



Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem
Villamosmérnöki és Informatikai Kar

Tafferner Zoltán

Vertikális kialakítású VO₂ nanoszerkezetek vizsgálata

Characterization of vertical VO₂ based structures

KONZULENS

Dr. Neumann Péter Lajos
Dr. Mizsei János

A pályamunka lezárásának dátuma: 2023. 01. 05.

Tartalom

Absztrakt.....	1
Abstract.....	2
1. Bevezetés.....	3
2. Kísérleti elrendezések.....	3
2.1. Szimulációs eszközök.....	3
2.2. COMSOL Multiphysics 5.6	3
2.2.1. Elektromos áramok interfész	4
2.2.2. Hőáramlás szilárdtestekben	4
2.2.3. Joule melegítés	4
2.3. Vizsgált minta és mérőeszközök.....	5
3. Elméleti rész	6
3.1. Hővezetés nanoméretű eszközökben	6
3.2. Fázisátmenetek	8
3.2.1. Fém-szigetelő átmenet (MIT)	8
3.3. A VO ₂ fém-félvezető átmenete	9
3.3.1. Általános.....	9
3.3.2. Ellenállás-hőmérséklet karakterisztika.....	10
3.3.3. Feszültség-áram karakterisztika	11
3.4. A fázisátmenet tervezése	12
3.4.1. Átmeneti hőmérséklet.....	12
3.4.2. Hiszterézis-szélesség	13
3.5. VO ₂ rétegek leválasztási technológiái	13
3.6. Felhasználás elektronikai áramkörökben	14
3.7. Neuromorf oszcillátorok.....	14
3.8. Termikus elektromos logikai áramkörök (TELC – Thermal Electronic Logic Circuit)	15
3.9. Hot spot	16
4. Szimuláció	17
4.1. Anyagparaméterek	17
4.1.1. VO ₂	18
4.2. Stacionáris szimuláció.....	20
4.2.1. Szimulációs geometria, egyszerűsítő lépések	20

4.2.2. Határfeltételek	21
4.2.3. Végeselem háló	22
4.2.4. A stacionárius szimuláció eredményei	23
4.3. Tranziens szimuláció.....	31
4.3.1. Szimulációs geometria, egyszerűsítő lépések, anyagparaméterek.....	31
4.3.2. 1 μm -es geometria	35
4.3.3. 50 nm-es geometria	39
5. Mérési eredmények	39
6. Összefoglalás.....	43
Irodalomjegyzék	44

Absztrakt

Az elektronika az egyik legdinamikusabban fejlődő tudományterülete az elmúlt évtizedeknek. A félvezető eszközök egyre kisebbek, és egyre több található meg egy egységnyi felületű chipen. Lassacsckán már az eszközök működési határait feszegeti a méretcsökkenés, nem is beszélve a disszipálendő hőteljesítményről. Felmerül tehát a kérdés, hogy elvonatkoztassunk, és új jelenségeket vonjunk be az eszközök működésébe. Ennek egyik módja a hőmérséklet, hőenergia kihasználása, mint az információ hordozója. Erre egy lehetséges megoldást a VO₂ ad.

A VO₂ egy alacsony hőmérsékleten (67 °C) fém-félvezető átmenetet (MIT – Metal Insulator Transition) mutató anyag. Az átmenet során a vezetési tulajdonságok jelentősen megváltoznak, akár 4-5 nagyságrendnyi változást is mutatnak [1]. Az átmenet akár nanoszekundumos sebességgel is le tud zajlani, ami tovább növeli az anyag kihasználhatóságát elektronikai eszközökben [2]. A VO₂ MIT jelenségét már 1959-ben megfigyelték [3], és azóta is rengeteg kutatás alapját képezi.

A VO₂ felhasználása sokrétű lehet, például használható logikai áramkörök kialakítására, melyben a hőmérséklet az információ hordozójaként hasznosul [4]. A VO₂ segítségével lehetséges olyan oszcillátorokat kialakítani, melyek neuromorf áramkörökben használhatók [4-6]. VO₂ réteg egy kis térrészét egy kívánt termikus munkapont beállítására használva, létrehozható egy hot-spot, amellyel a környezetében elhelyezett közeli VO₂ alapú eszközök működése befolyásolható.

A dolgozatban vizsgált szerkezet egy Si hordozón növesztett termikus SiO₂ rétegre porlasztással leválasztott Pt elektróda (25 nm vastag) és erre reaktív porlasztással VO₂ (100 nm) vékonyréteg kerül. A VO₂ felületén a második, felső elektróda azonos módszerrel kerül kialakításra. Az elektródák egymást keresztben fedik. Működés során a vertikálisan kialakított VO₂ rétegben az áram gyakorlatilag csak az elektródák közti részen folyik, az áram Joule-hője pedig előidézi az MIT effektust.

A dolgozatban bemutatom az eszköz viselkedésének végeelem szimulációját, mintakészítését és elektromos mérését, valamint a kapott eredmények összehasonlítását.

Abstract

Electronics is one of the most dynamically advancing fields in modern science. In the past decades, semiconductor devices have been reduced in size again and again, fitting more devices on the same chip area. Soon we might be approaching the physical limitations of size-reduction, and heat dissipation is also proving to be a significant challenge. However, it is possible to include new phenomena in the working mechanisms of novel devices. One of these solutions could be using heat and temperature as information carriers. For this purpose, VO₂ could be utilized.

VO₂ is an oxide which shows a metal-insulator transition (MIT) at a relatively low temperature (67 °C). During the transition, the electrical properties of VO₂ change significantly (resistivity changes by a factor of 10⁴-10⁵) [1]. The phase transition can happen in a nanosecond timescale, further increasing usability in electrical circuits [2]. The MIT of VO₂ was first discovered in 1959 [3] and has been the topic of plenty of research since then.

VO₂ could be used in various ways. For example, it could be used in the construction of logic circuits utilizing temperature as the carrier of information [4]. VO₂ could also be used to construct oscillators, which could be used in neuromorphic circuits [4-6]. By using a small domain of a VO₂ thin film a temperature bias point could be set and a hot spot created, which could modify the behaviour of other VO₂ devices located nearby.

In this paper, a vertical VO₂ structure was investigated. Pt electrode (25 nm thickness) was deposited by sputtering on thermal SiO₂. A VO₂ (100 nm) thin film was deposited on the bottom electrode by reactive sputtering. The top electrode was deposited on the VO₂ by the same method. The electrodes cross each other perpendicularly. During operation, current flows only between the electrodes in the vertically structured VO₂ device, and the Joule-heat of the current initiates the MIT effect.

In this work, I present the finite element modelling, sample preparation and electrical measurement of the behaviour of the vertical structure. A comparison of the modelling and measurement results will be presented as well.

1. Bevezetés

Az elektronika, azon belül is a félvezető technológia napjaink leggyorsabban, legdinamikusabban fejlődő iparágai közé tartozik. Az elektronikai eszközök mérete állandó csökkenésben van, míg egyre több eszközt helyezünk el egy adott méretű chipen (az Intel és az AMD processzorai már 10 nm-es csíkszélesség alatt vannak). Ennek az intenzív méretcsökkenésnek köszönhetően a modern elektronika számítási kapacitása növekszik, azonban a méretcsökkenésnek vannak határai. Egyrészt, ha így folytatódik, akkor megközelíthetjük az eszközök működésének fizikai határait, ami ellehetetlenítené a további csökkenést. Másrészt, ahogy egyre több eszközt helyezünk el ugyanakkora chip felületen, egyre nagyobb lesz a chip által disszipált hő. A tradicionális hűtési technológiákkal (ventilátor és hűtőborda) csak véges mennyiségű (kb. 100 W/cm^2) hőteljesítményt tudunk elszállítani [7]. Ez azt jelenti, hogy új hűtési megvalósítások (pl.: folyékony fény hűtőközeg) nélkül nehéz kérdéssé válik az eszközök termikus menedzsmentje [8-9].

