendiente de la tensión aplicada y a los niveles de la tensión e intensidad de *reset*.

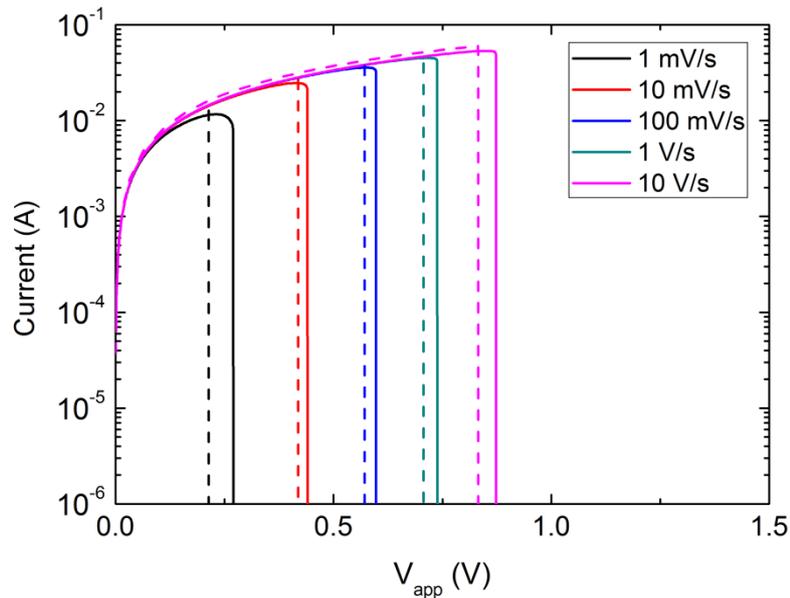


Figura 101: Curvas I-V de *reset* obtenidas para distintos valores de la pendiente de la rampa de tensión aplicada. Para estas simulaciones se ha usado la celda RRAM tipo Cu/HfO₂/Pt descrita en la sección 4.2. Las líneas continuas se corresponden con los resultados obtenidos por el simulador SIM²RRAM mientras que las líneas discontinuas se han obtenido empleando el modelo circuital.

Todas las simulaciones mostradas a lo largo de esta tesis se han realizado manteniendo la pendiente de la rampa de tensión fija. Por este motivo, en la Figura 102 mostramos los resultados de varias simulaciones realizadas usando una rampa de tensión constante de 0.1 V/s, la cual se corresponde con la que se hemos usado habitualmente, para CFs con diferentes grosores. En este caso también se puede comprobar que los resultados son compatibles. No obstante, para los CFs más estrechos (0.5 y 1 nm) sí se observa una cierta desviación de los resultados. Esto se debe a que el modelo macroscópico contempla la posibilidad de que el proceso de *reset* pueda ser lento como en el caso de los *reset* progresivos (ver sección 4.2.3). Por el contrario, en el macromodelo circuital todos los procesos de ruptura se llevan a cabo de manera abrupta, es decir, siempre se llega al estado de HRS cuando se alcanza la T_{reset} fijada inicialmente independientemente de las condiciones reales en las que se pudiera encontrar los filamentos. Por esta razón, este modelo no puede dar cuenta de este tipo de procesos progresivos. Sin embargo, incluso en estos casos, hemos sido capaces de obtener tensiones y niveles de corriente parecidos. En definitiva, la principal diferencia entre ambas aproximaciones se ve alrededor de la tensión de *reset*, ya que en este punto se produce siempre una abrupta caída de la intensidad en el macromodelo circuital y progresiva, con diferentes grados, en el otro.

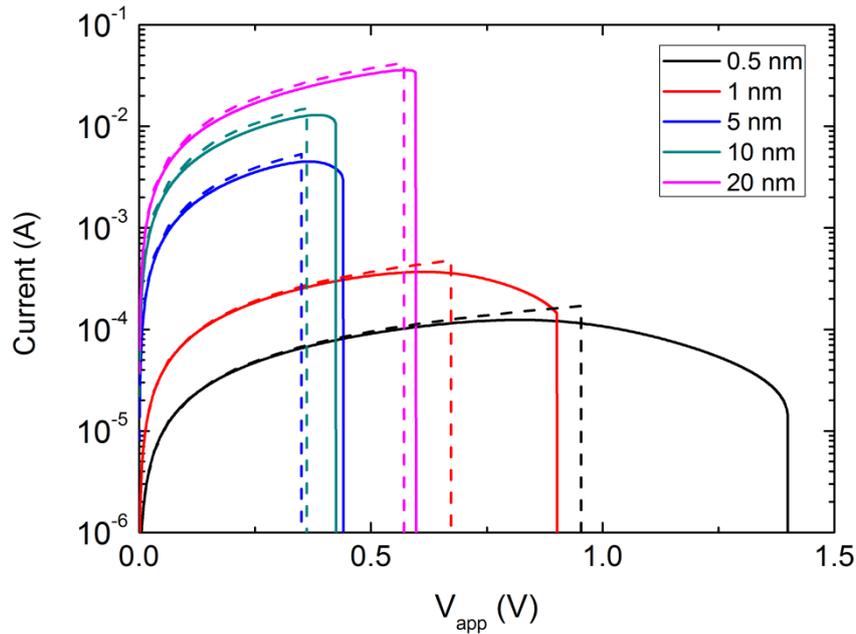


Figure 102: Curvas I-V de *reset* para estructuras de conducción de un único CF con distintos grosores. En todos los casos se ha usado una pendiente de la rampa de tensión fija de 0.1 V/s. Las líneas continuas se corresponden con los resultados obtenidos por el simulador SIM²RRAM mientras que las líneas discontinuas se han obtenido con el modelo circuital.

Una vez hemos confirmado el buen comportamiento del modelo circuital para las estructuras de conducción formadas por un único CF, el siguiente paso que debemos acometer es la simulación de estructuras de conducción más complejas. Este nuevo modelo permite simular estructuras de conducción complejas conectando los bloques en serie y en paralelo de manera que formen una estructura de árbol ramificado (Figura 98b). Dado el que simulador SIM²RRAM no permite la simulación este tipo de estructuras de conducción, compararemos en este caso los resultados de nuestro macromodelo circuital con los resultados obtenidos a partir de las medidas experimentales que podemos encontrar en [100]. El dispositivo usado en esta publicación es una celda RRAM unipolar del tipo W/NiO/Pt cuyo dieléctrico tiene un espesor de 25 nm y sus curvas I-V presentan un comportamiento escalonado, es decir, con varios *reset* parciales. Los parámetros que hemos usado para caracterizar este tipo de celda de acuerdo con nuestro macromodelo los mostramos en la Tabla 16:

Parámetros	Valores
h	$10^9 \text{ W}/(\text{K}\cdot\text{m}^2)$
σ_0	$2.5 \cdot 10^5 (\Omega\cdot\text{m})^{-1}$
κ_0	$4.0 \text{ W}/(\text{K}\cdot\text{m})$
α	$1.7 \cdot 10^{-3} \text{ K}^{-1}$
E_a	1.4 eV
T_{reset}	698 K

Tabla 16: Parámetros de caracterización de la celda RRAM tipo W/NiO/Pt usados para las simulaciones mostradas en las Figuras 103 y 104.

Una vez definida la correspondiente estructura de conducción, cuyo esquema se muestra en el interior de la Figura 103, interconectando los correspondientes bloques se obtuvieron los siguientes resultados:

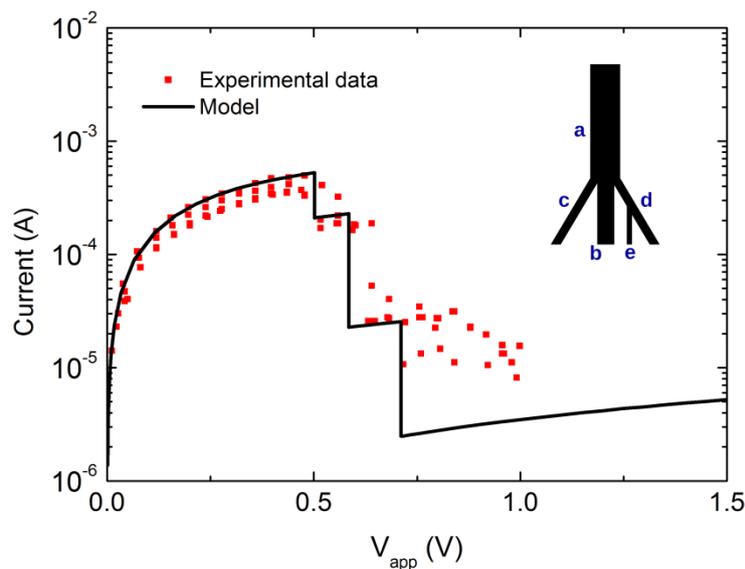
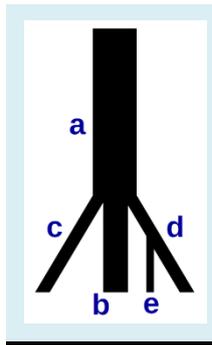


Figura 103: Curvas I-V experimentales obtenidas para un dispositivo RRAM unipolar [100] (símbolos) y su curva simulada asociada (línea). Los valores de los parámetros de caracterización de la celda se muestran en la Tabla 16 mientras que la pendiente de la rampa de tensión usada es de 1 V/s. En la figura interior se muestra la forma y composición de la estructura de conducción usada, cuyas dimensiones se muestran en la Tabla 17.

Para realizar las simulaciones que mostramos en la Figura 103 hemos generado una estructura de conducción en forma de árbol ramificado. El esquema de este CF ramificado lo mostramos en detalle en la Tabla 17 junto con los parámetros de cada una de las ramas, o subfilamentos, que lo componen:



Rama	Longitud (nm)	Radio (nm)
<i>a</i>	15.0	10.0
<i>b</i>	10.0	4.0
<i>c</i>	10.8	2.0
<i>d</i>	10.8	2.0
<i>e</i>	7.8	0.7

Tabla 17: Dimensiones (longitud y radio) de cada una de las ramas que configuran la estructura de conducción usada para la simulación mostrada en la Figura 103.

