

19,12

# Моделирование тепловых процессов в многослойном логическом нанозаэлементе, состоящем из нанопроводов NbN, расположенных в различных функциональных слоях и разделенных слоем диэлектрика Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>

© Б.А. Гурович<sup>1</sup>, Б.В. Гончаров<sup>1,†</sup>, К.Е. Приходько<sup>1,2</sup>, Л.В. Кутузов<sup>1</sup>, Д.А. Гончарова<sup>1</sup>

<sup>1</sup> НИЦ „Курчатовский институт“,  
Москва, Россия

<sup>2</sup> Национальный исследовательский ядерный университет (МИФИ),  
Москва, Россия

<sup>†</sup> E-mail: goncharov\_bv@nrcki.ru

Поступила в Редакцию 17 апреля 2023 г.

В окончательной редакции 17 апреля 2023 г.

Принята к публикации 11 мая 2023 г.

Выполнено моделирование распределения температур в трехслойном функциональном нанозаэлементе, состоящем из нанопроводов NbN, разделенных слоями Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>. Нанопровод со встроенной областью нормального металла, расположен в среднем слое устройства. Моделирование выполнено для всех трех проводов, входящих в устройство. Через каждый из проводов пропускался постоянный ток  $\approx 0.9$  от  $I_c$ . Дана оценка времени перехода верхнего нанопровода в нормальное состояние в результате нагрева, с учетом его постепенного прогрева и зависимости  $I_c$  от температуры.

**Ключевые слова:** тонкие сверхпроводящие пленки NbN; функциональные сверхпроводящие нанозаэлементы из NbN; моделирование тепловых процессов.

DOI: 10.21883/FTT.2023.07.55846.33H

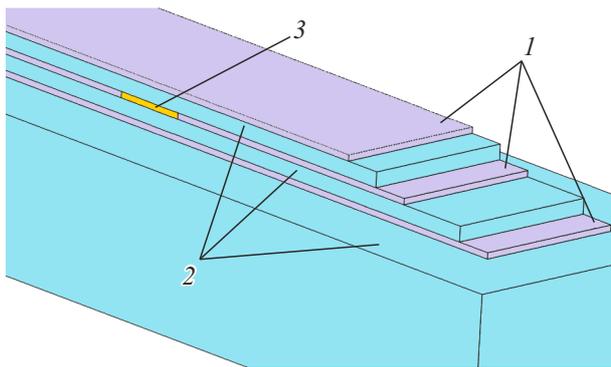
## 1. Введение

Использование сверхпроводящих наноразмерных NbN проводов получило широкое распространение в криоэлектронике [1–3]. Разработанная в НИЦ „Курчатовский институт“ методика „селективного замещения атомов“ (СЗА) позволяет локально изменять состав и, как следствие, свойства тонкопленочных материалов [4]. В частности, с применением данного метода можно создавать локальные, модифицированные области в нанопроводах из тонкопленочного NbN, которые проявляют резистивные свойства при температурах ниже, чем  $T_c$  самого провода. Также, технология СЗА позволяет изготавливать многослойные функциональные наноструктуры [5]. Методика СЗА открывает возможность создания, как пассивных, так и активных функциональных наноразмерных элементов. 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 [6] было проведено моделирование нагрева двухслойного элемента и была дана оценка времени прогрева всего прогреваемого нанопровода до  $T_c$ , однако в работе не учитывалось протекание тока по верхнему (переключаемому) нанопроводу, тогда как в реальных устройствах через переключаемые

нанопровода протекает ток  $\approx 0.9I_c$ . Поскольку переключение в элементе происходит за счет теплового воздействия, для уменьшения потребляемой мощности на единичное переключение логично расположить нагревательный элемент между двумя сверхпроводящими проводами. Также такое расположение „затвора“ позволяет одновременно переключить сразу два нанопровода (расположенных сверху и снизу нагревателя).

