

УДК 519.633.6+536.21+538.945

Математическое моделирование распределения температуры внутри пленки нитрида ниобия на основе двумерного уравнения теплопроводности

Кузьмичев Н. Д., Данилова Е. В., Васютин М. А.

Национальный исследовательский Мордовский государственный университет

На сегодняшний день широкое применение получили нитриды переходных металлов, нанесенные в виде тонких пленок. Например, пленки нитридов переходных металлов активно применяются в микроэлектронике, поскольку обладают уникальными изоляционными, полупроводниковыми, сверхпроводящими, оптическими и рядом других важных свойств.

При проведении экспериментов при исследовании вольтамперных характеристик (ВАХ) с целью определения сверхпроводящих параметров образцов пленок нитрида ниобия (NbN), они подвергаются воздействию тока высокой плотности. Этот процесс требует достаточного теплоотвода. В противном случае полученные результаты будут недостоверны в силу перегрева пленки. По этой причине математическое моделирование теплоотдачи пленок нитрида ниобия при пропускании через них тока является актуальной и практически важной задачей. Ранее для этого случая авторами была решена одномерная задача теплопроводности [1]. В настоящей работе выполнено математическое моделирование распределения температуры внутри пленки нитрида ниобия на основе двумерного уравнения теплопроводности с учетом расположения теплоотводящих контактов на поверхности пленки.

В интегрированной среде разработки Microsoft Visual Studio был написан код программы, которая решает двумерное неоднородное уравнение теплопроводности на языке C++ [2, 3]. Решением данного уравнения является распределение температуры $u(x, y, t)$ в системе пленка-подложка-термостат. Уравнение имеет вид:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = a^2 \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right) + f(x, t), \quad (1)$$

где $a^2 = \frac{\lambda}{c_p \cdot \rho} = 4,3 \cdot 10^{-2} \text{ см}^2/\text{с}$ – коэффициент температуропроводности кварцевой подложки и пленки NbN, $c_p = 17 \text{ Дж}/(\text{кг} \cdot \text{К})$ – удельная теплоемкость подложки при 20 К [4], $\rho = 2,2 \text{ г}/\text{см}^3$ – плотность подложки, $\lambda = 0,16 \text{ Вт}/(\text{м} \cdot \text{К})$ – теплопроводность подложки при 20 К, u – температура пленки, t – время, x и y – координаты (начало отсчета находится на внешней от подложки плоскости пленки, оси направлены перпендикулярно в сторону подложки);

$$f(x, t) = \frac{P(x, t)}{c_{NbN} \cdot \rho_{NbN}};$$

$P(x, t)$ – объёмная плотность мощности источника тепла (пленки), $c_{NbN} = 17 \text{ Дж}/(\text{кг} \cdot \text{К})$ – удельная теплоемкость NbN пленки при $T = 14 \text{ К}$ (сумма решёточной и электронной теплоемкости), $\rho_{NbN} = 8,4 \text{ г}/\text{см}^3$ – плотность пленки. Учитывая, что сила тока линейно возрастает за время t_0 от 0 до $I_{max} = 1,12 \text{ А}$ (в нашем случае $t_0 = 0,25 \text{ мс}$), величина $P(x, t)$ определяется законом Джоуля-Ленца:

$$P(x, t) = \begin{cases} \rho \cdot j_0^2 \cdot t^2, & x \leq d, t \leq t_0; \\ 0, & x > d, t > t_0. \end{cases}$$

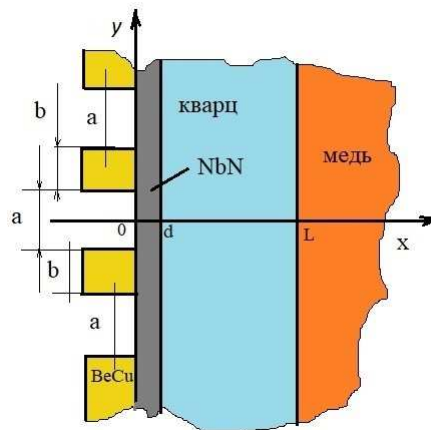


Рис. 1. Схема системы пленка-подложка-термостат.