Una vez finalizada la simulación, a partir de los resultados obtenidos, podemos calcular mapas detallados de la distribución de temperaturas a lo largo de todas las ramas. En la Figura 104 mostramos la temperatura a lo largo de los CFs, para una tensión previa al primer *reset* parcial y otra a una tensión posterior, con el objetivo de ilustrar el proceso de ruptura que conduce al estado de HRS del dispositivo RRAM mostrando en la Figura 103. Como se puede ver, para una tensión aplicada por debajo de 0.45 V (Figura 104a), donde aún no se ha roto ningún CF, el área caliente se encuentra en la rama principal *b*, por encima del nodo donde los subfilamentos “nacen”. Esta situación se debe a que como la rama *b* es la más gruesa, y por lo tanto la que presenta una menor resistencia, la mayoría de la intensidad circula por ella. No obstante, el resto de las ramas también conducen por lo que se produce un leve aumento de su temperatura. Para una tensión de 0.55 V (Figura 104b), una vez que el subfilamento principal se ha roto, las áreas más calientes se han desplazado hacia los subfilamentos *c* y *d*. Ahora son estos dos los encargados de transportar la mayor cantidad de corriente al haber desaparecido la rama *b*. Al seguir aumentando la tensión estas dos ramas se romperán casi simultáneamente porque tienen dimensiones similares, dejando un único camino conductor a través del CF más estrecho (Figura 104c). Dado que conforme se van rompiendo las sucesivas ramas la intensidad total que circula por toda la celda va disminuyendo, se puede ver que también se produce un descenso progresivo de la temperatura en el CF principal *a*.

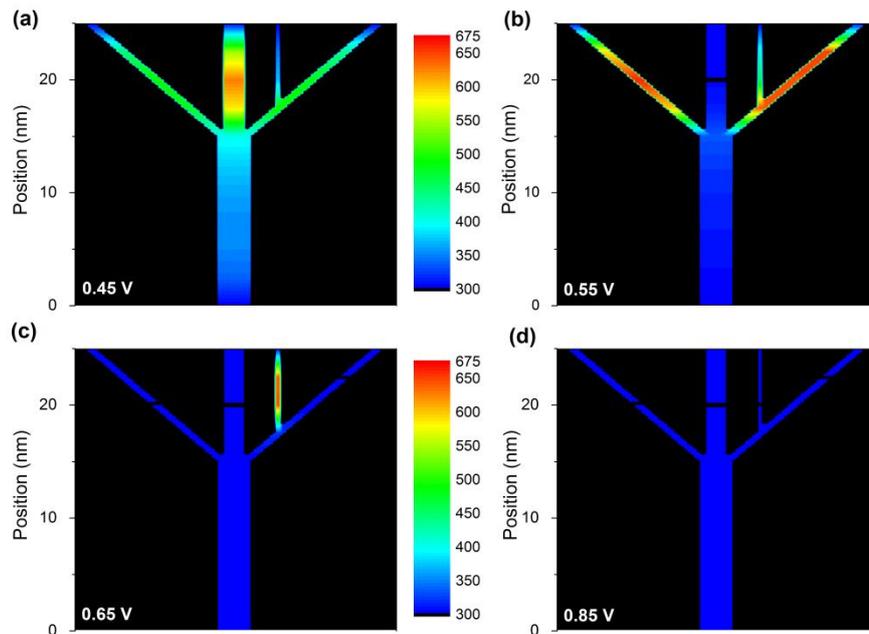


Figura 104: Temperatura a lo largo de toda la estructura de conducción calculada a partir de las simulaciones hechas con el simulador circuital. En (a) se muestra la distribución de temperaturas cuando $V_{app}=0.45$ V, en (b) cuando $V_{app}=0.55$ V, (c) a $V_{app}=0.65$ V y en (d) para $V_{app}=0.85$ V. La temperatura, en escala de colores, se da en grados Kelvin.

El orden de la ruptura de los subfilamentos a través de proceso de *reset* depende de las dimensiones de los subfilamentos y de las características térmicas y eléctricas de los materiales (ver Tabla 16) de la RRAM. Estos parámetros determinan la generación de calor dentro de cada CF y la capacidad de disipación de éste hacia el óxido o hacia los contactos metálicos. De hecho, es interesante destacar que unos dispositivos cuya estructura de conducción es ligeramente diferente a los estudiados anteriormente pueden tener curvas I-V muy diferentes. En la Figura 105a mostramos la curva I-V de *reset* para un dispositivo con la misma estructura de conducción que la mostrada en la Tabla 17 pero habiendo disminuido en 5 nm el radio del CF principal a. De este modo, la nueva estructura de conducción queda como se muestra en la Tabla 18:

	Rama	Longitud (nm)	Radio (nm)
	<i>a</i>	15.0	5.0
	<i>b</i>	10.0	4.0
	<i>c</i>	10.8	2.0
	<i>d</i>	10.8	2.0
	<i>e</i>	7.8	0.7

Tabla 18: Dimensiones (longitud y radio) de cada una de las ramas que configuran la estructura de conducción simulada para obtener la Figura 105.

Como se puede observar en la Figura 105, con este pequeño cambio, la curva I-V pasa de ser una curva con varios escalones a tener un solo escalón abrupto, aunque la estructura siga teniendo varias ramas. Esto es debido a que, como vemos en la Figura 105b, ahora la zona caliente se encuentra en el CF principal, por debajo del nodo de donde nacen todas las ramas. Una vez que este CF se rompe, la estructura de conducción queda cortada completamente ya que no hay ningún otro camino por el que pueda circular la corriente a diferencia de lo que ocurría en la Figura 104b. En este caso, al ser el CF principal más estrecho, este se calienta antes que los demás dando lugar a esta situación.

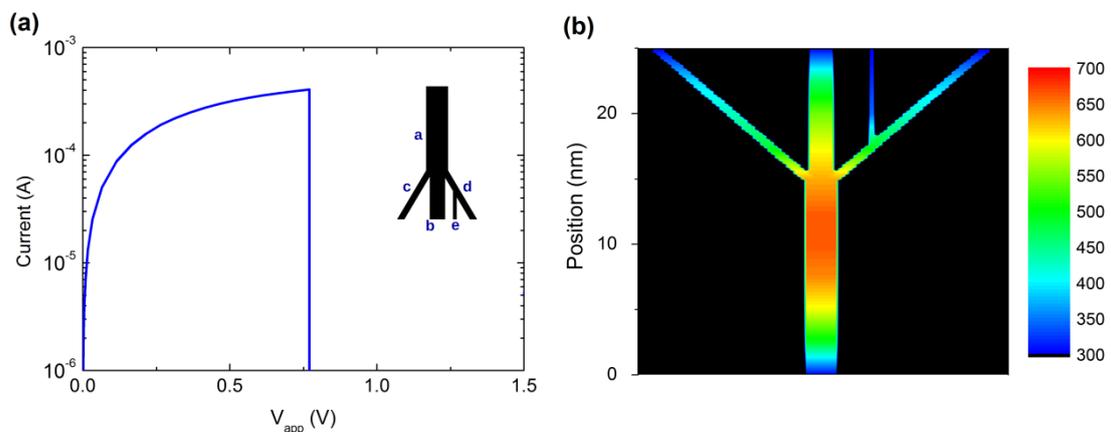


Figura 105: (a) Curva I-V de *reset* simulada para la estructura de conducción descrita en la Tabla 18. En (b) se muestra la distribución de temperaturas a lo largo de toda la estructura de conducción calculada a la tensión de 0.73 V.

Por último, hemos realizado una serie de simulaciones, que mostramos en la Figura 106, utilizando la misma estructura de conducción descrita en la Tabla 17. En estas simulaciones se ha mantenido esta estructura de conducción fija excepto por la rama *d*, cuyo radio se ha ido incrementando desde 0.5 nm hasta 11.5 nm, con incrementos de 1 nm. Se puede observar en la Figura 106 que, aunque el resto de las ramas son iguales en todas las simulaciones, variando sólo una de ellas se puede obtener una gran variedad de curvas I-V diferentes. Esta variabilidad se observa frecuentemente en las curvas I-V de *reset* experimentales a lo largo de series largas de ciclos *set/reset* para una misma celda. Es un resultado esperado ya que en cada proceso de *set* se pueden formar diferentes configuraciones de la estructura de conducción a partir de la estructura cortada que quedó del ciclo *reset* anterior y nuevas ramas que se puedan crear. De este modo se explica la gran variabilidad de curvas I-V de *reset* que podemos obtener en estos dispositivos.

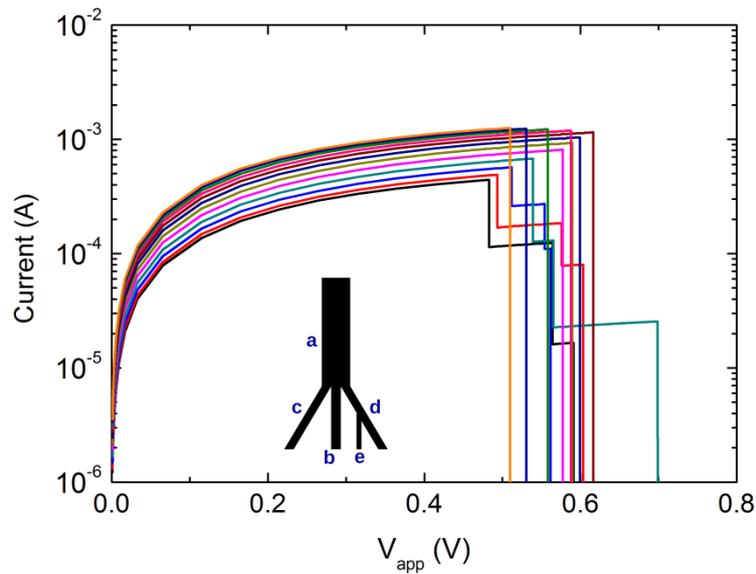


Figura 106: Curvas I-V simuladas para la misma estructura descrita en la Tabla 17. El radio de la rama d varía desde 0.5 nm hasta 11.5 nm aplicando incrementos de 1 nm.

En resumen, a partir de este nuevo modelo circuital podemos obtener resultados cercanos a los experimentales ganando una gran capacidad de cómputo. Esto abre la puerta para estudios futuros de estructuras de memoria más complejas donde podamos simular y analizar el funcionamiento de varias celdas juntas. Además, a pesar de las simplificaciones tomadas para el modelo, podemos obtener información valiosa sobre el funcionamiento interno del dispositivo como es la distribución de la temperatura a lo largo de la estructura de conducción durante todo el proceso de *reset*. Por último, este nuevo enfoque nos permite estudiar estructuras de conducción complejas en forma de árbol ramificado que son de difícil implementación en modelos macroscópicos como el usado en el simulador SIM²RRAM. Hay que destacar asimismo que el modelo, basado en SPICE, nos permite dar el salto a la simulación circuitos basados en dispositivos RRAM.

