02,12,13

Моделирование распределения температур в функциональном наноэлементе из NbN со встроенной областью нормального металла

© Б.А. Гурович¹, Б.В. Гончаров^{1,¶}, К Е. Приходько^{1,2}, Л.В. Кутузов¹

 ¹ НИЦ "Курчатовский институт", Москва, Россия
² Национальный исследовательский ядерный университет (МИФИ), Москва, Россия
[¶] E-mail: goncharov_bv@nrcki.ru

Поступила в Редакцию 29 апреля 2022 г. В окончательной редакции 29 апреля 2022 г. Принята к публикации 12 мая 2022 г.

> Проведено моделирование распределения температур в функциональном наноэлементе из NbN со встроенной областью нормального металла. Функциональный элемент представляет собой два нанопровода из NbN толщиной 4 nm, расположенных на подложке из монокристаллического AL₂O₃. Провода разделены слоем диэлектрика толщиной 10 nm. В нижний нанопровод с помощью технологии C3A, встроена область нормального металла. Дана приблизительная оценка быстродействия функциональных наноструктур, для создания которых используется подобный поход.

> Ключевые слова:Тонкие сверхпроводящие пленки NbN; функциональные сверхпроводящие наноэлементы из NbN; моделирование тепловых процессов.

DOI: 10.21883/FTT.2022.09.52810.44HH

1. Введение

Применение разработанного в НИЦ "Курчатовский институт" метода "селективного замещения атомов" (СЗА) позволяет локально изменять состав и, как следствие, свойства тонкопленочных материалов [1]. Использование данного метода позволяет создавать модифицированные области в нанопроводах из тонкопленочного NbN, которые проявляют резистивные свойства при низких температурах. Также, технология СЗА позволяет изготавливать не только однослойные, но и многослойные структуры. Таким образом, появляется возможность создания пассивных [2] (сопротивления), и активных (логические элементы "НЕ", "И", "ИЛИ") функциональных наноразмерных элементов. Если чередовать нанопровода со встроенными модифицированными областями и без них определенным образом, то можно добиться влияния соседних нанопроводов друг на друга. Механизм переключения в таких элементах основан на тепловом воздействии управляющего элемента ("затвора") на управляемый элемент (сверхпроводящий канал соседнего нанопровода), которое вызывает нагрев последнего или его части до критической температуры для его перехода из сверхпроводящего состояния в нормальное. В работе [3] было показано, что встраивание областей нормального металла в сверхпроводящий провод приводит к уменьшению величины критического тока, что по всей видимости было связанно с тепловыделением в области нормального металла. В работе [4] был описан однослойный функциональный многокаскадный наноразмерный элемент, который был создан при помощи технологии C3A, и выполнял логическую функцию "НЕ". Однако, расположение нагреваемого нанопровода и затвора в одной плоскости [4] не является оптимальным с точки зрения минимизации энергии переключения единичного элемента. Как было показано в работе [4], минимальные мощности переключения характерны для двухслойных вертикальных структур, поскольку затвор и нагреваемый нанопровод находятся друг под другом и разделены тонким слоем диэлектрика. Цель настоящей работы — описать процесс нагрева в такой вертикальной геометрии, наиболее близкой к перспективному расположению элементов с точки зрения минимизации мощности, требуемой для переключения сверхпроводящего проводника в нормальное состояние.

Настоящая работа посвящена моделированию процесса выделения и распространения тепла в функциональном наноэлементе из NbN со встроенной областью нормального металла. Элемент представляет собой расположенный на подложке из монокристаллического сапфира нанопровод из NbN, в котором методом C3A создана резистивная область. Над ним через разделительный слой диэлектрика (Al₂O₃ толщиной 10 nm) располагается второй сверхпроводящий нанопровод NbN толщиной 4 nm. Общий вид геометрии представлен на рис. 1. Через нижний нанопровод пропускается близкий к критическому постоянный ток. Поскольку в работе выполняется исключительно тепловой расчет, через верхний нанопровод ток не пропускается. В процессе работы реального устройства по верхнему нанопроводу также протекает ток, близкий к критическому, но в



Рис. 1. Общий вид моделируемого устройства 1) нанопровода NbN, 2) подложка и разделительный диэлектрический слой Al₂O₃, 3) встроенная с помощью метода C3A в нанопровод область нормального металла длиной 50 nm.



Рис. 2. Продольный срез моделируемой геометрии наноэлемента. Красным выделены линии, вдоль которых производился расчет. Стрелкой указано направление протекания тока.

нем не происходит тепловыделения, поскольку верхний нанопровод находится в сверхпроводящем состоянии.

В дальнейшем результаты могут быть использованы для проектирования топологий как однослойных, так и многослойных структур.