Здесь $j_0 = \frac{I_{max}}{(d \cdot b \cdot t_0)}$, удельное сопротивление пленки в нормальном состоянии $\rho = 440 \mu\Omega \cdot \text{см}$, толщина пленки $d = 400$ нм и ширина пленки $b = 9$ мм. Начальным условием будет постоянная функция $u(x, y, 0) = 14$ К, которая определяет начальную температуру системы пленка-подложка. Задаем справа краевое условие первого рода, т. е. постоянную температуру: $u(L, y, t) = 14$ К. На левом конце заданы краевые условия третьего рода. Это обусловлено тем, что по закону Ньютона левая граница пленки посредством тепловых контактов находится в теплообмене со средой, имеющей температуру 14 К:

$$\left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)_{0,y,t} = H(y) \cdot [u(0, y, t) - 14].$$

Коэффициент теплообмена H зависит от y :

$$H(y) = \begin{cases} 0, & |y| \leq \frac{a}{2}; \\ H_0, & \frac{a}{2} < |y| \leq \frac{a}{2} + b; \\ 0, & \frac{a}{2} < |y| \leq \frac{3 \cdot a}{2} + b; \\ H_0, & \frac{3 \cdot a}{2} + b < |y|. \end{cases}$$

В межконтактной области $H = 0$, в области контакта $H = H_0 = 50 \mu\text{m}^{-1}$.

Для аппроксимации дифференциального уравнения (1) разностным методом введена пространственно-временная сетка с координатами $x_i = (i - 1) \cdot h_x$, $y_j = (j - 1) \cdot h_y$, $t_n = n \cdot \tau$, h_x, h_y – шаги сетки по координатам x и y соответственно; τ – шаг по времени; $i = 1, 2, \dots, N_x$, $j = 1, 2, \dots, N_y$, $n = 0, 1, 2, \dots, K$.

Дискретизация уравнения (1) проведена с использованием локальной одномерной схемой А. А. Самарского [2, 3], которая является абсолютно устойчивой и обладает свойством суммарной аппроксимации. Первый этап – дискретизация только в направлении оси x на промежуточном временном шаге, решение получившегося одномерного уравнения. Второй этап – аналогичные действия в направлении оси y , но на целом шаге по времени. Каждое

одномерное уравнение сведено к стандартному трехдиагональному виду и решено методом прогонки.

На рис. 2 представлен начальный момент времени. Импульс возрастает линейно в течении $250 \mu s$. Из полученных результатов, приведенных на рисунках 2a, 2b видно, что максимальная температура нагрева находится внутри пленки и наибольшее ее значение достигается в конце импульса.

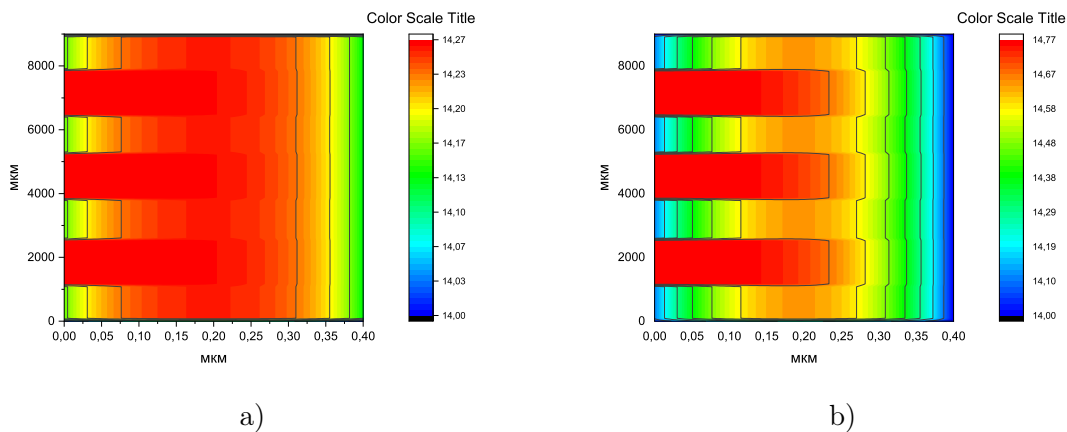


Рис. 2. Распределение тепла внутри пленки при $\tau = 100 \mu s$ (a), $\tau = 250 \mu s$ (b).

Результат работы программы выводится в виде матрицы размерности 100×100 элементов с шагом по времени $\tau = 100 \mu s$. После прекращения подачи импульса можно наблюдать незначительное изменение относительно конечного момента подачи (рис. 3a). Далее уже на пятой миллисекунде можно увидеть значительное охлаждение пленки до 14,03 К (рис. 3b).