10

Conclusiones

La tecnología Flash que se usa actualmente en las memorias no volátiles está empezando a presentar problemas técnicos a la hora de reducir su tamaño por debajo de los 25 nm. Este hecho está poniendo freno a la continuidad del proceso de escalado que estas memorias ha experimentado en los últimos veinte años, vislumbrándose ya el final de su recorrido tecnológico.

Una de las principales tecnologías emergentes que presenta una potente candidatura a sustituir a las memorias Flash es la relacionada con las memorias resistivas, RRAM. Los dispositivos RRAM se caracterizan por la capacidad de variar su resistencia de una manera definida al ser sometidos a una tensión externa. Aunque existen varios mecanismos que producen este cambio de resistencia, en este trabajo nos hemos centrado en el estudio de los dispositivos que cambian de estado resistivo mediante la creación y destrucción de filamentos conductores. Para ello se ha utilizado el simulador SIM²RRAM, desarrollado como parte de este trabajo de investigación en la plataforma MATLAB.

SIM²RRAM resuelve de manera autoconsistente la ecuación del calor, la ecuación de las corrientes y la ecuación cinética de las reacciones químicas que controlan el crecimiento y decrecimiento de los filamentos conductivos. La ecuación del calor se resuelve mediante el método numérico de diferencias finitas. Por otra parte, la ecuación cinética, al ser un sistema rígido, se ha resuelto mediante el método de Runge-Kutta-Fehlberg adaptativo. De este modo el sistema se adapta a las necesidades de resolución temporal de la ecuación aumentando la exactitud de la solución, a la vez que mejora el rendimiento del simulador desde el punto de vista computacional.

Este simulador permite, por primera vez, la posibilidad de trabajar con varios CFs simultáneamente y la inclusión de otras resistencias externas a los filamentos conductores como son la resistencia de Maxwell, las resistencias de los contactos del dispositivo y la de los conductores del montaje experimental. La consideración de estas resistencias externas es de gran interés debido a que también influyen en el funcionamiento de este tipo de dispositivos.

De esta forma, con el simulador SIM²RRAM, hemos podido reproducir los resultados experimentales, tanto para procesos de *reset* como de *set*, obtenidos para las celdas RRAM tipo Cu/HfO₂/Pt y Ni/HfO₂/Si-n⁺ estudiadas en este trabajo.

También se ha desarrollado un entorno gráfico para el simulador SIM²RRAM. Esta interfaz gráfica sustituye a la interfaz de línea de comandos nativa de MATLAB, facilitando así al usuario el manejo de la aplicación. Otra de las ventajas de esta interfaz es la posibilidad de visualizar rápidamente de forma gráfica los resultados de la simulación, en función de la tensión aplicada o del tiempo del experimento. Por último, todos estos datos pueden ser exportados.

Entre los resultados obtenidos cabe destacar los siguientes:

- Los filamentos conductores que componen la estructura de conducción se destruyen durante el proceso de *reset* debido a dos mecanismos: i) difusión, térmicamente asistida, de las especies metálicas que los forman y ii) reacción química de oxidación que se produce en el CF.
- Además de considerar el papel que juegan los CFs dentro del funcionamiento de estos dispositivos, también es necesario tener en cuenta otro tipo de elementos como son las resistencias externas a la celda (resistencia de los electrodos metálicos y/o del propio dispositivo de medida) y la resistencia de Maxwell. Las resistencias externas tienen un papel relevante cuanto mayor es el grosor de los CFs ya que éstas pueden ser comparables con la resistencia de la propia estructura de conducción.
- La presencia de estas resistencias externas da como resultado un acoplamiento eléctrico entre los distintos CFs que componen la estructura de conducción de la celda. Al tener en cuenta este fenómeno el comportamiento global de la estructura de conducción dependerá del número de CFs que la forman y la relación de grosores entre ellos.
- El calentamiento de los CFs es un proceso autoacelerado en el entorno de la tensión de *reset*. Este hecho se debe a que la propia disolución del CF produce un cuello de botella en el CF donde aumenta localmente la resistencia. Este aumento de la resistencia en una región concreta del filamento produce a su vez un aumento de la temperatura local. Estos dos procesos se retroalimentan acelerando la destrucción del CF.
- Hemos estudiado dos tipos de dispositivos RRAM cuyo funcionamiento se basa en la creación y destrucción de CFs. Sin embargo, en estos dispositivos los mecanismos de transporte son diferentes, de modo que podemos estudiarlos según el comportamiento de su curva I-V de *reset*: si es lineal, como ejemplo mostramos la celda tipo Cu/HfO₂/Pt, o si presenta un comportamiento no lineal como ocurre en la celda tipo Ni/HfO₂/Si-n⁺.
- El comportamiento no lineal se debe a la existencia de dos mecanismos distintos de transporte simultáneos: i) mecanismo óhmico a través de la estructura de conducción metálica y ii) transiciones túnel a través de una barrera de potencial en la interface HfO₂/Si-n⁺. Esta barrera de potencial se ha caracterizado mediante el modelo *Quantum Point Contact* (modelo QPC).
- Asociada a estos mecanismos de conducción existen dos componentes resistivas: resistencia asociada a la conducción óhmica (R_{CF}) y la resistencia asociada a la

conducción túnel (R_{QPC}). La competencia entre las variaciones de estas dos componentes da como resultado un comportamiento cóncavo (donde predomina la variación de R_{QPC} sobre la de R_{CF}) o convexo (donde predomina la variación de R_{CF}) de la curva I-V de *reset*.

- Se ha definido en este trabajo un nuevo parámetro para caracterizar los mecanismos de transporte de estos dispositivos, al que hemos llamado Tensión Umbral del proceso de *reset* (V_{TH_RESET}). Se calcula como el máximo de la derivada de la intensidad respecto a la tensión aplicada. Este parámetro da cuenta de la tensión a la que se cambia del régimen cuántico, donde predomina la variación de R_{QPC} , al régimen óhmico donde es la variación de R_{CF} la componente que determina el comportamiento de la resistencia total del sistema.
- Se pueden distinguir tres tipos de ciclos de *reset* que podemos identificar según la forma de la correspondiente curva I-V:
 - La curva I-V de *reset* presenta una única caída abrupta de la intensidad: este tipo de ciclo se asocia con estructuras de conducción de un solo CF grueso. En el instante que el CF se rompe, debido a la difusión de las especies metálicas que lo forman, el dispositivo pasa al estado HRS y la intensidad cae bruscamente. Se ha estudiado en profundidad la dependencia de la tensión de *reset* con la forma y el tamaño de los filamentos conductores.
 - La curva I-V de *reset* presenta dos o más escalones: este caso se asocia a dispositivos con estructuras de conducción formadas por varios filamentos. Cada escalón que muestra la curva I-V es el resultado de la rotura de uno de los CFs. Al haber varios CFs conduciendo inicialmente, aunque uno de ellos se rompa los demás siguen conduciendo. No obstante, la intensidad total que circula por el dispositivo disminuirá bruscamente. Este tipo de ciclos también se denomina ciclo de *reset* progresivo por acumulación de CFs.
 - La curva I-V de *reset* presenta una caída suave de la intensidad: al igual que ocurre en el primer caso, estos dispositivos están formados por un único CF. No obstante, en esta ocasión el filamento es muy estrecho, con lo que la intensidad que circula es pequeña. Esta baja intensidad, y por consiguiente bajo calentamiento por efecto Joule, ralentiza el proceso de destrucción del CF dando lugar a una caída de la intensidad progresiva.
- Dado que la tensión de *reset* (V_{RESET}) es un parámetro que permite identificar cuándo el dispositivo ha conmutado del estado LRS al HRS, se han desarrollado cinco métodos orientados a la extracción automática de este parámetro. En este trabajo hemos propuesto dos posibles definiciones para V_{RESET} : i) tensión aplicada en el instante en el que comienza a descender la intensidad del dispositivo, es decir, cuando se inicia la destrucción del primer CF o ii) tensión a la que dicho CF se rompe. Los métodos de cálculo de V_{RESET} desarrollados permiten calcular este parámetro en el contexto de estas dos definiciones.
- Se ha demostrado que la tensión e intensidad de *reset* de las celdas RRAM tipo Ni/HfO₂/Si-n⁺ presentan una clara dependencia con la temperatura externa. No

obstante esta dependencia no tiene un único y claro origen sino que viene dada por la dependencia térmica de todos los mecanismos físicos que intervienen durante el proceso de *reset*. Es decir, la dependencia con la temperatura de las diferentes resistencias, principalmente la resistencia de los CFs y la resistencia asociada a los túneles cuánticos correspondientes al modelo QPC, y la interrelación entre ellas.

- Aunque la celda RRAM tipo Ni/HfO₂/Si-n⁺ se encuentre en el estado HRS, puede haber conducción a muy baja intensidad. Esta conducción se realiza a través de los defectos del propio óxido. Por este motivo se ha modelado utilizando la teoría de Poole-Frenkel. Este tipo de conducción se puede observar experimentalmente también al aplicar bajas tensiones durante el proceso de *set* ya que la estructura de conducción se encuentra cortada.
- Durante proceso de *set* se vuelve a reconstruir los CFs que forman la estructura de conducción, destruida en el anterior proceso de *reset*, a la vez que se generan nuevos CFs. Por esta razón estos dispositivos tienen un comportamiento tan variable a lo largo de los ciclos. Esta reconstrucción se lleva a cabo gracias a la reacción química de reducción.
- Una vez que el proceso de *set* llega a término, los CFs vuelven a conducir. Debido a que este hecho se produce a altas tensiones, el crecimiento del CF es muy rápido pudiendo llegar a ocupar la totalidad del área de la celda. Este hecho hace que el dispositivo quede permanentemente en el estado de LRS. Por este motivo, es imprescindible fijar una intensidad límite (intensidad de *compliance*) para llevar a cabo un proceso de *set* completo sin dañar la celda ya que así se limita el crecimiento del CF.

Por último, en este trabajo también se ha desarrollado un modelo compacto para el proceso de *reset*. Este nuevo enfoque tiene como objetivo poder implementar en un simulador de circuitos (SPICE en nuestro caso) un dispositivo RRAM. Para ello, se han transformado las variables físicas de los distintos mecanismos físicos en variables eléctricas como, por ejemplo, considerando los flujos de calor como corrientes.