Настоящая работа посвящена моделированию процесса выделения и распространения тепла в многослойном логическом нанозаэлементе, состоящем из нанопроводов NbN, расположенных в различных функциональных слоях и разделенных слоями диэлектрика Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>. Элемент представляет собой расположенные на подложке из монокристаллического сапфира три нанопровода из NbN. В проводе, расположенном в среднем слое методом СЗА создана резистивная область. Сверху и снизу через разделительный слой диэлектрика (Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> толщиной 10 nm) располагаются второй и третий сверхпроводящие нанопровода NbN. Толщина каждого провода NbN составляет 4 nm. Общий вид геометрии представлен на рис. 1. Через средний нанопровод пропускается постоянный ток близкий к критическому. Через верхний и нижний сверхпроводящие нанопровода, также пропускается постоянный ток  $\approx 0.9I_c$ .

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



**Рис. 1.** Общий вид моделируемого устройства: 1) нанопровода NbN, 2) подложка и разделительный диэлектрический слой  $\text{Al}_2\text{O}_3$ , 3) встроенная с помощью метода СЗА в нанопровод область нормального металла длиной 50 nm.

## 2. Моделирование

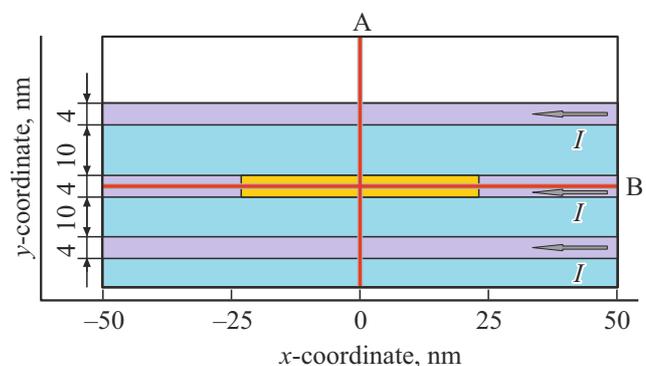
Методика моделирования подробно описана в работе [7], то есть для распределения тепла использовалось уравнение теплопроводности

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

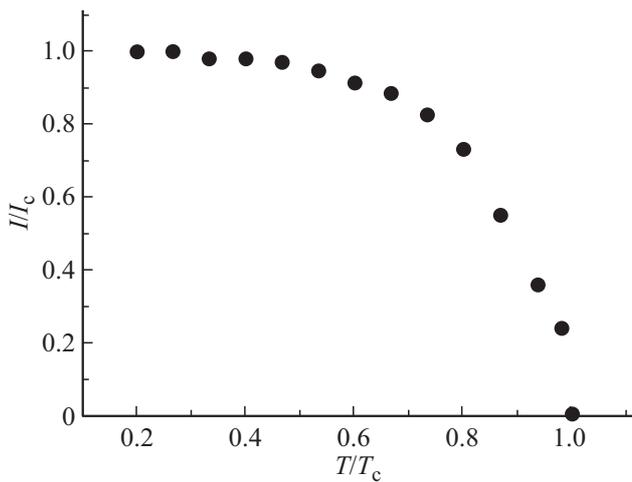
Здесь  $J$  — плотность тока,  $\rho$  — удельное сопротивление участка,  $\kappa$  — коэффициент теплопроводности NbN,  $\alpha$  — граничная теплопроводность между NbN и сапфиром,  $d$  — толщина провода,  $c$  — теплоемкость единицы объема NbN или единицы объема разделительного слоя  $\text{Al}_2\text{O}_3$  (для случая, когда расчет ведется в плоскости слоев NbN направлении),  $T_{\text{sub}}$  — температура подложки (либо разделительного слоя  $\text{Al}_2\text{O}_3$ );  $x$  — описывает координату вдоль линии расчета и не связана с координатами, приведенными на рис. 2. Правая часть уравнения описывает изменения локальной плотности энергии. В левой части уравнения, первое слагаемое описывает Джоулев нагрев. Этот нагрев постоянно происходит в модифицированной области, а также в тех участках переключаемого нанопровода чья температура  $\geq T_c$ . Второе слагаемое описывает распространение тепла вдоль линии расчета. Третье слагаемое описывает распространение тепла в сапфировую подложку и разделительные слои диэлектрика. В данной работе мы также использовали данные по теплопроводности подложки из  $\text{Al}_2\text{O}_3$ , полученные в [8]. Несмотря на то, что материал подложки это монокристаллический  $\text{Al}_2\text{O}_3$ , а материал разделительных слоев это  $\text{Al}_2\text{O}_3$  полученный методом атомно-слоевого осаждения вероятно зависимости в температурном диапазоне 4.2–20 K очень близки. Поэтому для разделительных слоев и подложки использовались одни и те же значения. Нужно отметить, что поскольку моделирование всего представленного объема требует значительных вычислительных мощностей, расчет производился только вдоль прямых А и В в продольного среза функционального элемента (см.