Felmerülhet a kérdés, hogy a rengeteg keletkező hőenergiát felhasználjuk az eszközeink működtetésében. Ennek egy lehetséges módja a VO_2 felhasználása. A VO_2 egy fém-oxid, mely fém-szigetelő átmenetet mutat relatív alacsony hőmérsékleten (kb. 67°C) [1, 10-11], ami lehetségessé teszi az elektronikus eszközökben történő felhasználását. Ilyen megoldások használatával lehetőség lenne azonos chip felületen több logikai funkciót megvalósítani, vagy épp új elven működő áramköröket kialakítani.

2. Kísérleti elrendezések

2.1. Szimulációs eszközök

A dolgozatban a szimulációk számítógépen és notebookon készítettem. A felhasznált számítógép és notebook adatai:

	CPU	RAM	GPU	Háttértár
Számítógép	Intel i7 4771	16 GB	Gigabyte R9 390	SSD
Notebook	Intel i5 1135G7	8 GB	NVIDIA MX 350	SSD

1. táblázat - A szimulációhoz használt hardver adatai

2.2. COMSOL Multiphysics 5.6

A COMSOL Multiphysics 5.6 egy multifizikai végelem elemző, megoldó és szimulációs szoftvercsomag. A szoftvert alkotó és karbantartó céget 1986-ban alapították, a szoftver egy

elterjedt eszköz a végelem szimuláció tárgykörében. Kifejezett erőssége a multifizikai szimuláció, amiben több fizikai jelenséget lehet összekapcsolni, hogy a végeredményben az együttes hatásuk látszódjon. A szimulációk során én is ezt a funkcionalitást használtam, a szoftverben az elektromos áramok (electric currents), hőáramlás szilárdtestekben (heat transfer in solids) és Joule-melegítés (Joule-heating) interfészeket használtam. A szoftver a szimulációs problémákat egy végelem módszer segítségével, numerikus módszerekkel oldja meg.

2.2.1. Elektromos áramok interfész

Az elektromos áramok interfész által megoldott egyenletek alakja stacionárius esetben:

$$\begin{aligned}\nabla \mathbf{J} &= \mathbf{Q}_{j,v} \\ \mathbf{J} &= \sigma \mathbf{E} + \mathbf{J}_e \\ \mathbf{E} &= -\nabla V\end{aligned}$$

Ahol $\mathbf{J}$ az áramsűrűség, $\mathbf{J}_e$ a külső áramsűrűség, $\mathbf{E}$ az elektromos térerősség és V a potenciálmező, $\mathbf{Q}_{j,v}$ pedig a töltés. Az egyenletek alakja időfüggő esetben:

$$\begin{aligned}\nabla \mathbf{J} &= \mathbf{Q}_{j,v} \\ \mathbf{J} &= \sigma \mathbf{E} + \mathbf{J}_e + \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} \\ \mathbf{E} &= -\nabla V\end{aligned}$$

2.2.2. Hőáramlás szilárdtestekben

Az interfész által megoldott egyenletek alakja stacionárius esetben:

$$\begin{aligned}\rho C_p \mathbf{u} \nabla T + \nabla \mathbf{q} &= \mathbf{Q} + \mathbf{Q}_{ted} \\ \mathbf{q} &= -k \nabla T\end{aligned}$$

Ahol ρ a sűrűség, C_p a fajlagos hőkapacitás állandó nyomáson, k a hővezetési együttható, T a hőmérséklet mező, $\mathbf{q}$ a hőfluxus vektor, $\mathbf{Q}$ a hőforrás, $\mathbf{Q}_{ted}$ a termoelasztikus csillapítás és $\mathbf{u}$ a translációs mozgáshoz tartozó sebességvektor. Az egyenletek alakja időfüggő esetben:

$$\begin{aligned}\rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} + \rho C_p \mathbf{u} \nabla T + \nabla \mathbf{q} &= \mathbf{Q} + \mathbf{Q}_{ted} \\ \mathbf{q} &= -k \nabla T\end{aligned}$$

Mind az elektromos, mind a termikus interfészben nyilvánvalóan csak időfüggő tagok jelennek meg a második esetben, ahol t jelöli az időt.

2.2.3. Joule melegítés

Az egyenletek alakja stacionárius esetben:

$$\rho C_p \mathbf{u} \nabla T = \nabla(k \nabla T) + \mathbf{Q}_e$$

$$Q_e = JE$$

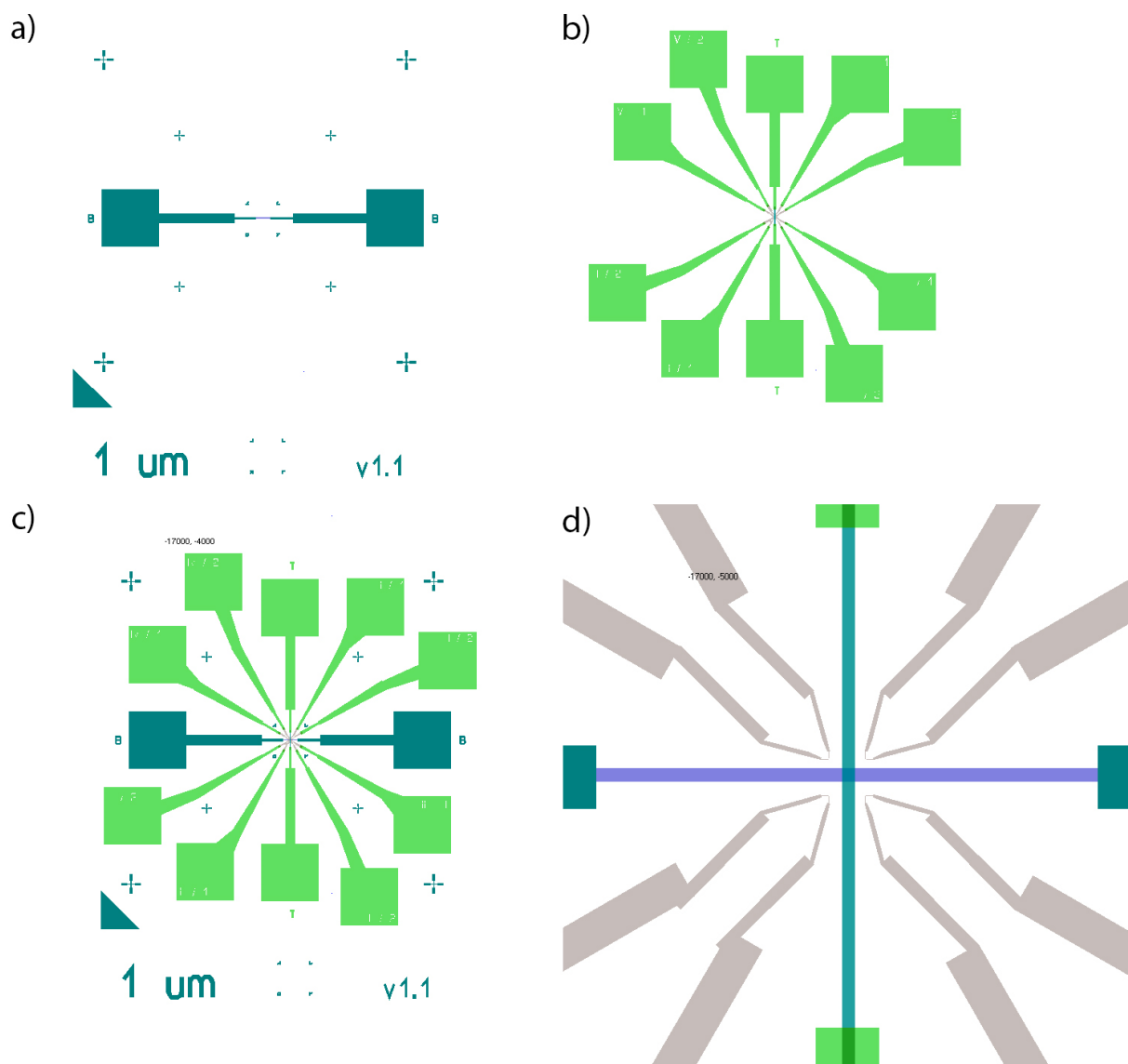
Ahol Q_e az elektromos melegítésből származó hőforrás. Tranziens szimulációs esetén:

$$\rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} + \rho C_p \mathbf{u} \nabla T = \nabla(k \nabla T) + Q_e$$

2.3. Vizsgált minta és mérőeszközök

A vizsgált minta egy Si hordozón létrehozott termikus SiO₂ rétegen létrehozott eszköz. A felhasznált maszkokat az 1. ábra mutatja. Az alsó elektróda egy porlasztással leválasztott Ti interfész rétegből (5 nm vastagság), és egy porlasztással leválasztott Pt rétegből áll (25 nm). Erre reaktív porlasztással került leválasztásra a VO₂ réteg, melynek vastagsága az elkészült eszközökön 140 és 180 nm között változik. A VO₂ rétegen a felső elektróda az alsóval megegyező módon került leválasztásra, interfész réteg nélkül. Ennek vastagsága 30 nm.