Aunque se han realizado una serie de simplificaciones respecto al modelo general usado para el simulador SIM²RRAM, este nuevo modelo incluye los mismos procesos físicos (conducción de calor longitudinal y lateral, efecto Joule, dependencia térmica de las resistencias, etc.), excepto la corriente túnel modelada con QPC. De este modo, también se puede obtener información valiosa sobre el funcionamiento interno del dispositivo como es la distribución de la temperatura a lo largo de la estructura de conducción durante todo el proceso de *reset*.

Otra ventaja de este modelo compacto es que nos permite estudiar estructuras de conducción con forma de árbol, es decir, considerar filamentos ramificados. Dadas las características de este tipo de estructuras es complejo considerarlas en el contexto de los simuladores macroscópicos ya que se necesitaría una gran potencia de cálculo para resolver las ecuaciones diferenciales en dos dimensiones. No obstante, al ser este modelo compacto de carácter puramente eléctrico, bajo una aproximación de elementos

discretos, es fácil plantear estas estructuras sin necesidad de asumir grandes costes computacionales. El estudio de estas estructuras con forma de árbol pone de manifiesto que no sólo el número de filamentos conductores influye en la variabilidad de estos dispositivos. Además, la relación de grosores entre las distintas ramas y su configuración dentro de la estructura de conducción determinan el comportamiento de la celda durante el proceso de *reset*.

Apéndice A: Método de las diferencias finitas.

El método de las Diferencias Finitas es un método numérico que permite la resolución aproximada de ecuaciones diferenciales en derivadas parciales definidas en recintos finitos como el que se muestra en la Figura 107:

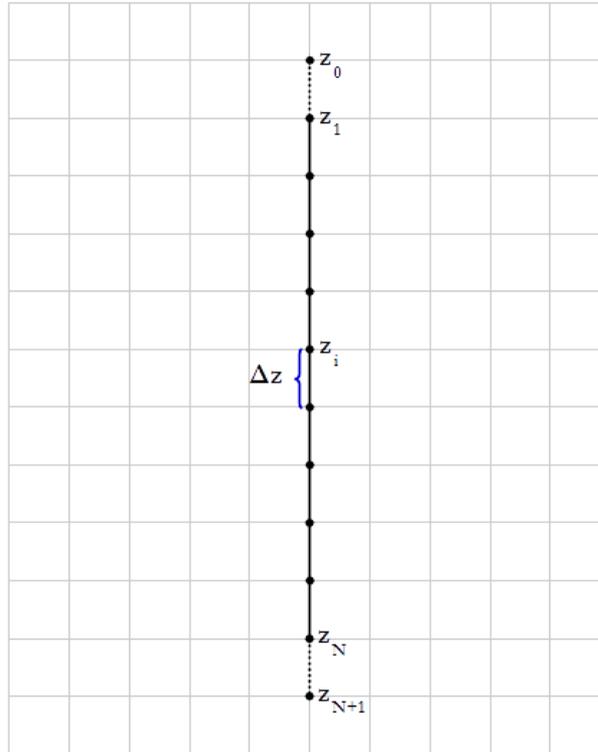


Figura 107: Línea en la que se define la función $f(z)$ con N puntos y con una separación entre ellos de Δz . Para la resolución de la ecuación del calor (Ec. (A12)), los puntos Z_0 y Z_{N+1} se corresponden con los electrodos.

Sea $f(z)$ una función definida en (z_I, z_N) que tiene hasta la k -ésima derivada no nula. De este modo, la expansión de $f(z)$ usando series de Taylor alrededor del punto z_i contenido en el intervalo (z_I, z_N) será:

$$f(z) = f(z_i) + \frac{(z - z_i)}{1!} \left. \frac{df}{dz} \right|_{z_i} + \frac{(z - z_i)^2}{2!} \left. \frac{d^2 f}{dz^2} \right|_{z_i} + \dots + \frac{(z - z_i)^k}{k!} \left. \frac{d^k f}{dz^k} \right|_{z_i}, \quad (\text{A1})$$

donde $\varepsilon = z_i + \theta(z - z_i)$ y $0 < \theta < 1$. Si aproximamos la Ec. (A1) hasta orden 2 ($k = 2$) y hacemos el siguiente cambio de variable $z = z_i + \Delta z$, tenemos

$$f(z_i + \Delta z) = f(z_i) + \Delta z \left. \frac{df}{dz} \right|_{z_i} + \frac{\Delta z^2}{2!} \left. \frac{d^2 f}{dz^2} \right|_{\varepsilon_p}. \quad (\text{A2})$$

Despejando de esta ecuación obtenemos la siguiente aproximación para la primera derivada de la función $f(z)$.

$$\left. \frac{df}{dz} \right|_{z_i} = \frac{f(z_i + \Delta z) - f(z_i)}{\Delta z} - \frac{\Delta z^2}{2!} \left. \frac{d^2 f}{dz^2} \right|_{\varepsilon_p}. \quad (\text{A3})$$

En este caso la aproximación de $f'(z)$ mediante diferencias progresivas es de primer orden, o sea $O(\Delta z)$. Siendo $O_p(\Delta z)$ el error local de truncamiento, definido como

$$O_p(\Delta z) = - \frac{\Delta z^2}{2!} \left. \frac{d^2 f}{dz^2} \right|_{\varepsilon_p}. \quad (\text{A4})$$

Por esta razón, es usual escribir la anterior expresión como

$$\left. \frac{df}{dz} \right|_{z_i} = \frac{f(z_i + \Delta z) - f(z_i)}{\Delta z} - O_p(\Delta z). \quad (\text{A5})$$

Para hacer más manejable la Ec. (A5) se suele recurrir a una notación con subíndices. En esta notación se toma la siguiente norma: $f(z_i) = f_i, f(z_i + \Delta z) = f_{i+1}, \dots, f(z_i + n \cdot \Delta z) = f_{i+n}$. De este modo, la Ec. (A5) queda:

$$f'(z_i) = \frac{f_{i+1} - f_i}{\Delta z}. \quad (\text{A6})$$

Para el cálculo de la segunda derivada de $f(z)$ se deriva la Ec. (A6), quedando así:

$$\left. \frac{d^2 f}{dz^2} \right|_{z_i} = \frac{d}{dz} \left(\left. \frac{df}{dz} \right|_{z_i} \right) = \frac{d}{dz} \left(\frac{f_{i+1} - f_i}{\Delta z} \right) = \frac{f_{i+2} - 2f_{i+1} + f_i}{\Delta z^2}. \quad (\text{A7})$$

Por simplicidad se suele redefinir los subíndices para centrar el paso de la derivada en z_i , quedando finalmente:

$$f''(z_i) = \frac{f_{i+1} - 2f_i + f_{i-1}}{\Delta z^2}. \quad (\text{A8})$$

El bloque térmico del simulador SIM²RRAM es el encargado de resolver la ecuación del calor (Ec. (2)), que mostramos a continuación, mediante este método numérico:

$$\sigma_{CF}(z) \xi(z)^2 - \frac{2h}{r_{CF}(z)} [T_{CF}(z) - T_{ox}] = -k_{th} \frac{\partial^2 T_{CF}(z)}{\partial z^2}. \quad (\text{A9})$$

Si sustituimos en esta ecuación la definición de segunda derivada dada en la Ec. (A8) y usamos la notación con subíndices nos queda:

$$\sigma_i \xi_i^2 - \frac{2h}{r_i} [T_i - T_{ox}] = -k_{th} \frac{T_{i+1} - 2T_i + T_{i-1}}{\Delta z^2}, \quad (\text{A10})$$

siendo $i = 1, 2, \dots, N$, donde N se corresponde con el número de puntos en los que hemos dividido cada CF (ver Figura 107). Reorganizamos ahora los términos de la Ec. (A10).

$$k_{th} T_{i-1} - 2 \left(k_{th} + \Delta z^2 \frac{h}{r_i} \right) T_i + k_{th} T_{i+1} = -\Delta z^2 \left(\sigma_i \xi_i^2 + 2 \frac{h}{r_i} T_{ox} \right). \quad (\text{A11})$$

Ahora debemos resolver la Ec. (A11) que es un sistema de ecuaciones con N incógnitas (T_i) y N ecuaciones. Para simplificar la descripción de este sistema cambiamos la notación.

$$D^d T_{i-1} + D_i T_i + D^u T_{i+1} = B_i \quad \text{siendo } i = 1, 2, \dots, N, \quad (\text{A12})$$

donde, por comparación con la Ec. (A11), los términos D^d , D^u , D_i y B_i son:

$$D^d = D^u = k_{th}, \quad (\text{A13})$$

$$D_i = -2 \left(k_{th} + h^2 \frac{\Delta z}{r_i} \right), \quad (\text{A14})$$

$$B_i = -h^2 \left(\sigma_i \xi_i^2 + 2 \frac{\Delta z}{r_i} T_{ox} \right). \quad (\text{A15})$$

La ventaja de escribir la ecuación del calor de esta forma (Ec. (A12)), es que hemos convertido el sistema de ecuaciones en un sistema trigonal; es decir, en un sistema donde todos los elementos de la matriz de coeficientes son cero excepto la diagonal principal y sus dos diagonales vecinas (superior e inferior) como muestra la Ec. (A16). Esto simplifica en gran medida la resolución del sistema de ecuaciones. Además, nos permite trabajar directamente con matrices (Ec. (A16)) para lo cual MATLAB está optimizado.

$$\begin{pmatrix} D_1 & D^u & 0 & \cdots & 0 \\ D^d & D_2 & D^u & \cdots & 0 \\ 0 & D^d & D_3 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & D^u \\ 0 & 0 & 0 & D^d & D_N \end{pmatrix} \begin{pmatrix} T_1 \\ T_2 \\ \vdots \\ \vdots \\ T_N \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} B_1 - D^d T_0 \\ B_2 \\ \vdots \\ B_{N-1} \\ B_N - D^u T_{N+1} \end{pmatrix}. \quad (\text{A16})$$

Los valores T_0 y T_{N+1} se corresponden con los valores de la temperatura en los contactos metálicos.

Apéndice B: Método de Runge-Kutta-Fehlberg adaptativo.

Los métodos de Runge-Kutta son un conjunto de métodos iterativos, explícitos e implícitos, de resolución numérica de ecuaciones diferenciales. En 1970 Erwin Fehlberg, basándose en el método de Runge-Kutta, desarrolló un nuevo método de resolución de ecuaciones diferenciales que permitía estimar la longitud del paso usado (en el grid de resolución) para resolución de la ecuación. A este método se le denomina método de Runge-Kutta- Fehlberg adaptativo (RKF_a).