2. Моделирование

Моделирование производилось с помощью методики подробно описанной в [5], то есть для распределения тепла вдоль линии расчета использовалось уравнение теплопроводности

$$J^{2}\rho + \kappa \frac{\partial^{2}T}{\partial x^{2}} + \frac{\alpha}{d} \left(T - T_{sub}\right) = \frac{\partial cT}{\partial t}.$$

Здесь ρ — удельное сопротивление участка, J — плотность тока, κ — коэффициент теплопроводности NbN, α — граничная теплопроводность между NbN и сапфиром, d — толщина провода, c — теплоемкость единицы объема NbN, $_{Tsub}$ — температура подложки (либо разделительного слоя AL₂O₃). Правая часть уравнения описывает изменения локальной плотности

описывает джоулев нагрев. Этот нагрев постоянно происходит в модифицированной области. Второе слагаемое описывает распространение тепла вдоль линии расчета. Третье слагаемое описывает распространение тепла в сапфировую подложку и разделительный слой диэлектрика (поскольку материал подложки и разделительного слоя один и тот же). Нужно отметить, что поскольку моделирование всего представленного объема требует значительных вычислительных мощностей, расчет производился только вдоль прямых А и В продольного среза функционального элемента (см. рис. 2). Расчет вдоль прямой А позволяет оценить распределение температур во всех слоях функционального элемента. Расчет вдоль прямой В позволяет оценить время, необходимое для разогрева нагревательного элемента до температуры выше Т_с. Кроме того, можно приблизительно оценить размер области, прилегающей к нагревательному элементу нижнего нанопровода, которая переходит в нормальное состояние, и сама начинает принимать участие в разогреве. Также следует отметить, что есть два важных отличия от случая, описанного в работе [5]. Первое отличие заключается в том, что в моделируемом устройстве модифицированная область (нагревательный элемент) постоянно встроена в сверхпроводник. Второе важное отличие заключается в том, что мы пропускаем через проводник постоянный ток. Мы также учитывали зависимости ρ и κ от температуры и состояния (сверхпроводящее либо нормальное) участка провода. Удельное электрическое сопротивление ρ мы определяли, как равное нулю, если температура участка ниже чем T_c , и равное $3 \cdot 10^{-6} \Omega \cdot m$, если температура участка выше T_c. Коэффициент теплопроводности к для NbN определяется по закону Видемана-Франца (когда проводник находится в нормальном состоянии). Для сверхпроводящего состояния мы воспользовались той же зависимостью, что и в [5]: $\kappa_s / \kappa_n = T / T_c$ (где κ_n -коэффициент теплопроводности в нормальном состоянии, а κ_s в сверхпроводящем). В моделируемом устройстве ток пропускается только по нижнему нанопроводу. В данной работе мы производим расчет только относительно теплового разогрева верхнего нанопровода или его части до Т. В реальных устройствах, в верхнем нанопроводе будет пропускаться ток близкий к Іс. Разогрев части провода выше Т_с должен приводить к увеличению плотности тока в нем. Увеличение плотности тока приведет к разрушению сверхпроводимости. Разрушение сверхпроводимости в верхнем нанопроводе моделируемого устройства и есть его срабатывание, поэтому мы не учитываем протекание тока в верхнем нанопроводе. В качестве начальных условий по температурам всех

энергии. В левой части уравнения, первое слагаемое

В качестве начальных условий по температурам всех составных частей функционального элемента была задана температура 4.2 К. Поскольку в реальных устройствах для электрического сопряжения с измерительными установками геометрия функциональных слоев значительно расширяется, в качестве граничных условий на краях моделируемого элемента была задана постоянная тем-



Рис. 3. Результаты моделирования вдоль прямой В (нагрев и охлаждение нагревательного элемента).

пература 4.2 К. В качестве T_c для всех проводов NbN использовалось значение 6.2 К, которое было взято и измерений R(T) для пленок NbN данной толщины [6].

3. Результаты и обсуждение

Основная задача работы состояла в том, чтобы изучить распределение температуры в функциональном наноэлементе: необходимо было выяснить прогревается ли верхний слой NbN (или хотя бы его часть) до температур выше T_c . Также необходимо было выяснить характерные времена нагревания и остывания как непосредственно нагревательного элемента, так и верхнего нанопровода до температуры T_c , чтобы определить возможный частотный диапазон работы логических устройств без гальванической связи, которые создаются

методом СЗА, и используют тепловой нагрев для переключения соответствующих элементов.

Результаты моделирования нагревания вдоль прямой **B** приведены на рис 3. Пропускаемый ток через нанопровод равнялся 20 мкА, что соответствует ~ $0.9I_c$ реально изготавливаемых нанопроводов из NbN с заданной геометрией. Ток пропускался первые 500 ps, после чего пропускание тока прекращалось. Из графика видно, что область нормального металла прогревается до температуры 8 K, что превышает T_c исходного NbN. Прилегающие к нагревательному элементу области переходят в нормальное состояние, и сами начинают принимать участие в Джоулевом нагреве.