рис. 2). Расчет вдоль прямой А позволяет оценить распределение температур во всех слоях функционального элемента. При расчете вдоль прямой А, которая лежит в нормальном к плоскости слоев NbN направлении, на границах слоев сверхпроводник/диэлектрик, мы использовали граничные условия третьего рода (в нашем случае  $\alpha(T_{\text{sub}} - T)$ ): для каждого из интерфейсов в каждый расчетный момент времени использовалось свое значение  $T_{\text{sub}}$ . Значение  $\alpha$  было неизменным (хотя оно зависит как от температуры, так и от состояния), и было взято из [7]. Расчет вдоль прямой В позволяет оценить время, необходимое для разогрева нагревательного элемента до температуры выше  $T_c$ , а также оценить до какой температуры он прогревается. Также следует отметить, что есть два важных отличия от случая, описанного в работе [7]. Первое отличие заключается в том, что в моделируемом устройстве постоянно встроена в сверхпроводник. Второе важное отличие заключается в том, что мы пропускаем через каждый проводник постоянный ток. Мы также учитывали зависимости  $\rho$  и  $\kappa$  от температуры и состояния (сверхпроводящее либо нормальное) участка провода. Удельное электрическое сопротивление  $\rho$  мы определяли, как равное нулю, если температура участка ниже чем  $T_c$ , и равное  $3 \cdot 10^{-6} \Omega \cdot \text{m}$ , если температура участка выше  $T_c$ . Модифицированный участок провода всегда находится в нормальном состоянии, его измеренное сопротивление на квадрат составило  $6 \cdot 10^{-6} \Omega \cdot \text{m}$ . Коэффициент теплопроводности  $\kappa$  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  $\kappa_n$  — коэффициент теплопроводности в нормальном состоянии, а  $\kappa_s$  — в сверхпроводящем).

В отличие от работы [6], в которой был выполнен расчет прогрева всего переключаемого нанопровода выше  $T_c$  в данной работе мы учли протекание тока  $\approx 0.9I_c$  через переключаемые нанопровода. При прогреве части переключаемого провода выше  $T_c$ , происходит перераспределение плотности тока в оставшуюся непрогретую



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



**Рис. 3.** Измеренное уменьшение величины критического тока при приближении температуры к  $T_c$ .

часть, и плотность тока может превысить критическую. Кроме того в процессе разогрева до  $T_c$  переключаемых проводов, уменьшается величина  $I_c$  его подогретой части. Значения величины  $I_c$  для сверхпроводящих проводов (без встроенной резистивной области) были взяты из измеренных зависимостей  $I_c$  от температуры (результаты измерений приведены на рис. 3). Момент перехода верхнего провода, можно определить, как точку, при которой более 10 процентов провода нагрето до температуры  $\geq T_c$ .

Моделирование проводилось для 2х температур 4.2 К и 5.5 К. В качестве начальных условий по температурам всех составных частей функционального элемента была задана температура 4.2 К, либо 5.5 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 температура 4.2 К или 5.5 К соответственно.

В предыдущей работе авторов [6]  $T_c$  пленок составляло 6.2 К, однако столь низкая величина была связана с неоптимальными параметрами режимов напыления пленок, поскольку пленки напыляются методом катодного распыления при пониженных температурах напыления (20–200°C). После оптимизации режимов напыления, измерения  $R(T)$  показали величину  $T_c = 8.5$  К, для пленок NbN данной толщины. Данное значение использовалось для всех сверхпроводящих нанопроводов.