Comenzamos con el desarrollo en serie de Taylor de $x(t + h)$:

$$x(t + h) = x(t) + h \frac{dx}{dt} + \frac{h^2}{2!} \frac{d^2x}{dt^2} + \dots + \frac{h^k}{k!} \frac{d^kx}{dt^k}. \quad (\text{B1})$$

Por simplicidad en la notación definimos las derivadas que aparecen en la Ec. (B1) de la siguiente manera:

$$\begin{aligned} \frac{dx}{dt} &= f \\ \frac{d^2x}{dt^2} &= f_t + f_x \frac{dx}{dt} = f_t + f_x f \\ \frac{d^3x}{dt^3} &= f_{tt} + f_{tx}f + (f_t + f_x f)f_x + f(f_{xt} + f_{xx}f) \\ &\vdots \end{aligned} \quad (\text{B2})$$

En este caso, los subíndices denotan derivadas parciales y se ha utilizado respectivamente la regla de la cadena para las derivadas. Los primeros tres términos de la Ec. (B1) se pueden escribir ahora como:

$$x(t + h) = x + hf + \frac{h^2}{2} (f_t + f_x f) + O(h^3), \quad (\text{B3})$$

donde x significa $x(t)$ y f representa $f(t, x)$, etc. Podemos redefinir también las derivadas parciales reduciendo a los primeros términos de la serie de Taylor de dos variables mediante el siguiente cambio de notación

$$f(t + h, x + hf) = f + hf f_x + O(h^2) \quad (\text{B4})$$

De este modo, la Ec. (B3) se puede escribir finalmente como:

$$x(t + h) = x + \frac{1}{2}hf + \frac{1}{2}hf(t + h, x + hf) + O(h^3). \quad (\text{B5})$$

Por consiguiente la expresión para efectuar un avance de la solución es:

$$x(t + h) = x(t) + \frac{h}{2}f(t, x) + \frac{h}{2}f(t + h, x + hf(t, x)) + O(h^3), \quad (\text{B6})$$

o su equivalente:

$$x(t + h) = x(t) + \frac{1}{2}(F_1 + F_2), \quad (\text{B7})$$

donde

$$\begin{aligned} F_1 &= hf(t, x) \\ F_2 &= hf(t + h, x + F_1). \end{aligned} \quad (\text{B8})$$

Las Ecs. (B7) y (B8) es lo que se conoce como método de Runge-Kutta de segundo orden o método de Heun. Este método se puede obtener para distintos órdenes según el

número de términos del desarrollo en serie de Taylor que se considere para obtener la Ec. (B3).

El **método de Runge-Kutta-Fehlberg (RKFa)** se basa en el método de Runge-Kutta descrito anteriormente de quinto orden usando la expresión de cuarto orden para cuantificar el error por truncamiento que se comete. Es decir, este método calcula la solución de orden cuarto y quinto, comparándolas posteriormente para obtener el error (ver Ec. (B12)). La ventaja de conocer el error que se comete en cada evolución es que se puede adaptar el paso temporal h usado en cada cálculo de manera que el error se mantenga siempre dentro de unas cotas fijadas previamente.

De esta forma, el conjunto de ecuaciones que se debe resolver ahora es:

$$\text{Aprox. 5}^\circ \text{ orden} \Rightarrow x(t+h) = x(t) + \sum_{i=1}^6 a_i F_i \quad (\text{B9})$$

$$\text{Aprox. 4}^\circ \text{ orden} \Rightarrow \bar{x}(t+h) = x(t) + \sum_{i=1}^6 b_i F_i, \quad (\text{B10})$$

Donde las F_i se calculan según:

$$F_i = hf \left(t + c_i h, x + \sum_{j=1}^{i-1} d_{ij} F_j \right), \quad (\text{B11})$$

siendo a_i , b_i , c_i y d_{ij} constantes propias del método (ver Tabla B1). Dado que la Ec. (B9) es la de mayor precisión, se utiliza para calcular el valor de salida del algoritmo.

La diferencia entre las Ecc. (B9) y (B10) se puede interpretar como una estimación del error de truncamiento local que resulta de la menor precisión de la aproximación de 4° orden.

$$e = x(t+h) - \bar{x}(t+h) = \sum_{i=1}^6 (a_i - b_i) F_i. \quad (\text{B12})$$

Como se ha comentado anteriormente, este error se puede usar para controlar la longitud del paso. Para ello se define una cota máxima de error permitido δ . Si el valor absoluto del error local e supera esta cota, se volvería a repetir el cálculo de $x(t + h)$ (Ecc. (B9) y (B19)) adecuando la longitud del paso temporal. Para adaptar el paso temporal es habitual usar la siguiente expresión:

$$h' = 0.9 \left(\frac{\delta}{|e|} \right)^{1/6} h. \quad (\text{B13})$$

El método de RKFa parece un método muy costoso computacionalmente ya que hay que resolver la ecuación dos veces (Ecc. (B9) y (B10)) y posteriormente calcular el error cometido mediante la Ec. (B12). Sin embargo, Fehlberg fue capaz de elegir los parámetros de éste método de manera que podemos obtener las soluciones para los dos órdenes de aproximación utilizando los mismos puntos para evaluar la función. Dicho de otro modo, podemos resolver las Ecc. (B9) y (B10) a la vez ya que sus correspondientes F_i son iguales, siendo necesario únicamente variar los coeficientes de las sumatorias. En la Tabla B1 se muestran los coeficientes usados en las Ecc. (B9 - 12):

i	c_i	a_i	$a_i - b_i$	d_{ij}				
1	0	$\frac{16}{135}$	$\frac{1}{360}$					
2	$\frac{1}{4}$	0	0	$\frac{1}{4}$				
3	$\frac{3}{8}$	$\frac{6656}{12825}$	$-\frac{128}{4275}$	$\frac{3}{32}$	$\frac{9}{32}$			
4	$\frac{12}{13}$	$\frac{28561}{56430}$	$-\frac{2197}{75240}$	$\frac{1932}{2197}$	$-\frac{7200}{2197}$	$\frac{7296}{2197}$		
5	1	$-\frac{9}{50}$	$\frac{1}{50}$	$\frac{439}{216}$	-8	$\frac{3680}{513}$	$-\frac{845}{4104}$	
6	$\frac{1}{2}$	$\frac{2}{55}$	$\frac{2}{55}$	$-\frac{8}{27}$	2	$-\frac{3544}{2565}$	$\frac{1859}{4104}$	$-\frac{11}{40}$
			j	1	2	3	4	5

Tabla B1: Parámetros de las Ecc. (B9 – B12) del método de RKFa.

Bibliografía

- [1] Ielmini, D. (2009). “Reliability issues and modeling of flash and post-flash memory”. *Microelectronic Engineering*, 86(7), 1870-1875.
- [2] Lee, J. D., Hur, S. H., and Choi, J. D. (2002). “Effects of floating-gate interference on NAND flash memory cell operation”. *Electron Device Letters, IEEE*, 23(5), 264-266.
- [3] Atwood, G. (2004). “Future directions and challenges for ETox flash memory scaling”. *Device and Materials Reliability, IEEE Transactions on*, 4(3), 301-305.
- [4] Hutchby, J., and Garner, M. (2010). “Assessment of the Potential and Maturity of Selected Emerging Research Memory Technologies Workshop and ERD/ERM Working Group Meeting”. *International Technology Roadmap for Semiconductors*. Disponible en:
<http://www.itrs.net/Links/2010ITRS/2010Update/ToPost/ERD_ERM_2010FINALReportMemoryAssessment_ITRS.pdf>
- [5] Liu, T. Y., Yan, T. H., Scheuerlein, R., Chen, Y., Lee, J. K., Balakrishnan, G., ... and Fasoli, L. (2014). “A 130.7-mm² 2-Layer 32-Gb ReRAM Memory Device in 24-nm Technology”. *Solid-State Circuits, IEEE Journal of*, 49(1), 140-153.
- [6] Villena, M. A., Jimenez-Molinos, F., Roldán, J. B., Suñé, J., Long, S., Lian, X., ... and Liu, M. (2013). “An in-depth simulation study of thermal reset transitions in resistive switching memories”. *Journal of Applied Physics*, 114(14), 144505.
- [7] Villena, M. A., González, M. B., Jiménez-Molinos, F., Campabadal, F., Roldán, J. B., Suñé, J., ... and Miranda, E. (2014). “Simulation of thermal reset transitions in resistive switching memories including quantum effects”. *Journal of Applied Physics*, 115(21), 214504.
- [8] Villena, M. A., González, M. B., Roldán, J. B., Campabadal, F., Jiménez-Molinos, F., Gómez-Campos, F. M., and Suñé, J. (2015). “An in-depth study of thermal effects in reset transitions in HfO₂ based RRAMs”. *Solid-State Electronics*, 111, 47-51.
- [9] Jimenez-Molinos, F., Villena, M., Roldan, J. B., and Roldan, A. M. (2015). “A SPICE Compact Model for Unipolar RRAM Reset Process Analysis”. *Electron Devices, IEEE Transactions on*, 62(3), 955-962.
- [10] Chua, L. (2011). “Resistance switching memories are memristors”. *Applied Physics A*, 102(4), 765-783.
- [11] IHS iSuppli Research, January 2013 <<https://technology.ihs.com>>
- [12] Gartner, Inc. <<http://www.gartner.com/technology/home.jsp>>