A mérések egy Keithley 2450 Sourcemeterrel készültek. A mérés vezérléséhez KickStart vezérlőprogram volt használva.



1. ábra – Az eszköz készítéséhez használt maszkok: a) Alsó elektróda (B jelölés a képen) b) Felső elektródák (T jelölés a képen) c) A teljes eszköz d) Ráközelítés az eszköz közepére. Vízszintesen látható az alsó elektróda, függőlegesen a felső elektróda

3. Elméleti rész

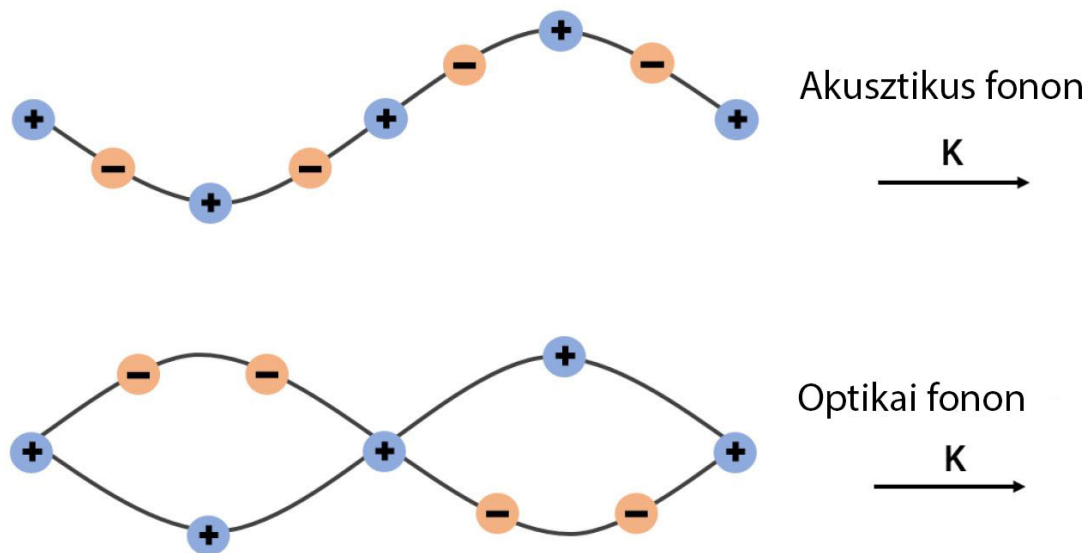
Ahhoz, hogy a VO₂ minta működését, a szimulációt tárgyaljuk, úgy gondolom, hogy szükséges az anyag működésének elméleti és mások által mért viselkedését tárgyalni.

3.1. Hővezetés nanométerű eszközökben

Ismeretes, hogy a hőenergia áramlásának három módja van: hősugárzás, hővezetés és konvekció. Jelen dolgozatban félvezető eszközökről beszélünk, ezért a hősugárzás és a konvekció csak elhanyagolható szerepet játszik. Egyrészt, ahhoz, hogy a konvekció jelentős legyen a félvezető eszközön belül, ahhoz anyagmozgásra lenne szükség. Ennek következtében a konvekció elhanyagolható lesz. A sugárzás azért hanyagolható el, mert a VO₂ eszközök viselkedésének vizsgált tartománya 100 °C alatt van, ahol a hősugárzás mértéke nem lesz számottevő. Ezek

szerint a félvezető eszközök esetén a hőenergia terjedésének legfontosabb mechanizmusa a hővezetés. Ennek fényében a szimulációk során az eszközön belül eltekintek a konvekciótól és a hősugárzástól.

Hővezetési folyamatokban elsősorban az elektronok és a fononok vesznek részt [12-13]. A hőmérséklet hatására az atomok a kristályrácsokban rezegnek. Ezek a rezgések elemi rezgésekre bonthatók, melyekhez impulzust és energiát rendelhetünk. Ez a hozzárendelés a fonon, ami egy a fotonhoz hasonló kvantumrészecske. Kezelhető hullámként és récskeként egyaránt [13]. A fononokat két részre oszthatjuk, akusztikus fononokra és optikai fononokra. A két csoport között a különbség, hogy az akusztikus fononok jelentősen gyorsabban terjednek a kristályrácsban. A hővezetési folyamatokban elsősorban az akusztikus fononok és az elektronok vesznek részt [12]. Optikai és akusztikus fonon egy ábrázolását mutatja az 2. ábra. Az ábrán látszik, hogy akusztikus fonon esetén a rácson azonos fázisban rezegnek, míg az optikai fonon esetén az ellentétes töltésű ionok ellentétes fázisban rezegnek.



2. ábra - Akusztikus és optikai fonon [14]

Azért fontos nanoméretű eszközöknél a fononokat említeni, mert az olyan eszközöknél, melyek mérete összemérhető a fononok közepes szabad úthosszával, a termikus folyamatok megfognak változni. Megjelenik a ballisztikus vezetés, azaz az eszközökön ütközés, kölcsönhatás nélkül tudnak a fononok és elektronok áthaladni [15]. Ennek következtében a szóródások többsége és a hő az eszközök határain fog keletkezni [12]. Ezek a folyamatok befolyásolhatják az eszközök termikus működését [4]. Mivel a dolgozatban vizsgált eszköz is nanométeres méret-tartományban található, ezért az említett kvantumos jelenségek már részt vehetnek a működés fizikájában. Ez eltérést okozhat a szimulációs eredmények és a mért adatok közt.

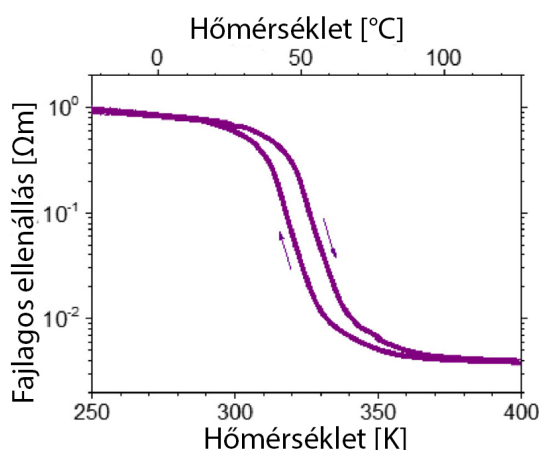
3.2. Fázisátmenetek

Az anyag fázisán egy olyan állapotát értjük, melyben bizonyos fizikai tulajdonságok jellemzőek rá. Például halmazállapot, kristályszerkezet, vezetési tulajdonságok stb. A környezeti paraméterek változtatásával az anyagok a fázisuk megváltoztatására kényszeríthetők. Ilyen paraméter lehet például a hőmérséklet vagy a nyomás.

Amennyiben a hőmérséklet változtatásával akarjuk elérni a fázisátmenetet, akkor szükség lesz az átmenet hőmérsékletén egy átmeneti energia közlésére. Amíg ezt az energiát közöljük, az anyagban egyszerre lesznek jelen olyan részek, melyek már az új fázisban vannak, és olyan részek, melyek még a régi fázisban. A hőmérséklet csak az átmeneti energia átadása után tud tovább nőni. A VO_2 fém-félvezető átmenete elsőfajú átmenet. Másodfajú átmenetek esetén a hőmérséklet folyamatosan tud nőni, és a fázisok közti átmenet nem ugrásszerűen, hanem folyamatosan történik.