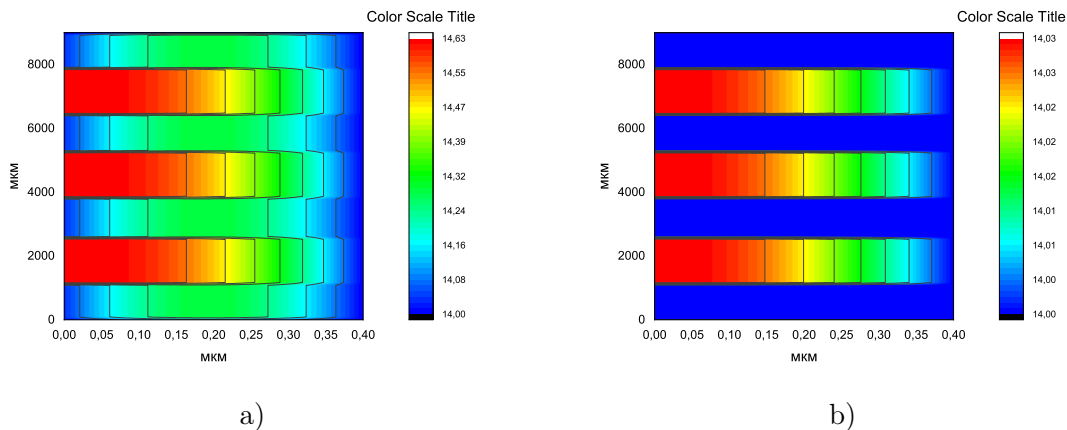


Рис. 3. Распределение тепла внутри пленки при $\tau = 400 \mu s$ в начале (a) и на 5-й ms (b).

На рис. 4 представлено изменение максимальной температуры внутри пленки нитрида ниобия в течении $20 ms$. Из графика видно, что температура достигает своего максимума в момент завершения подачи импульса.

Из полученных результатов можно сделать вывод, что моделирование процесса теплообмена пленки нитрида ниобия при нагревании импульсом тока на основе двумерного уравнения теплопроводности уточняет результаты предыдущей работы [1]. Таким образом, применение прижимных контактов из бериллиевой бронзы позволяет проводить исследование ВАХ сверхпроводников с токами высокой плотности ($10^4 - 10^5 \text{ A/cm}^2$) без значительного

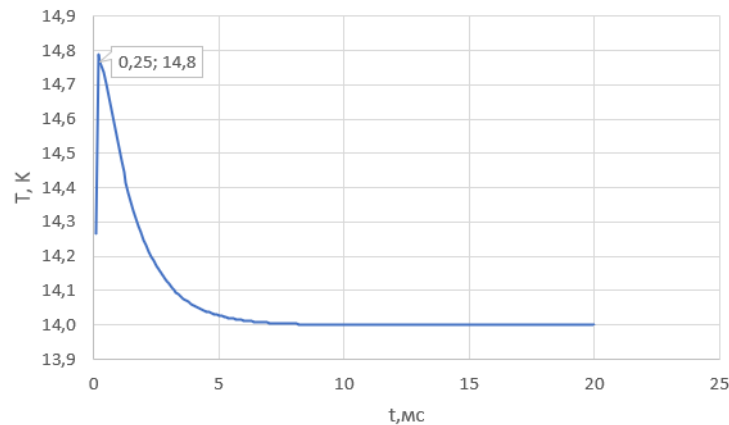


Рис. 4. Изменение максимальной температуры пленки NbN от времени.

нагрева образцов.

Литература

1. Кузьмичев Н.Д., Васютин М.А., Данилова Е.В., Лапшина Е.А. Математическое моделирование процесса теплоотдачи пленки нитрида ниобия при импульсном нагреве током. Журнал Средневолжского математического общества. 2021. Т. 23, № 1. С. 82-90.
2. Кузнецов Г.В., Шерemet М.А. Разностные методы решения задач теплопроводности: учебное пособие. Томск: Изд-во ТПУ, 2007. 172 с.
3. Формалев В.Ф., Ревизников Д.Л. Численные методы. М.: ФИЗМАТЛИТ, 2006. – 406 с.
4. Таблицы физических величин. Справочник. Под ред. акад. И.К. Кикоина. М., Атомиздат. 1976, 1008 с.

MSC2020 35Q79

Mathematical modeling of the temperature distribution inside the niobium nitride membrane based on the two-dimensional heat conduction equation

N. D. Kuzmichev, E. V. Danilova, M. A. Vacutin
National Research Mordovia State University