- [13] “*International technology roadmap for semiconductor: Emerging Research Devices*”. Ed. 2011 Disponible en:
<<http://www.itrs.net/Links/2011ITRS/2011Chapters/2011ERD.pdf>>
- [14] Imagen obtenida de: <<http://noticiastech.com/14/?p=31134>>
- [15] Masuoka, F., Asano, M., Iwahashi, H., Komuro, T., and Tanaka, S. (1984). “A new flash E²PROM cell using triple polysilicon technology”. In *Electron Devices Meeting, 1984 International* (Vol. 30, pp. 464-467). IEEE.
- [16] Frohman-Bentchkowsky, D. (1971). “Memory behavior in a floating-gate avalanche-injection MOS (FAMOS) structure”. *Applied Physics Letters*, 18(8), 332-334.
- [17] Frohman-Bentchkowsky, D. (1974). “FAMOS - A new semiconductor charge storage device”. *Solid-State Electronics*, 17(6), 517-529.
- [18] Bez, R., Camerlenghi, E., Modelli, A., and Visconti, A. (2003). “Introduction to flash memory”. *Proceedings of the IEEE*, 91(4), 489-502.
- [19] Mukherjee, S., Chang, T., Pang, R., Knecht, M., and Hu, D. (1985). “A single transistor EEPROM cell and its implementation in a 512K CMOS EEPROM”. In *Electron Devices Meeting, 1985 International* (Vol. 31, pp. 616-619). IEEE.
- [20] Lenzlinger, M., and Snow, E. H. (1969). “Fowler-Nordheim Tunneling into Thermally Grown SiO₂”. *Journal of Applied physics*, 40(1), 278-283.
- [21] Horiguchi, S., Kobayashi, T., and Saito, K. (1985). “Interface-trap generation modeling of Fowler–Nordheim tunnel injection into ultrathin gate oxide”. *Journal of Applied Physics*, 58(1), 387-391.
- [22] Aritome, S., Shirota, R., Hemink, G., Endoh, T., and Masuoka, F. (1993). “Reliability issues of flash memory cells”. *Proceedings of the IEEE*, 81(5), 776-788.
- [23] Yang, M-T. “Method of making single bit erase flash EEPROM”. *U.S. Patent No. 5,429,971*. 4 Jul. 1995.
- [24] Chi, M. H. (2000). “Method for forming flash memory of ETOX-cell programmed by band-to-band tunneling induced substrate hot electron and read by gate induced drain leakage current”. *U.S. Patent No. 6,143,607*. Washington, DC: U.S. Patent and Trademark Office.
- [25] “*International technology roadmap for semiconductor: Emerging Research Devices*”. Ed. 2013 Disponible en:
<<http://www.itrs.net/Links/2013ITRS/2013Chapters/2013ERD.pdf>>
- [26] Ma, T. P., and Han, J. P. (2000). “Ferroelectric dynamic random access memory”. *U.S. Patent No. 6,067,244*. Washington, DC: U.S. Patent and Trademark Office.

-
- [27] Horiuchi, S., and Tokura, Y. (2008). "Organic ferroelectrics". *Nature materials*, 7(5), 357-366.
- [28] Ma, T. P., and Han, J. P. (2002). "Why is nonvolatile ferroelectric memory field-effect transistor still elusive?". *Electron Device Letters, IEEE*, 23(7), 386-388.
- [29] Zhuravlev, M. Y., Sabirianov, R. F., Jaswal, S. S., and Tsymbal, E. Y. (2005). "Giant electroresistance in ferroelectric tunnel junctions". *Physical Review Letters*, 94(24), 246802.
- [30] Kohlstedt, H., Pertsev, N. A., Contreras, J. R., and Waser, R. (2005). "Theoretical current-voltage characteristics of ferroelectric tunnel junctions". *Physical Review B*, 72(12), 125341.
- [31] Zhuravlev, M. Y., Wang, Y., Maekawa, S., and Tsymbal, E. Y. (2009). "Tunneling electroresistance in ferroelectric tunnel junctions with a composite barrier". *Applied Physics Letters*, 95(5), 052902.
- [32] Mott, N. F. (1990) "Metal-Insulator Transitions (2^a ed.)". *Taylor and Francis*.
- [33] Asamitsu, A., Tomioka, Y., Kuwahara, H., and Tokura, Y. (1997). "Current switching of resistive states in magnetoresistive manganites". *Nature*, 388(6637), 50-52.
- [34] Pickett, M. D., and Williams, R. S. (2012). "Sub-100 fJ and sub-nanosecond thermally driven threshold switching in niobium oxide crosspoint nanodevices". *Nanotechnology*, 23(21), 215202.
- [35] Pickett, M. D., Medeiros-Ribeiro, G., and Williams, R. S. (2013). "A scalable neuristor built with Mott memristors". *Nature materials*, 12(2), 114-117.
- [36] Kreupl, F., Bruchhaus, R., Majewski, P., Philipp, J. B., Symanczyk, R., Happ, T., ... and Kund, M. (2008). "Carbon based resistive memory". *IEDM Tech. Dig.* pp. 521-524
- [37] Chai, Y., Wu, Y., Takei, K., Chen, H. Y., Yu, S., Chan, P. C., ... and Wong, H. S. (2011). "Nanoscale bipolar and complementary resistive switching memory based on amorphous carbon". *Electron Devices, IEEE Transactions on*, 58(11), 3933-3939.
- [38] Qin, S., Zhang, J., Fu, D., Xie, D., Wang, Y., Qian, H., ... and Yu, Z. (2012). "A physics/circuit-based switching model for carbon-based resistive memory with sp^2/sp^3 cluster conversion". *Nanoscale*, 4(20), 6658-6663.
- [39] Liu, S. H., Yang, W. L., Wu, C. C., Chao, T. S., Ye, M. R., Su, Y. Y., ... and Tsai, M. J. (2013). "High-Performance Polyimide-Based ReRAM for Nonvolatile Memory Application". *Electron Device Letters, IEEE*, 34(1), 123-125.
- [40] Bai, W., Huang, R., Cai, Y., Tang, Y., Zhang, X., and Wang, Y. (2013). "Record low-power organic RRAM with sub-20-nA reset current". *Electron Device Letters, IEEE*, 34(2), 223-225.

- [41] Siebeneicher, P., Kleemann, H., Leo, K., and Lüssem, B. (2012). “Non-volatile organic memory devices comprising SiO₂ and C₆₀ showing 10⁴ switching cycles”. *Applied Physics Letters*, 100(19), 193301.
- [42] Song, H., Reed, M. A., and Lee, T. (2011). “Single molecule electronic devices”. *Advanced Materials*, 23(14), 1583-1608.
- [43] Reed, M. A., Chen, J., Rawlett, A. M., Price, D. W., and Tour, J. M. (2001). “Molecular random access memory cell”. *Applied physics letters*, 78(23), 3735-3737.
- [44] Tour, J. M., Cheng, L., Nackashi, D. P., Yao, Y., Flatt, A. K., St. Angelo, S. K., ... and Franzon, P. D. (2003). “Nanocell electronic memories”. *Journal of the American Chemical Society*, 125(43), 13279-13283.
- [45] Imagen perteneciente a Crossbar Inc. Obtenida de la web: <<https://www.crossbar-inc.com/assets/img/media/Crossbar-RRAM-Technology-080113.png>>
- [46] Información obtenida de la web: <<https://www.crossbar-inc.com/assets/img/media/Crossbar-RRAM-Technology-Whitepaper-080413.pdf>>
- [47] Wong, H. S., Lee, H. Y., Yu, S., Chen, Y. S., Wu, Y., Chen, P. S., ... and Tsai, M. J. (2012). “Metal-oxide RRAM”. *Proceedings of the IEEE*, 100(6), 1951-1970.
- [48] Baek, I. G., Kim, D. C., Lee, M. J., Kim, H. J., Yim, E. K., Lee, M. S., ... and Ryu, B. I. (2005). “Multi-layer cross-point binary oxide resistive memory (OxRRAM) for post-NAND storage application”. In *Electron Devices Meeting, 2005. IEDM Technical Digest. IEEE International* (pp. 750-753). IEEE.
- [49] Pan, F., Gao, S., Chen, C., Song, C., and Zeng, F. (2014). “Recent progress in resistive random access memories: materials, switching mechanisms, and performance”. *Materials Science and Engineering: R: Reports*, 83, 1-59.
- [50] Otsuka, W., Miyata, K., Kitagawa, M., Tsutsui, K., Tsushima, T., Yoshihara, H., ... and Ogata, K. (2011). “A 4Mb conductive-bridge resistive memory with 2.3 Gb/s read-throughput and 216MB/s program-throughput”. In *Solid-State Circuits Conference Digest of Technical Papers (ISSCC), 2011 IEEE International* (pp. 210-211). IEEE.
- [51] Gilbert, N., Zhang, Y., Dinh, J., Calhoun, B., and Hollmer, S. (2013). “A 0.6 V 8 pJ/write non-volatile CBRAM macro embedded in a body sensor node for ultra low energy applications”. In *Symp. VLSI Tech. Dig* (p. C204).
- [52] Waser, R., Dittmann, R., Staikov, G., and Szot, K. (2009). “Redox-based resistive switching memories—nanoionic mechanisms, prospects, and challenges”. *Advanced Materials*, 21(25-26), 2632-2663.

-
- [53] Goux, L., Lisoni, J. G., Jurczak, M., Wouters, D. J., Courtade, L., and Muller, C. (2010). "Coexistence of the bipolar and unipolar resistive-switching modes in NiO cells made by thermal oxidation of Ni layers". *Journal of Applied Physics*, 107(2), 024512.
- [54] Jeong, D. S., Schroeder, H., and Waser, R. (2007). "Coexistence of bipolar and unipolar resistive switching behaviors in a Pt/TiO₂/Pt stack". *Electrochemical and solid-state letters*, 10(8), G51-G53.
- [55] Sawa, A., Fujii, T., Kawasaki, M., and Tokura, Y. (2004). "Hysteretic current-voltage characteristics and resistance switching at a rectifying Ti/Pr_{0.7}Ca_{0.3}MnO₃ interface". *Applied Physics Letters*, 85(18), 4073-4075.
- [56] Cagli, C., Buckley, J., Jousseau, V., Cabout, T., Salaun, A., Grampeix, H., ... and De Salvo, B. (2011). "Experimental and theoretical study of electrode effects in HfO₂ based RRAM". In *Electron Devices Meeting (IEDM), 2011 IEEE International* (pp. 28-7). IEEE.
- [57] Yu, S., Guan, X., and Wong, H. S. (2011). "On the stochastic nature of resistive switching in metal oxide RRAM: Physical modeling, Monte Carlo simulation, and experimental characterization". In *Electron Devices Meeting (IEDM), 2011 IEEE International* (pp. 17-3). IEEE.
- [58] Chae, S. C., Lee, J. S., Kim, S., Lee, S. B., Chang, S. H., Liu, C., ... and Noh, T. W. (2008). "Random circuit breaker network model for unipolar resistance switching". *Advanced materials*, 20(6), 1154-1159.
- [59] Nardi, F., Balatti, S., Larentis, S., and Ielmini, D. (2011). "Complementary switching in metal oxides: Toward diode-less crossbar RRAMs". In *Electron Devices Meeting (IEDM), 2011 IEEE International* (pp. 31-1). IEEE.
- [60] Nardi, F., Larentis, S., Balatti, S., Gilmer, D. C., and Ielmini, D. (2012). "Resistive switching by voltage-driven ion migration in bipolar RRAM - Part I: Experimental study". *Electron Devices, IEEE Transactions on*, 59(9), 2461-2467.
- [61] Nardi, F., Balatti, S., Larentis, S., Gilmer, D. C., and Ielmini, D. (2013). "Complementary switching in oxide-based bipolar resistive-switching random memory". *Electron Devices, IEEE Transactions on*, 60(1), 70-77.
- [62] Mehonic, A., Cuff, S., Wojdak, M., Hudziak, S., Jambois, O., Labbé, C., ... and Kenyon, A. J. (2012). "Resistive switching in silicon suboxide films". *Journal of Applied Physics*, 111(7), 074507.
- [63] Bocquet, M., Deleruyelle, D., Muller, C., and Portal, J. M. (2011). "Self-consistent physical modeling of set/reset operations in unipolar resistive-switching memories". *Applied Physics Letters*, 98(26), 263507.