3.2.1. Fém-szigetelő átmenet (MIT)

Fém-szigetelő átmenetről, vagy MIT-ről akkor beszélünk, mikor egy anyag két fázisában radikálisan különböző vezetési tulajdonságokat mutat. Az egyik fázisban az anyagok szigetelőkre jellemző tulajdonságokat mutatnak, míg a másik fázisban vezető tulajdonságokat. Ilyen fém-oxidok például: Ti_2O_3 (titánium-trioxid), VO (vanádium-oxid) és VO_2 (vanádium-dioxid) [3]. A fém-szigetelő átmenetet gyakran nevezik fém-félvezető átmenetnek vagy SMT-nek is (Semiconductor to Metal Transition). A dolgozatban az MIT és fém-szigetelő átmenet kifejezéseket fogom használni. Az általam vizsgált anyag átmenetére jellemző R-T karakterisztika a 3. ábraán látható.



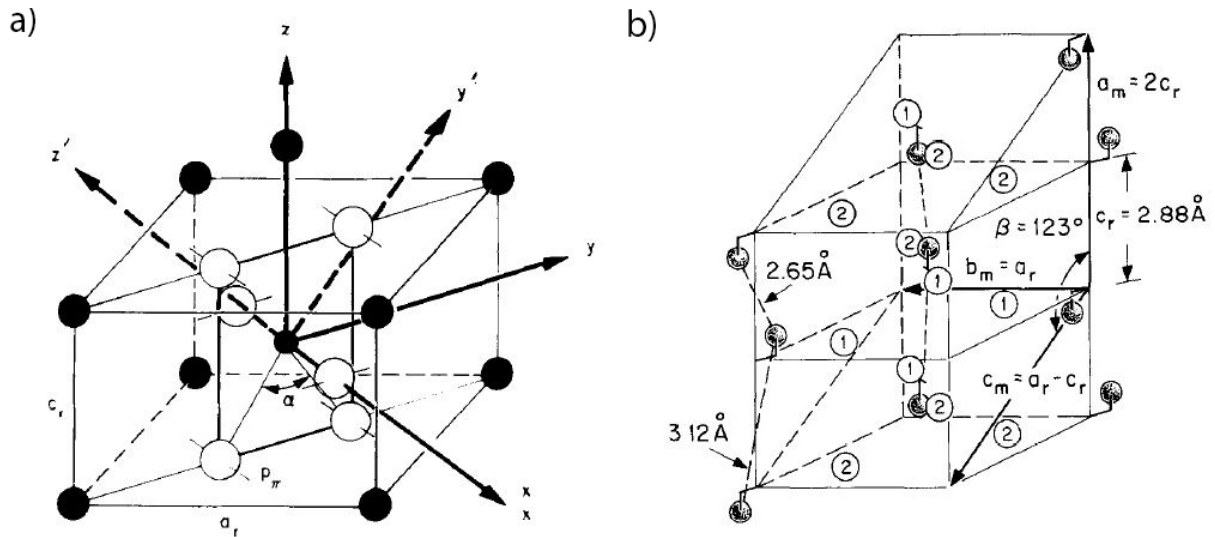
3. ábra – VO_2 -ra jellegzetes R-T karakterisztika [16]

3.3. A VO₂ fém-félvezető átmenete

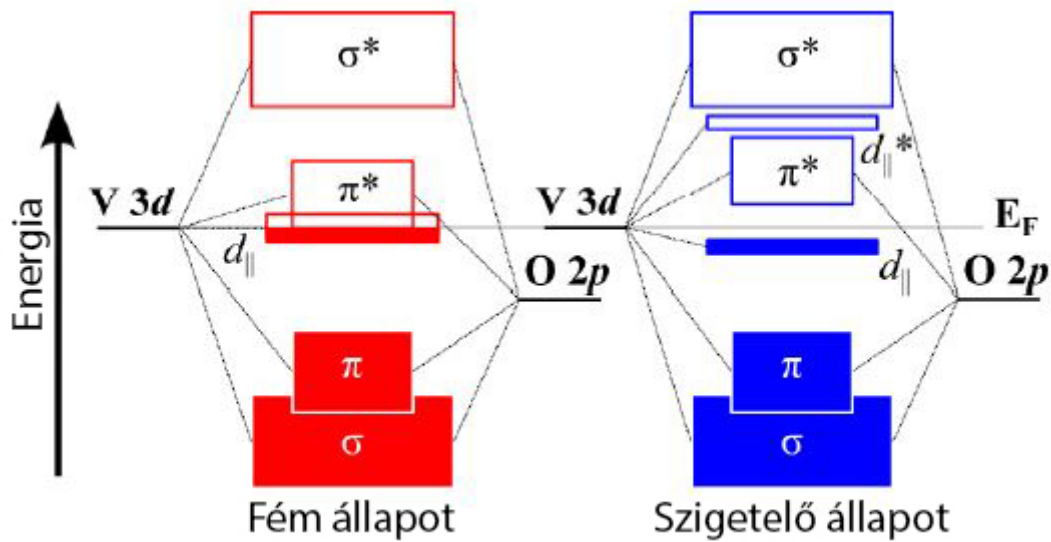
3.3.1. Általános

A VO₂ egy MIT-t mutató anyag, amelyet 1959-ben fedeztek fel [3], és azóta is rengeteg kutatás alapját képezi. Az átmenet relatív alacsony hőmérsékleten megy végbe (kb. 67 °C) [1, 4, 10, 16-22], nanoszekundumos időtartományban [2]. A VO₂-nak nem csak az elektromos, hanem az optikai, hővezetési tulajdonságai is jelentős változást mutatnak az MIT után [10, 23-25]. A hővezetési tulajdonságok változása akár termikus egyenirányítók kialakítására is megfelelő lehet [26]. Köszönhetően a kifejezetten alacsony hőmérsékleten lejátszódó MIT-nek a VO₂ jól felhasználható elektromos áramkörökben, legyen szó logikai áramkörökről [4, 27-28], neuromorf oszcillátorokról [4-6], vagy épp termikus kapcsolókról [2]. A VO₂ ellenállása a fázisátmenet során hiszterézist mutat, ami egy beépített memóriatulajdonságot is jelenthet a VO₂-ot felhasználó eszközökben. A VO₂ fázisátmenetét többféleképpen is elő lehet idézni (pl.: elektron injekcióval, elektromágneses sugárzással terahertz nagyságrendben vagy elektromos áram Joule-hőjével) [10].

A VO₂ két szilárd fázisa közül az egy monoklin fázis (P2₁/c), míg a másik egy rutil fázis (P4₂mmn). A kétfajta kristályrácsot a 4. ábra szemlélteti. A monoklin fázisban a VO₂ félvezetőként viselkedik egy 0,8 eV nagyságú tiltott sávval [29]. A [29]-ben Goodenough által kidolgozott elméleti magyarázat szerint a vezetési tulajdonságokban megjelenő különbséget az okozza, hogy a 3d elektronpálya a rutil állapotban degenerált. Mikor elmozdulnak egymáshoz képest az atomok a fázisátmenet során, akkor a kölcsönhatásuk is más lesz, aminek köszönhetően megszűnik a degeneráció és a 3d-hez tartozó sáv két külön energiasávra válik. Ebben az esetben a Fermi-szint már nem esik bele az energiasávba, aminek köszönhetően monoklin fázisban a VO₂ félvezető jelleget mutat (5. ábra). Az, hogy ezt a változást Peierls effektus, vagy töltéshordozók közti kölcsönhatások okozzák, a szakirodalomban még nem egységesen megválaszolt kérdés [11].