### 3. Результаты и обсуждение

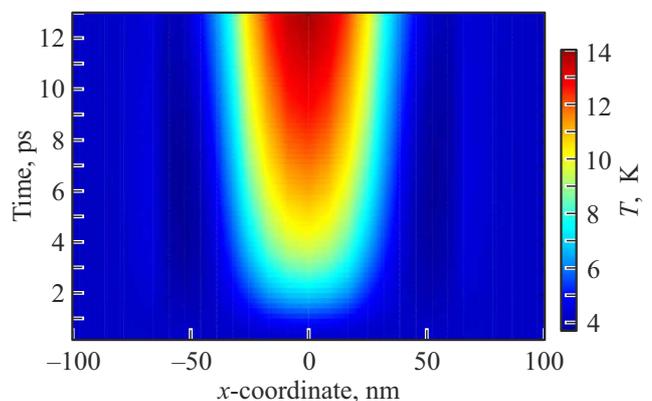
Основная задача работы состояла в том, чтобы изучить распределение температуры в функциональном нанозементе: необходимо было выяснить за какое время прогревается 10% толщины переключаемого слоя NbN до температур выше  $T_c$ . Оценка этого времени поможет определить возможный частотный диапазон работы логических устройств без гальванической связи, которые

создаются методом СЗА, и используют тепловой нагрев для переключения соответствующих элементов. Также необходимо было выяснить максимальную температуру нагревания, как непосредственно нагревательного элемента, так и верхнего и нижнего нанопровода.

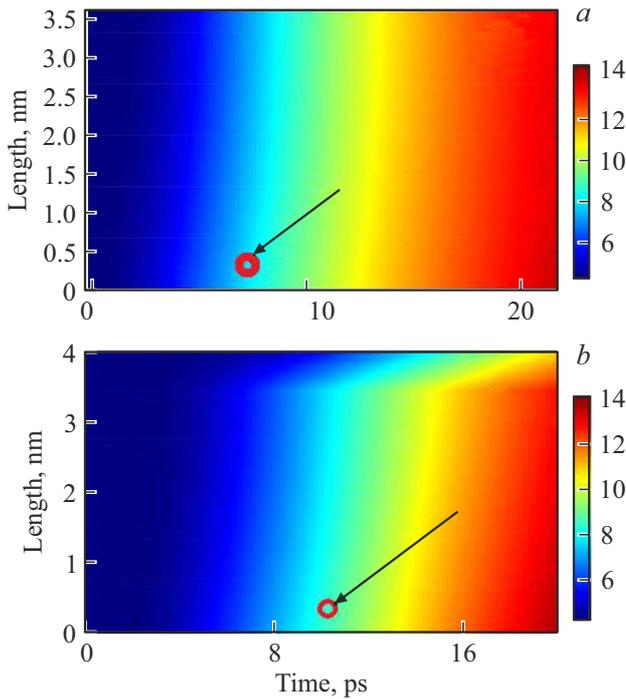
Результаты моделирования нагревания вдоль прямой Б приведены на рис. 4. Пропускаемый ток через нанопровода равнялся  $20 \mu\text{A}$ , что соответствует  $\sim 0.9I_c$  реально изготавливаемых нанопроводов из NbN с заданной геометрией. Из графика видно, что область нормального металла прогревается до температуры 14 К, что заметно превышает  $T_c$  исходного NbN.

Результаты моделирования вдоль прямой А, для верхнего нанопровода приведены на рис. 5 и 6. Графики иллюстрируют распределение температуры от нижнего до верхнего края всего сверхпроводящего провода при различных временах. Рис. 5 описывает нагрев от начальной температуры 4.2 К, а рис. 6 от начальной температуры 5.5 К. Нас интересует точка на расстоянии 0.4 nm от нижней границы провода (точки выделены на рисунках), при которой достигается температура 8.5 К (измеренное  $T_c$  пленок NbN). Результаты моделирования вдоль прямой А, для нижнего нанопровода приведены на рис. 5 и 6. В целом результаты повторяются, с той оговоркой, что времена необходимые для прогрева сдвигаются в большую сторону на 1–2 ps. По всей видимости, сказывается влияние массивной подложки из  $\text{Al}_2\text{O}_3$ .