- [64] Russo, U., Ielmini, D., Cagli, C., and Lacaíta, A. L. (2009). "Self-accelerated thermal dissolution model for reset programming in unipolar resistive-switching memory (RRAM) devices". *Electron Devices, IEEE Transactions on*, 56(2), 193-200.
- [65] Strukov, D. B., Snider, G. S., Stewart, D. R., and Williams, R. S. (2008). "The missing memristor found". *Nature*, 453(7191), 80-83.
- [66] Bocquet, M., Deleruyelle, D., Aziza, H., Muller, C., and Portal, J. M. (2013). "Compact modeling solutions for OxRAM memories". In *Faible Tension Faible Consommation (FTFC), 2013 IEEE* (pp. 1-4). IEEE.
- [67] Bocquet, M., Deleruyelle, D., Aziza, H., Muller, C., Portal, J. M., Cabout, T., and Jalaguier, E. (2014). "Robust compact model for bipolar oxide-based resistive switching memories". *Electron Devices, IEEE Transactions on*, 61(3), 674-681.
- [68] Larcher, L., Puglisi, F. M., Pavan, P., Padovani, A., Vandelli, L., and Bersuker, G. (2014). "A Compact Model of Program Window in HfO_x RRAM Devices for Conductive Filament Characteristics Analysis". *Electron Devices, IEEE Transactions on*, 61(8), pp.2668-2673
- [69] Chen, B., Jun, Q. Y., Gao, B., Zhang, F. F., Wei, K. L., Chen, Y. S., ... and Han, R. Q. (2010). "A compact model of resistive switching devices". In *IEEE International Conference on Solid-State and Integrated Circuit Technology (ICSICT)* (p. 1829).
- [70] Joglekar, Y. N., and Wolf, S. J. (2009). "The elusive memristor: properties of basic electrical circuits". *European Journal of Physics*, 30(4), 661.
- [71] Fang, X., Yang, X., Wu, J., and Yi, X. (2013). "A Compact SPICE Model of Unipolar Memristive Devices". *Nanotechnology, IEEE Transactions on*, 12(5), 843-850.
- [72] Hsu, K. H., Ding, W. W., and Chiang, M. H. (2013). "A compact SPICE model for bipolar resistive switching memory". In *Electron Devices and Solid-State Circuits (EDSSC), 2013 IEEE International Conference of* (pp. 1-2). IEEE.
- [73] Guan, X., Yu, S., and Wong, H. S. (2012). "A SPICE compact model of metal oxide resistive switching memory with variations". *IEEE electron device letters*, 33(10), 1405-1407.
- [74] Sheridan, P., Kim, K. H., Gaba, S., Chang, T., Chen, L., and Lu, W. (2011). "Device and SPICE modeling of RRAM devices". *Nanoscale*, 3(9), 3833-3840.
- [75] Blasco, J., Ghenzi, N., Suñé, J., Levy, P., and Miranda, E. (2015). "Equivalent circuit modeling of the bistable conduction characteristics in electroformed thin dielectric films". *Microelectronics Reliability*, 55(1), 1-14.

-
- [76] Rák, Á., and Cserey, G. (2010). "Macromodeling of the memristor in SPICE". *Computer-aided design of integrated circuits and systems, IEEE Transactions on*, 29(4), 632-636.
- [77] Shin, S., Kim, K., and Kang, S. (2010). "Compact models for memristors based on charge-flux constitutive relationships". *Computer-Aided Design of Integrated Circuits and Systems, IEEE Transactions on*, 29(4), 590-598.
- [78] Strachan, J. P., Torrezan, A. C., Miao, F., Pickett, M. D., Yang, J. J., Yi, W., ... and Williams, R. S. (2013). "State dynamics and modeling of tantalum oxide memristors". *Electron Devices, IEEE Transactions on*, 60(7), 2194-2202.
- [79] Yun, J. B., Kim, S., Seo, S., Lee, M. J., Kim, D. C., Ahn, S. E., ... and Shin, H. (2007). "Random and localized resistive switching observation in Pt/NiO/Pt". *Physica status solidi (RRL)-Rapid Research Letters*, 1(6), 280-282.
- [80] Wu, X., Cha, D., Bosman, M., Raghavan, N., Migas, D. B., Borisenko, V. E., ... and Pey, K. L. (2013). "Intrinsic nanofilamentation in resistive switching". *Journal of Applied Physics*, 113(11), 114503.
- [81] Long, S., Lian, X., Ye, T., Cagli, C., Perniola, L., Miranda, E., ... and Sune, J. (2013). "Cycle-to-Cycle Intrinsic RESET Statistics in-Based Unipolar RRAM Devices". *Electron Device Letters, IEEE*, 34(5), 623-625.
- [82] Long, S., Perniola, L., Cagli, C., Buckley, J., Lian, X., Miranda, E., ... and Suñé, J. (2013). "Voltage and power-controlled regimes in the progressive unipolar RESET transition of HfO₂-based RRAM". *Scientific reports*, 3.
- [83] Kang, J. F., Gao, B., Chen, B., Liu, L. F., Liu, X. Y., Yu, H. Y., ... and Yu, B. (2012). "Oxide-based RRAM: a novel defect-engineering-based implementation for multilevel data storage". In *Memory Workshop (IMW), 2012 4th IEEE International* (pp. 1-4). IEEE.
- [84] Bersuker, G., Gilmer, D. C., Veksler, D., Yum, J., Park, H., Lian, S., ... and Jammy, R. (2010). "Metal oxide RRAM switching mechanism based on conductive filament microscopic properties". In *International Electron Device Meeting* (pp. 19-6). IEEE.
- [85] Chen, Y. Y., Goux, L., Clima, S., Govoreanu, B., Degraeve, R., Kar, G. S., ... and Jurczak, M. (2013). "Endurance/Retention trade-off on cap 1T1R bipolar RRAM". *Electron Devices, IEEE Transactions on*, 60(3), 1114-1121.
- [86] Padovani, A., Larcher, L., Padovani, P., Cagli, C., and De Salvo, B. (2012). "Understanding the role of the Ti metal electrode on the forming of HfO₂-based RRAMs". In *Memory Workshop (IMW), 2012 4th IEEE International* (pp. 1-4). IEEE.
- [87] Rao, R., Lorenzi, P., Ghidini, G., Palma, F., and Irrera, F. (2010). "Electron-Related Phenomena at the TaN/Al₂O₃ Interface". *Electron Devices, IEEE Transactions on*, 57(3), 637-643.

- [88] Rao, R., and Irrera, F. (2013). “Electrical instability in LaLuO₃ based metal–oxide–semiconductor capacitors and role of the metal electrodes”. *Journal of Vacuum Science and Technology B*, 31(1), 01A116.
- [89] Paskaleva, A., Ľapajna, M., Dobročka, E., Hušeková, K., Atanassova, E., and Fröhlich, K. (2011). “Structural and dielectric properties of Ru-based gate/Hf-doped Ta₂O₅ stacks”. *Applied Surface Science*, 257(17), 7876-7880.
- [90] Chen, A. (2014). “Area and thickness scaling of forming voltage of resistive switching memories”. *Electron Device Letters, IEEE*, 35(1), 57-59.
- [91] Russo, U., Ielmini, D., Cagli, C., and Lacaíta, A. L. (2009). “Filament conduction and reset mechanism in NiO-based resistive-switching memory (RRAM) devices”. *Electron Devices, IEEE Transactions on*, 56(2), 186-192.
- [92] Gonzalez, M., Rafi, J., Beldarrain, O., Zabala, M., and Campabadal, F. (2014). “Analysis of the Switching Variability in Ni/HfO₂-based RRAM Devices”. *Device and Material Reliability, IEEE Transactions on*, 14(2), 769-771
- [93] Prócel, L. M., Trojman, L., Moreno, J., Crupi, F., Maccaronio, V., Degraeve, R., ... and Simoen, E. (2013). “Experimental evidence of the quantum point contact theory in the conduction mechanism of bipolar HfO₂-based resistive random access memories”. *Journal of Applied Physics*, 114(7), 074509.
- [94] Lanza, M. (2014). “A review on resistive switching in high-k dielectrics: A nanoscale point of view using conductive atomic force microscope”. *Materials*, 7(3), 2155-2182.
- [95] Sun, J., Wu, X., Liu, Q., Liu, M., and Sun, L. T. (2013). “Real time observation of nanoscale multiple conductive filaments in RRAM by using advanced in-situ TEM”. In *Physical and Failure Analysis of Integrated Circuits (IPFA), 2013 20th IEEE International Symposium on the* (pp. 560-562). IEEE.
- [96] Kwon, D. H., Kim, K. M., Jang, J. H., Jeon, J. M., Lee, M. H., Kim, G. H., ... and Hwang, C. S. (2010). “Atomic structure of conducting nanofilaments in TiO₂ resistive switching memory”. *Nature nanotechnology*, 5(2), 148-153.
- [97] Timsit, R. S. (1999). “Electrical contact resistance: properties of stationary interfaces”. *Components and Packaging Technologies, IEEE Transactions on*, 22(1), 85-98.
- [98] Mikrajuddin, A., Shi, F. G., Kim, H. K., and Okuyama, K. (1999). “Size-dependent electrical constriction resistance for contacts of arbitrary size: from Sharvin to Holm limits”. *Materials Science in Semiconductor Processing*, 2(4), 321-327.
- [99] Norberg, G., Dejanovic, S., and Hesselbom, H. (2006). “Contact resistance of thin metal film contacts”. *Components and Packaging Technologies, IEEE Transactions on*, 29(2), 371-378.