4. ábra - A VO_2 kristályrácsai [29]: a) Rutil fázis b) Monoklin fázis

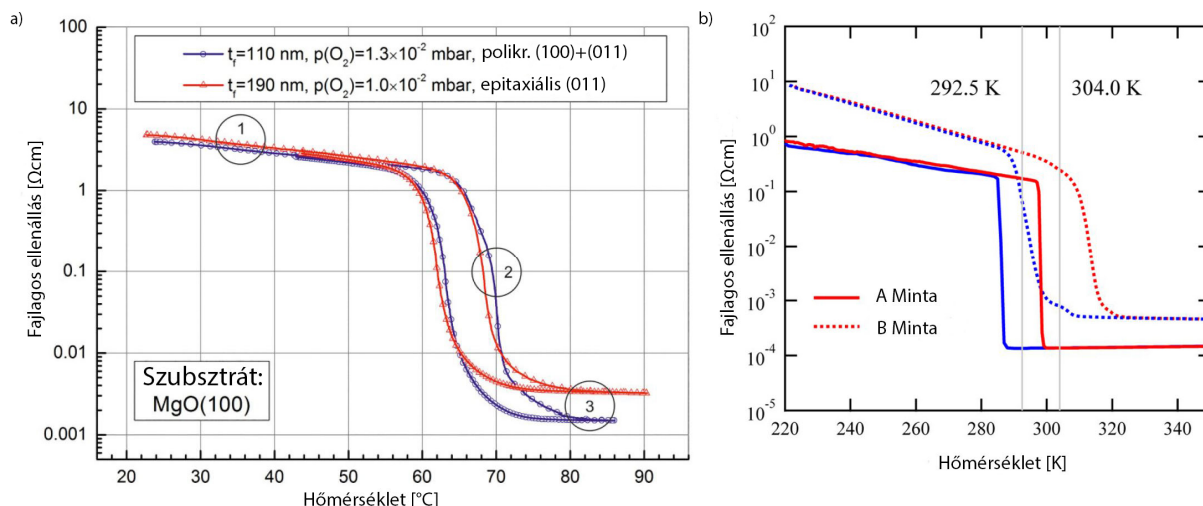


5. ábra - A VO_2 energiaszintjeinek változása az MIT során [1]

3.3.2. Ellenállás-hőmérséklet karakterisztika

A VO_2 MIT-jának leglátványosabb oldala az ellenállás drasztikus megváltozása. Az anyag egy szigetelő fázisból indul, amire leválasztás módjától függően 10^1 - $10^2 \Omega\text{cm}$ ellenállás jellemző, és az MIT után egy vezetőkre jellemző, 10^{-3} - $10^{-2} \Omega\text{cm}$ ellenállást is elérhet [4]. Az ellenállás akár 4-5 nagyságrendnyi ugrást is mutathat [1]. Természetesen attól függően, hogy milyen technológiával választjuk le, az ellenállás ennél valamivel kisebb vagy nagyobb is lehet. Egy porlasztással leválasztott réteg például sokkal kevésbé lesz egységes, sokkal több kristályszemcsével, mint egy epitaxiával leválasztott réteg. A VO_2 ellenállások jellemző R-T karakteristikáját a 6. ábra szemlélteti.

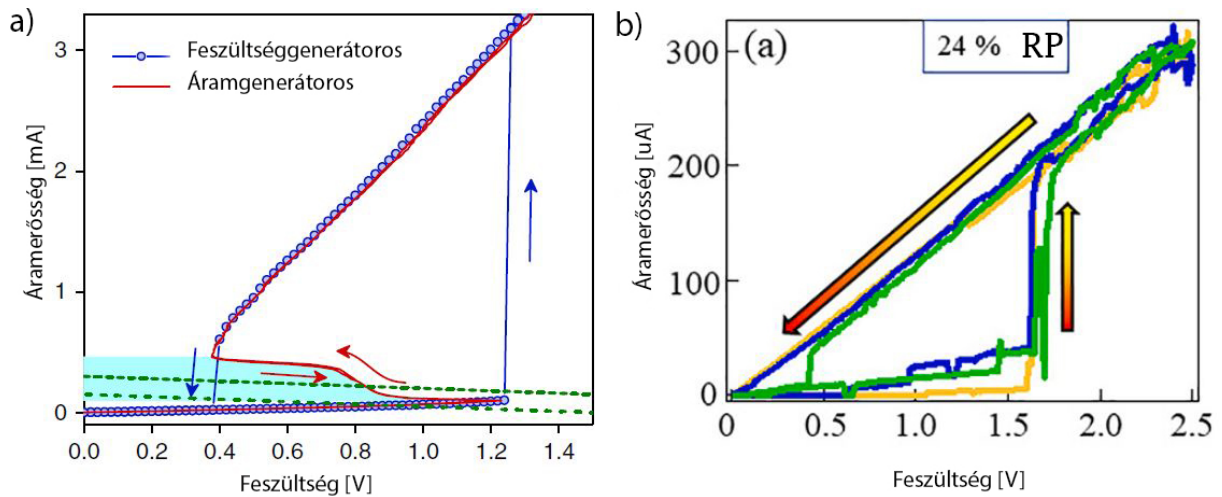
Az átmenet hiszterézist mutat, vagyis nem ugyanazt a görbét járja be melegítés és hűtés hatására. Legyen a monoklin-rutil átalakulás hőmérséklete T_1 és a rutil-monoklin átalakulás hőmérséklete T_2 . Ebben az esetben $T_1 \neq T_2$ és $T_2 < T_1$. A hiszterézis szélessége $T_H = T_1 - T_2$. Az átmenet hőmérséklete $T_{MIT} = \frac{T_1 + T_2}{2}$. Ha a VO_2 ellenállást megfelelő elektromos kapcsolásban használjuk, akkor a hiszterézis egy beépített memóriatulajdonságot jelenthet.



6. ábra – Különböző VO_2 minták R - T karakterisztikái: a) PLD-vel leválasztott minták, 1, 2 és 3 számok a szigetelő, átmeneti és vezető állapotokat jelölik [4] b) MBE-vel (Molecular Beam Epitaxy) leválasztott VO_2 rétegek R - T karakterisztikái [1]

3.3.3. Feszültség-áram karakterisztika

A VO_2 -ban nem csak az érdekes, hogy az ellenállása a hőmérséklet hatására lecsökken, hanem az is, hogy ezt a hőmérsékletváltozást el lehet érni a VO_2 ellenálláson átfolyó áram Joule-hőjének segítségével [19, 28, 30]. Az ellenálláson az áramot növelve először a feszültségesés lineárisan nő, ahogy azt egy általános ellenállástól várhatjuk. Amikor elérjük az MIT átmenetet, akkor az ellenállás jelentősen lecsökken, aminek következtében a feszültség is jelentősen csökken. Az átmenet után a feszültség ismét lineárisan fog nőni, de jóval kisebb meredekséggel. A jelenséget a 7. ábra mutatja. Az áram csökkentésével az MIT nem azonos áram mellett játszódik le, hanem hiszterézist mutat, és az előidéző áramnál kisebb áramerősség is elég ahhoz, hogy fenntartsa a vezető állapotot [27]. Ez a viselkedés a tirisztorhoz hasonló. Természetesen a hiszterézises viselkedést nem csak áramgenerátoros, hanem feszültséggenerátoros meghajtással is meg lehet figyelni [4, 5, 19, 31]. Az, hogy egészen egy küszöbáram fennállásáig fennmarad a fémes állapot, arra utal, hogy az állapot előidézésében a hőmérsékleten kívül más hatások is szerepet játszanak [2, 10, 19, 31].



7. ábra – VO_2 ellenállás I - V karakterisztikái a) [5] b) [31]

3.4. A fázisátmenet tervezése

A VO_2 felhasználható lehet elektronikus eszközökben. Bizonyos felhasználások esetén, mint például termikus kapcsoló megvalósításakor csak az átmeneti hőmérséklet és az ellenállásváltozás nagysága lesz fontos paraméter, míg más felhasználásokban, például rezgőkörök esetén a hiszterézis szélességét is szükséges ismernünk. Ennek következtében a fázisátmenet tulajdonságainak beállítása fontos lesz.