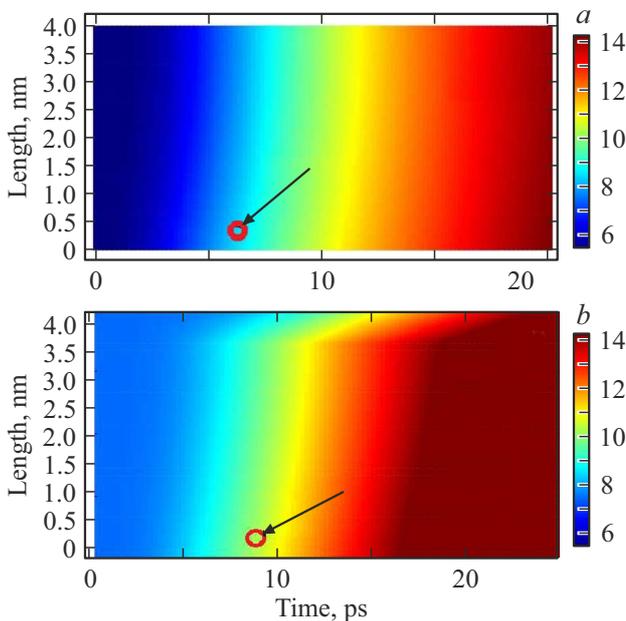
Результаты моделирования позволяют предположить, что время необходимое для срабатывания устройства составляет  $\sim 9$ –10 ps для начальной температуры 4.2 К, и  $\sim 6$ –7 ps для начальной температуры 5.5 К. В работе [6] проводился расчет прогрева всего нагреваемого нанопровода выше  $T_c$ , и результат показал необходимое время  $\sim 150$  ps. Учет протекания тока и перераспределения его плотности по сверхпроводящим переключаемым проводникам оказывает существенное влияние на оценку времени единичного переключения. Конечно, на общее время срабатывания также оказывает влияния и время необходимое для остывания всего устройства и



**Рис. 4.** Результаты моделирования вдоль прямой Б (разогрев нагревательного элемента).



**Рис. 5.** Результаты моделирования вдоль прямой А для нагрева верхнего (а), и нижнего (b) нанопровода для начальной температуры 4.2 К. Обозначения выделенных точек поясняются в тексте.



**Рис. 6.** Результаты моделирования вдоль прямой А для нагрева верхнего (а), и нижнего (b) нанопровода для начальной температуры 5.5 К. Обозначения выделенных точек поясняются в тексте.

его возврата в исходное состояние. Учет этого времени можно произвести, если добавить в модель описание источника сигналов, с учетом параметров самих управляющих сигналов. Также потребуются описать входящие в состав реальных устройств токоограничивающие сопротивления. Работы в данном направлении будут продолжены.

#### 4. Заключение

Полученные в работе результаты по распределению температуры вдоль поперечных срезов функционального нанозлемента можно использовать для оценки времени срабатывания описанных выше многослойных функциональных нанозлемента.

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

#### Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

#### Список литературы

- [1] A.N. McCaughan, K.K. Berggren. *Nano Lett.* **14**, 10, 5748 (2014).
- [2] 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).
- [3] G. Gol'tsman, O. Minaeva, A. Korneev, M. Tarkhov, I. Rubtsova, A. Divochiy, I. Milostnaya, G. Chulkova, N. Kaurova, B. Voronov, D. Pan, J. Kitaygorsky, A. Cross, A. Pearlman, I. Komissarov, W. Slysz, M. Wegrzecki, P. Grabiec, Roman Sobolewski. *IEEE Trans. Appl. Supercond.* **17**, 2, 246 (2007).
- [4] B.A. Gurovich, B.V. Goncharov, K.E. Prihod'ko, E.A. Kuleshova, D.A. Komarov, V.L. Stolyarov, E.D. Olshanskii, B.V. Goncharov, D.A. Goncharova, L.V. Kutuzov, A.G. Domantovskii. *Nanotechnol. Russ.* **9**, 386 (2014).
- [5] Б.А. Гурович, К.Е. Приходько, Л.В. Кутузов, Б.В. Гончаров. *ФТТ* **62**, 9, 1420 (2020).
- [6] Б.А. Гурович, Б.В. Гончаров, К.Е. Приходько, Л.В. Кутузов. *ФТТ* **64**, 9, 1228 (2022).
- [7] Joel K.W. Yang, Andrew J. Kerman, Eric A. Dauler, Vikas Anant, Kristine M. Rosfjord, Karl K. Berggren. *IEEE Trans. Appl. Supercond.* **17**, 2, 581 (2007).
- [8] D.A. Chernodoubov, A.V. Inyushkin. *Rev. Sci. Instrum.* **90**, 024904 (2019).

Редактор Ю.Э. Кутаев