-
- [100] Ielmini, D., Nardi, F., and Cagli, C. (2011). "Physical models of size-dependent nanofilament formation and rupture in NiO resistive switching memories". *Nanotechnology*, 22(25), 254022.
- [101] Dearnaley, G., Stoneham, A. M., and Morgan, D. V. (1970). "Electrical phenomena in amorphous oxide films". *Reports on Progress in Physics*, 33(3), 1129.
- [102] Bard, A. J., and Faulkner, L. R. (1980). "Electrochemical Methods: Fundamentals and Applications". *New York: Wiley*.
- [103] Maestro, M., Martin-Martinez, J., Diaz, J., Crespo-Yepes, A., Gonzalez, M. B., Rodriguez, R., ... and Aymerich, X. (2015). "Analysis of Set and Reset mechanisms in Ni/HfO₂-based RRAM with fast ramped voltages". *Microelectronic Engineering*, 147, 176-179.
- [104] Miranda, E., and Sune, J. (2001). "Analytic modeling of leakage current through multiple breakdown paths in SiO₂ films". In *Reliability Physics Symposium, 2001. Proceedings. 39th Annual. 2001 IEEE International* (pp. 367-379). IEEE.
- [105] Miranda, E. A., Walczyk, C., Wenger, C., and Schroeder, T. (2010). "Model for the Resistive Switching Effect in HfO₂ MIM Structures Based on the Transmission Properties of Narrow Constrictions". *Electron Device Letters, IEEE*, 31(6), 609-611.
- [106] Lian, X., Long, S., Cagli, C., Buckley, J., Miranda, E., Liu, M., and Suñé, J. (2012). "Quantum point contact model of filamentary conduction in resistive switching memories". In *Ultimate Integration on Silicon (ULIS), 2012 13th International Conference on* (pp. 101-104). IEEE.
- [107] Zheng, Y., Troadec, C., Wee, A. T., Pey, K. L., O'Shea, S. J., and Chandrasekhar, N. (2007). "BEEM studies on metal high K-dielectric HfO₂ interfaces". In *Journal of Physics: Conference Series*, 61(1), 1347. IOP Publishing.
- [108] Ben-Israel, A. (1966). "A Newton-Raphson method for the solution of systems of equations." *Journal of Mathematical analysis and applications*, 15(2), 243-252.
- [109] J. H. Mathews, J. H. and Fink, K. D. (2007) "Métodos numéricos con MATLAB" *Prentice Hall*.
- [110] Iyengar, S.R.K., and Jain, R.K. (2009) "Numerical Methods" *New Age International Publishers*.
- [111] Sewell, G. (2005). "The numerical solutions of ordinary and partial differential equations". *John Wiley and Sons*.
- [112] Yang, X., Long, S., Zhang, K., Liu, X., Wang, G., Lian, X., ... and Liu, M. (2013). "Investigation on the RESET switching mechanism of bipolar Cu/HfO₂/Pt RRAM devices with a statistical methodology". *Journal of Physics D: Applied Physics*, 46(24), 245107.

- [113] Vandelli, L., Padovani, A., Larcher, L., Broglia, G., Ori, G., Montorsi, M., ... and Pavan, P. (2011). "Comprehensive physical modeling of forming and switching operations in HfO₂ RRAM devices". In *IEEE International Electron Devices Meeting* (Vol. 1, pp. 17-5). IEEE.
- [114] Lee, J. S., Lee, S. B., Chang, S. H., Gao, L. G., Kang, B. S., Lee, M. J., ... and Kahng, B. (2010). "Scaling theory for unipolar resistance switching". *Phys. Rev. Lett.*, 105(20), 205701.
- [115] Long, S., Cagli, C., Ielmini, D., Liu, M., and Suñé, J. (2012). "Analysis and modeling of resistive switching statistics". *Journal of Applied Physics*, 111(7), 074508.
- [116] Kim, K. M., and Seong Hwang, C. (2009). "The conical shape filament growth model in unipolar resistance switching of TiO₂ thin film". *Applied Physics Letters*, 94(12), 122109-122109.
- [117] Zhong, C. W., Tzeng, W. H., Liu, K. C., Lin, H. C., Chang, K. M., Chan, Y. C., ... and Tsai, M. J. (2013). "Effect of ITO electrode with different oxygen contents on the electrical characteristics of HfO_x RRAM devices". *Surface and Coatings Technology*, 231, 563-566.
- [118] Long, S., Lian, X., Cagli, C., Cartoixa, X., Rurali, R., Miranda, E., ... and Suñé, J. (2013). "Quantum-size effects in hafnium-oxide resistive switching". *Applied Physics Letters*, 102(18), 183505.
- [119] Markussen, T., Rurali, R., Brandbyge, M., and Jauho, A. P. (2006). "Electronic transport through Si nanowires: Role of bulk and surface disorder". *Physical Review B*, 74(24), 245313.
- [120] Shi, X. Q., Dai, Z. X., Zheng, X. H., and Zeng, Z. (2006). "Ab initio electron transport study of carbon and boron-nitrogen nanowires". *The Journal of Physical Chemistry B*, 110(34), 16902-16907.
- [121] Lee, S. B., Chae, S. C., Chang, S. H., Lee, J. S., Seo, S., Kahng, B., and Noh, T. W. (2008). "Scaling behaviors of reset voltages and currents in unipolar resistance switching". *Applied Physics Letters*, 93(21), 212105.
- [122] Villena, M. A., Roldán, J. B., Jimenez-Molinos, F., Suñé, J., Long, S., Miranda, E., and Liu, M. (2014). "A comprehensive analysis on progressive reset transitions in RRAMs". *Journal of Physics D: Applied Physics*, 47(20), 205102.
- [123] Arora, N. (2007). "Mosfet modeling for VLSI simulation: theory and practice". *World Scientific*.
- [124] Wu, J., Cao, J., Han, W. Q., Janotti, A., and Kim, H. C. (2011). "Functional metal oxide nanostructures". *Springer Science and Business Media*.
- [125] Ortiz-Conde, A., García-Sánchez, F. J., Muci, J., Barrios, A. T., Liou, J. J., and Ho, C. S. (2013). "Revisiting MOSFET threshold voltage extraction methods". *Microelectronics Reliability*, 53(1), 90-104.

-
- [126] García-Sánchez, F. J., Ortiz-Conde, A., Muci, J., Sucre-González, A., and Liou, J. J. (2014). "A unified look at the use of successive differentiation and integration in MOSFET model parameter extraction". *Microelectronics Reliability*, 5(2), 293-307.
- [127] González, P., Ibáñez, M. J., Roldán, A. M., and Roldán, J. B. (2014). "An in-depth study on WENO-based techniques to improve parameter extraction procedures in MOSFET transistors". *Mathematics and Computers in Simulation*.
- [128] Walczyk, C., Walczyk, D., Schroeder, T., Bertaud, T., Sowinska, M., Lukosius, M., ... and Wenger, C. (2011). "Impact of Temperature on the Resistive Switching Behavior of Embedded HfO₂-Based RRAM Devices". *Electron Devices, IEEE Transactions on*, 58(9), 3124-3131.
- [129] Rodriguez, A., Gonzalez, M. B., Miranda, E., Campabadal, F., and Suñe, J. (2015). "Temperature and polarity dependence of the switching behavior of Ni/HfO₂-based RRAM devices". *Microelectronic Engineering*, 147, 75-78.
- [130] Waser, R., and Aono, M. (2007). Nanoionics-based resistive switching memories. *Nature materials*, 6(11), 833-840.
- [131] Waser, R. (2012). "Nanoelectronics and information technology". *John Wiley and Sons*.
- [132] Xie, Y. (2014). "Emerging Memory Technologies". *Springer*.
- [133] Marshall, J. M. (1973). "On the interpretation of high field effects in chalcogenide thin films". *Solid-State Electronics*, 16(5), 629-631.
- [134] Bishop, S. M., Bakhru, H., Capulong, J. O., and Cady, N. C. (2012). "Influence of the SET current on the resistive switching properties of tantalum oxide created by oxygen implantation". *Applied Physics Letters*, 100(14), 142111.
- [135] Menzel, S., Waters, M., Marchewka, A., Böttger, U., Dittmann, R., and Waser, R. (2011). "Origin of the Ultra-nonlinear Switching Kinetics in Oxide-Based Resistive Switches". *Advanced Functional Materials*, 21(23), 4487-4492.
- [136] Lu, Y. M., Noman, M., Picard, Y. N., Bain, J. A., Salvador, P. A., and Skowronski, M. (2013). "Impact of Joule heating on the microstructure of nanoscale TiO₂ resistive switching devices". *Journal of Applied Physics*, 113(16), 163703.
- [137] OrCAD Pspice A/D Reference Manual, Version 9.0, (1998). *OrCAD Inc*.

Publicaciones en revistas del JCR relacionadas con esta tesis doctoral

- Villena, M. A., Jimenez-Molinos, F., Roldán, J. B., Suñé, J., Long, S., Lian, X., ... and Liu, M. (2013). “An in-depth simulation study of thermal reset transitions in resistive switching memories”. *Journal of Applied Physics*, 114(14), 144505.
- Villena, M. A., Roldán, J. B., Jimenez-Molinos, F., Suñé, J., Long, S., Miranda, E., and Liu, M. (2014). “A comprehensive analysis on progressive reset transitions in RRAMs”. *Journal of Physics D: Applied Physics*, 47(20), 205102.
- Villena, M. A., González, M. B., Jiménez-Molinos, F., Campabadal, F., Roldán, J. B., Suñé, J., ... and Miranda, E. (2014). “Simulation of thermal reset transitions in resistive switching memories including quantum effects”. *Journal of Applied Physics*, 115(21), 214504.
- Jimenez-Molinos, F., Villena, M., Roldan, J. B., and Roldan, A. M. (2015). “A SPICE Compact Model for Unipolar RRAM Reset Process Analysis”. *Electron Devices, IEEE Transactions on*, 62(3), 955-962.
- Villena, M. A., González, M. B., Roldán, J. B., Campabadal, F., Jiménez-Molinos, F., Gómez-Campos, F. M., and Suñé, J. (2015). “An in-depth study of thermal effects in reset transitions in HfO₂ based RRAMs”. *Solid-State Electronics*, 111, 47-51.

Contribuciones a congresos internacionales relacionadas con esta tesis doctoral

- Roldán, J. B., Villena, M. A., Jiménez-Molinos, F., Romera, E., Cartujo-Cassinello, P. (2014). “A comprehensive resistive memory characterization through the analysis of conductive filaments”. *15th edition of Trends in Nanotechnology International Conference (TNT2014)*.