3.4.1. Átmeneti hőmérséklet

Az átmenet hőmérsékletét (T_{MIT}) korábban úgy definiáltam, mint a monoklin $\rightarrow$ rutil és rutil $\rightarrow$ monoklin átmenetekhez tartozó hőmérsékletek átlaga. A szakirodalomban több módszer is fellelhető az átmenet hőmérsékletének befolyásolására. Az egyik módszer a rácsfeszültség létrehozása a leválasztott rétegben [11, 18]. T_{MIT} csökken a rétegvastagság növelésével. A vastagabb rétegben kisebb feszültség jön létre, mint a vékonyrétegekben, mivel távolodva a leválasztási felülettől a rácsállandó különbség eltűnik [18]. A rácsfeszültség kapcsán meg kell jegyezni, hogy az fázisátmenet a VO_2 rácsának jelentős átrendeződésével jár. Ennek következtében az átmenet után feszültség jön létre. Az anyag relaxálódása repedésekhez vezethet, melyek után az elektromos tulajdonságok jelentősen megváltozhatnak [16, 32].

Alternatív megoldás lehet T_{MIT} beállítására az oxigénkoncentráció csökkentése a leválasztott vékonyrétegben. A VO_2 -ban az oxigénatomok számát csökkenteni lehet, ha reaktív porlasztás során csökkentjük az oxigén parciális nyomását [10]. A harmadik módszer az átmeneti hőmérséklet csökkentésére az adalékolás lehet. Tipikus adalékatom a volfrám, mellyel jelentősen csökkenteni lehet az átmenet hőmérsékletét (akár 17°C -ra [23]), de előfordulnak más adalékok is [2, 10, 23, 33, 34]. Ge adalék használatával T_{MIT} növelhető, akár a $T_{\text{MIT}} > 90^\circ\text{C}$ tartományig

[35]. Természetesen az adalékolás alkalmazásakor figyelni kell, hogy a leválasztott, adalékolt réteg elektromos tulajdonságai megfelelők maradjanak.

3.4.2. Hiszterézis-szélesség

Amellett, hogy megfelelő hőmérsékleten kell lejátszódjon az MIT jelenség, az sem mindegy, hogy mekkora hőmérséklettartományon megy végbe. A hiszterézis szélességét a szakirodalom elsősorban a rétegvastagsággal, kristályszemcsemérettel hozza kapcsolatba.

A leválasztott VO₂ rétegek fázisátmenete az ellenállás nagymértékű megváltozását mutatja, azonban a változás egy relatív széles (pl. 10 K) hőmérséklettartományon megy végbe. Ezzel szemben megfigyeltek olyan rendszereket is, ahol az átmenet kifejezetten abrupt, ugrásszerű, akár 1 K-es [10]. A magyarázat [10, 24] alapján a következő. A leválasztott rétegben található kristályszemcsék, melyeknek az átmenete abrupt, viszont a hőmérséklete különbözik. Ezek a szemcsék a melegítés hatására egyesével szenvednek fázisátalakulást. A görbe, amit mérni tudunk ezeknek az átmeneteknek az „eredője”. Az elméletet megerősíteni látszanak azok a mérések, ahol nagyon vékony rétegeknél az átmenet nagyon szűk hőmérséklettartományon megy végbe [10, 18]. Más források azt figyelték meg, hogy a hőmérsékletet lassan növelve az átmenet ugrásokban megy végbe, nem folytonosan, valamint az átmenet közben a kristály bizonyos részein megfigyelhetők a különböző fázisok [16, 22]. Megfelelően kicsi, nanoméretű minták esetén el lehet érni, hogy ne alakuljanak ki a rétegben különböző fázisú domének, ami szűk hiszterézishez vezet [11].

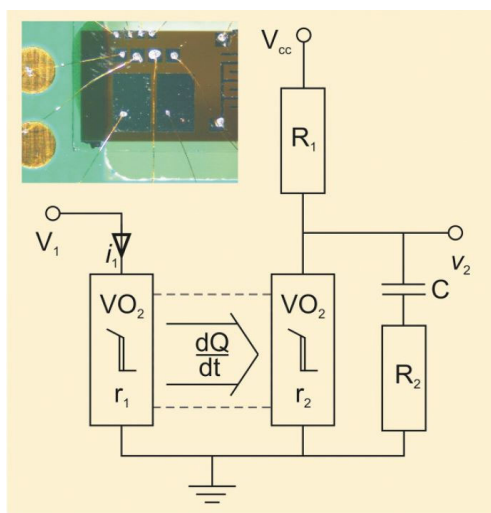
3.5. VO₂ rétegek leválasztási technológiái

VO₂ rétegek leválasztásával már évtizedek óta foglalkoznak. Ennek köszönhetően a kutatók számára rengeteg lehetőség áll rendelkezésre. PVD, CVD, szol-gél és hidrotermikus technológiák használatára egyaránt van lehetőség [17]. Mivel a különböző leválasztási technológiák esetén különböző vezetési tulajdonságok állhatnak elő a leválasztott rétegben [6], ezért fontos, hogy az alkalmazásnak megfelelően legyen megválasztva a technológia. A felhasznált szakirodalomban leggyakrabban használt eljárások a reaktív porlasztás [17-19, 35-36] és a PLD (Pulsed Laser Deposition) [4, 16, 26, 33], de MBE (Molecular Beam Epitaxy) [1] eljárás is előfordult.

3.6. Felhasználás elektronikai áramkörökben

3.7. Neuromorf oszcillátorok

A VO₂ oszcillátor készítésével a szakirodalomban már foglalkoztak [4-6]. A létrehozott neuromorf eszközök lehetőséget biztosíthatnak arra, hogy a CMOS technológián megvalósított neuromorf cellákat leváltsuk, hatékonyabb működést érve el. [4-5]-ben a szerzők egyaránt sikeresen demonstráltak neuronokra jellemző működést. Mindkét forrásban sikerült előállítani egy VO₂ ellenállás segítségével olyan elrendezést, melynek a kimenete jól megfelelt a neuronoknál megfigyelhető akciós potenciálnak. [5]-ben a szerzők emellett 22 másik, a neuronokra jellemző jelalakot is demonstrálni tudtak. Egy VO₂ oszcillátor áramköri elrendezését az 8. ábra mutatja.



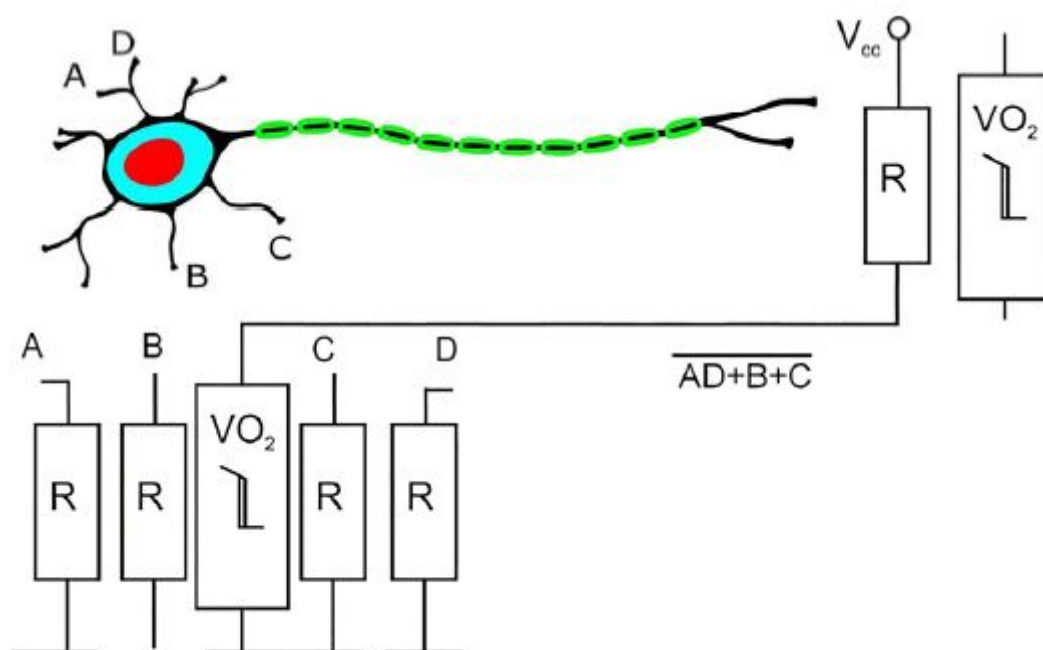
8. ábra - Oszcillátor áramkör. A felső sarokban az áramkör fényképe látható [4]

Azt, hogy a VO₂ miért ilyen alkalmas a neuromorf memrisztorok létrehozására a termikus jelterjedés, és a neuronok közti kémiai jelterjedés hasonló jellegére vezethető vissza. Először véve a termikus esetet, $F_Q = -k \frac{dT}{dx}$, ahol F_Q a hőfluxus, k a hővezetési együttható, T a hőmérséklet és x a koordináta. A kémiai fluxusra: $F_C = -D \frac{dC}{dx}$, ahol F_C a kémiai fluxus, D a diffúziós együttható, C a kémiai koncentráció és x a koordináta [4]. Látható, hogy a két egyenlet alakra azonos, ami vezethet a hasonló működéshez két termikusan csatolt VO₂ ellenállás és a neuronok dendritjei között. Az elektromos és biológiai rendszerek közti hasonlóságot nem csak a VO₂ esetén, hanem más elektromos rendszerekben is megfigyelték, sőt kihasználták például növények idegrendszerében növesztett áramkörökben [37].