Результаты моделирования вдоль прямой **A** приведены на рис. 4 и 5. Графики иллюстрируют распределение температуры от подложки до верхнего края всей геометрии при различных временах. Рис. 4 описывает нагрев, а рис. 5 — остывание. Хорошо видны четыре различные области. Слева направо: подложка Al₂O₃, нагревательный элемент (область нормального металла), разделительный диэлектрик Al₂O₃ и, наконец, верхний слой NbN. Из графика видно, что влияние нагревателя на верхний слой NbN начинается после ~ 50 рs. Температура верхнего слоя приближается к значениям, близким к величине T_c после 150 рs. После снятия тока начинается процесс охлаждения (рис. 5), и температура в области верхнего нанопровода падает ниже T_c за время примерно 75 рs.

Результаты моделирования позволяют предположить, что на полный цикл нагрев-охлаждение для верхнего слоя NbN (в функциональном элементе он представляет собой переключаемый теплом элемент) уходит время $\sim 150-200$ ps. В реальных устройствах рабочая температура всего устройства может быть выше, чем 4.2 К и составлять 0.8–0.9 от T_c , следовательно возможно уменьшение времени цикла нагрев–охлаждение. Кроме



Рис. 4. Результаты моделирования вдоль прямой А для нагрева всей системы.



Рис. 5. Результаты моделирования вдоль прямой А для охлаждения всей системы.

того, возможно уменьшение толщины межслоевого диэлектрика до значений 3–5 nm, что также должно приводить к уменьшению времени нагрева верхнего слоя.

4. Заключение

Полученные в работе результаты по распределению температуры вдоль поперечного среза функционального наноэлемента можно использовать для расчета величины плотности критического тока в верхнем нанопроводе. Это позволит реализовать его переход в нормальное состояние с учетом величины тока, протекающего через него. Такой расчет позволит получить более реалистичные значения времен переключения верхнего нанопровода в нормальное состояние и обратно.

Реальные устройства будут работать при температурах выше 4.2 К ($\sim 0.8T_c$). В каждом из нанопроводов, входящих в устройство, с повышением температуры будет падать критическая плотность тока, а следовательно, и величина критического тока тоже будет уменьшаться. Для учета данного эффекта необходимо экспериментально измерить зависимости критической плотности тока от температуры для каждого из нанопроводов. В дальнейшем на основе результатов, полученных в данной работе, и экспериментальных данных в модели необходимо будет учесть протекание тока по верхнему нанопроводу.

Изготавливаемые с помощью технологии СЗА функциональные наноэлементы имеют различные геометрии. Они также могут иметь различное расположение относительно друг друга. Полученные результаты позволят оптимизировать их расположение и геометрии, а также учесть возможность взаимного влияния.

Финансирование работы

Работа выполнена при поддержке ЧУ "Наука и инновации" договор № 774/287-Д/220/1111-21.

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Список литературы

- B.A. Gurovich, K.E. Prihod'ko, M.A. Tarkhov, A.G. Domantovsky, D.A. Komarov, B.V. Goncharov, E.A. Kuleshova. Micro Nanosystems 7, 172 (2015).
- [2] B.A. Gurovich, B.V. Goncharov, M.M. Dementyeva, K.E. Prikhodko, L.V. Kutuzov, D.A. Komarov, A.G. Domantovsky. IOP Conf. Ser.: Mater. Sci. Eng. 699, 012016 (2019).
- [3] Б.А. Гурович, К.Е. Приходько, Б.В. Гончаров, М.М. Дементьева, Л.В. Кутузов, Д.А. Комаров, А.Г. Домантовский, В.Л. Столяров, Е.Д. Ольшанский. ЖТФ 90, 11, 1860 (2020).
- [4] Б.А. Гурович, К.Е. Приходько, Л.В. Кутузов, Б.В. Гончаров. ФТТ 62, 9, 1420 (2020).
- [5] J.K.W. Yang, A.J. Kerman, E.A. Dauler, V. Anant, K.M. Rosfjord, K.K. Berggren. IEEE Trans. Appl. Supercond. 17, 2, 581 (2007).
- [6] B.V. Goncharov, B.A. Gurovich, K.E. Prikhodko, M.M. Dementyeva, V.L. Stolyarov, E.D. Olshansky, A.G. Domantovsky, L.V. Kutuzov, E.M. Malieva, A.A. Cherepanov. IOP Conf. Ser.: Mater. Sci. Eng. **1005**, 012023 (2020).

Редактор Ю.Э. Китаев