A VO₂-vel készített memrisztorok alkalmasak lehetnek arra, hogy neurális rendszerekben működjenek. Amennyiben a neurális rendszer egy CMOS technológián elkészített processzor egységgel együtt kerül elhelyezésre, szükséges lehet az átmenet hőmérsékletének növelése [5].

3.8. Termikus elektromos logikai áramkörök (TELC – Thermal Electronic Logic Circuit)

Ahogy azt már korábban is említettem a VO₂ lehetőséget biztosíthat arra, hogy a hőmérsékletet, mint az információ hordozóját tudjuk használni logikai áramkörökre. Az olyan logikai áramkört, ami egyszerre elektromos és termikus jeleket is felhasznál TELC-nek nevezzük [4, 28]. A 3.8 bekezdés további részében [4] alapján bemutatom a termikus elektromos logikai áramkörök működését. A TELC kapu sematikus rajza az 9. ábraán látható.



9. ábra - TELC áramkör és a neuromorf jelleg szemléltető rajza [4]

A termikus elektromos logikai áramkörök mindig tartalmaznak egy VO₂ ellenállást (ami kapcsolóként működik) és egy felhúzó ellenállást. Emellett pontosan annyi melegítő ellenállást tartalmaznak még, ahány bemenettel rendelkeznek. Amikor nincs gerjesztés a bemeneteken, a VO₂ ellenállás szigetelőként működik. Ennek következtében a VO₂ ellenálláson és a felhúzó ellenálláson nem folyik áram, a kimenet magas szintet mutat. Amennyiben a bemeneteket gerjesztjük, azok az ellenállások hőt fognak termelni. Ez a hő a VO₂-ot az MIT hőmérséklet fölé melegíti, amittől az vezetni kezd, ezzel lehúzáva a kimeneti pont potenciálját. Attól függően, hogy a bemeneti ellenállásokat mennyire közel helyezzük el a VO₂-hoz szoros vagy laza termikus csatolást tudunk elérni. Ennek eredménye, hogy különböző kombinációkban lehet gerjesztetni a bemeneteket, hogy a kimenet kapcsoljon. Például legyen az A és B bemenet szorosan, a

C és D bemenet lazán csatolva. Ebben az esetben az A és B bemeneteket önállóan gerjesztve elérjük a kapcsolást, viszont C és D csak együttesen tudja kellően felmelegíteni a VO₂-t. Figyelembe véve, hogy a VO₂-ból az említett módon készített kapu természetéből adódóan invertálja az eredményt, a kapott logikai kapcsolás: $\overline{A + B + CD}$. Természetesen, ahogy azt a konvencionális logikai kapuknál is tapasztalhattuk, a kapuk kimenetei használhatók egymás bemeneteiként.

A VO₂ TELC eszközökkel kapcsolatban érdemes megjegyezni, hogy a neuromorf analógia itt is fennáll. Ahogy azt korábban a rezgőkörnél is írtam, a termikus jelenségekre jellemző diffúziós folyamatok hasonlóak az emberi idegekben található kémiai diffúziós folyamatokhoz. A TELC-ek esetén az analógia még tovább vezethető, mivel a jelet rövid távon a diffúziós, termikus jelenségek viszik (mint az idegsejt esetén a dendritek kapcsolata), hosszabb távon pedig az elektromos jelek (mint az axon).

A TELC kapu válaszáinak nagysága arányos a bemenetre érkező gerjesztés nagyságával (hiszen a VO₂ ellenállás értéke és így a lehúzás mértéke erősen függ a gerjesztés nagyságától), tehát a kapu működése analóg. A TELC emellett digitális és párhuzamos módon is működik, mivel a bemenetek megfelelő kombinációját, illetve megfelelő csoportjait gerjesztve választ lehet kiváltani. Végezetül a kapu szekvenciálisan is működik. Amennyiben a bemenetere a termikus időállandón belül több küszöb alatt gerjesztés is érkezik, a kimeneten válasz jelenhet meg.

A neuromorf TELC áramkörök felhasználhatók lehetnek olyan céleszközökben, melyek az emberi agyhoz hasonló módon igyekeznek megoldani számítási problémákat (pl. neurális hálók üzemelése). Szintén felhasználhatók lehetnek fázisátalakuláson alapuló memóriák kialakítására. Másodfajú átmenettel működő több bit tárolására alkalmas termikus memóriacellát már hoztak létre [38].

3.9. Hot spot

A VO₂ felhasználásakor szóba jöhet az is, hogy a VO₂ egy részét használjuk arra, hogy a réteget melegítsük. Ezzel lehetőség van egy termikus munkapont beállítására a környező áramköröknek. A gerjesztés változtatásával a munkapont eltolható, amivel a létrehozott félvezető eszközök működését befolyásolni lehet. Jelen dolgozat témája ennek a funkcionalitásnak a feltérképezése egy vertikális kialakítású eszköz vizsgálatával.

4. Szimuláció

A dolgozatban vizsgált eszköz viselkedését végeelem szimulációval modelleztem. Sajnos nem álltak rendelkezésre célszámítógépek, ezért az erőforráskihasználás érdekében közelítésekkel kellett élni. A szimulációk kapcsán először az anyagparaméterek kiválasztását fogom prezentálni, valamint a modellt egyszerűsítő lépéseket, majd a szimulációs eredményeket.

Az eszköz működéséről először egy stacionárius szimuláció készült. A szimulációt két vég-helyzetben hajtottam végre: szigetelő állapot és félvezető állapot. A stacionárius szimuláció célja, hogy a tranziens szimulációhoz az eredmények fényében szűkíteni lehessen a modellparamétereket. A másik cél, hogy következtetni engedjen arra, hogy várható-e fém-félvezető átmenet a működés során. A szimulációkat áramgenerátoros meghajtással végeztem.

4.1. Anyagparaméterek

A pontos szimulációk futtatásához az anyagparaméterek megfelelő megválasztására van szükség. Az olyan anyagoknál, amik beépítettek a COMSOL 5.6 szoftver félvezető és MEMS moduljaiban ez egyszerű, viszont a VO_2 esetén problémás, mivel nincsen beépített anyag. Így szakirodalom és mérések alapján szükséges a szimulációkat futtatni. A Si, SiO_2 és Pt esetén a COMSOL MEMS moduljában található anyagokat tudtam használni. Az adatok összefoglalva a 2. táblázatban láthatók.

	Sűrűség [kg/m ³]	Hővezetőképesség [W/(m*K)]	Fajlagos hőkapacitás [J/(kg*K)]	Elektromos vezetőképesség [S/m]	Dielektromos állandó
Si	2329	130	700	-	-
SiO_2	2200	1,4	730	-	-
Pt	21450	71,6	133	8,9e6	-

2. táblázat - Szilícium, szilícium-dioxid és platina szimulációs paraméterei

Figyelembe véve, hogy a Si és a SiO_2 doménekben nem tud jelentős áram kialakulni, az elektromos szimulációkból kihagyhatók. Ennek fényében az elektromos tulajdonságok megadása nem szükséges.

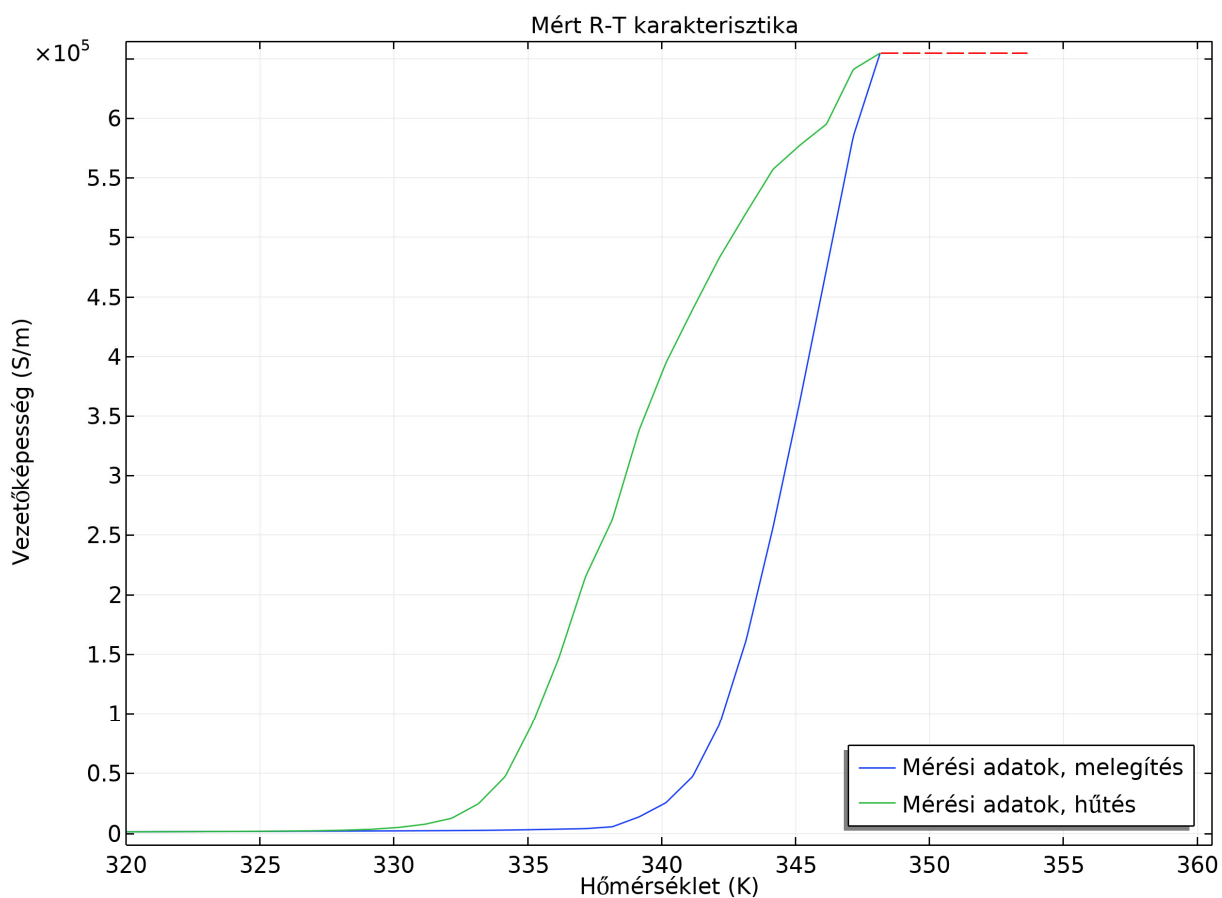
Mivel a Pt egy jó elektromos vezető, ezért a COMSOL-ban nem szükséges a relatív dielektromos állandójának meghatározása (mivel a Pt domén szélén előírt a potenciál).

4.1.1. VO₂

A VO₂ esetén a következő paraméterek meghatározására van szükség: ellenállás, dielektromos állandó, hővezetési együttható, fajlagos hővezetés, fajlagos hőkapacitás és sűrűség.

4.1.1.1. Elektromos paraméterek

Az elektromos tulajdonságait a VO₂-nak már évek óta kutatják, így a szakirodalomban rendelkezésre állnak mért értékek. Problémát jelent a megfelelő érték kiválasztásánál az, hogy a különböző leválasztási technológiák, különböző szubsztrátok eltérő vezetőképességű rétegeket eredményeznek [25]. A dolgozatban korábban a tanszéken mért adatot használok, ami a leválasztott rétegre érvényes. A mért értékeket a 10. ábra mutatja melegítés és hűtés folyamatokra. A stacionárius szimulációhoz használt értékek: 293,15 K-en 699 S/m és 348,15 K-en 654664 S/m. Az előbbit használtam a szigetelő állapotú szimulációhoz, utóbbit a vezető állapotú szimulációhoz. A tranziens szimulációk esetén a mért adatokra függvényeket illesztettem, és azt használtam fel a szimuláció futtatásához. A felhasznált adatok jó egyezést mutatnak a szakirodalmi értékekkel [1, 39-40].



10. ábra - Mért fajlagos vezetőképesség értékek a VO₂ mintákon

A dielektromos állandó értékére nem áll rendelkezésre mérés a mintáról, így azt a szakirodalom alapján kell megadni. A szakirodalmi adatokból az derül ki, hogy az átmenet során a dielektromos állandó növekszik, ahogy azt várnánk egy fémes viselkedésű anyagtól (fémek dielektromos állandója végtelenhez tart) [20, 41-42]. A dielektromos állandó az ellenálláshoz hasonlóan hiszterézist mutat. A szimulációhoz felhasznált értékek 36 szigetelő állapotban és 66000 vezető állapotban [20]. A tranziens szimuláció során a dielektromos állandó változásától a konvergencia javításának érdekében eltekintek, értékét konstans 36-nak veszem.

4.1.1.2. Hővezetési paraméterek

A hővezetés az ellenállásnál jelentősen kevesebb kutatásban található meg. Az irodalomban egységesen elfogadják, hogy változik a hővezetési együttható az MIT hatására és hiszterézist mutat [23, 25-26, 36, 39]. A források közt előfordul, ahol a hővezetési együttható csökkenését figyelték meg az MIT során [25], míg más írásokban a hővezetési együttható növekedését figyelték meg [23, 26, 36, 39]. Különböző rétegek esetén különböző nagyságú hővezetési együtthatókat figyeltek meg, például a Hamaoui et al. [26] által készített és mért PLD-vel leválasztott rétegek esetén jelentősen nagyobb (kb. 1 nagyságrenddel), mint az Oh et al. [36] által mért porlasztott rétegek esetén. Mivel a dolgozatban egy reaktív porlasztással leválasztott VO₂ réteg működését vizsgálom, ezért a [39]-ben kidolgozott modell értékeit használom. A modellből származó értékek jó egyezést mutatnak a porlasztott VO₂ rétegekből származó adatokkal [25, 36]. A szigetelő állapotban használt érték 3,6 W/(m*K), a vezető állapotban használt érték 6 W/(m*K). A tranziens szimuláció során a modell konvergenciáját segítő a hővezetési együttható hiszterézisétől eltekintek, a szigetelő állapothoz tartozó értéket használom.

A hőmérsékleti szimuláció során a hőkapacitás értéke is szükséges. A VO₂ hőkapacitását szigetelő állapotban 630 J/(kg*K)-nek, vezető állapotban 756,69 J/(kg*K)-nek veszem [39] alapján. A [39]-ben készített matematikai modell jó egyezést mutat a mért értékekkel [43].

A VO₂ sűrűségét 4,67 g/cm³-nek veszem [44]. Az adatok összefoglalva 3. táblázatban láthatók.

VO ₂	Sűrűség [kg/m ³]	Hővezetőképesség [W/(m*K)]	Fajlagos hő- kapacitás [J/(kg*K)]	Elektromos vezetőképesség [S/m]	Dielektromos állandó
Szigetelő	4670	6	756,69	654664	66000
Vezető	4670	3,6	630	669	36

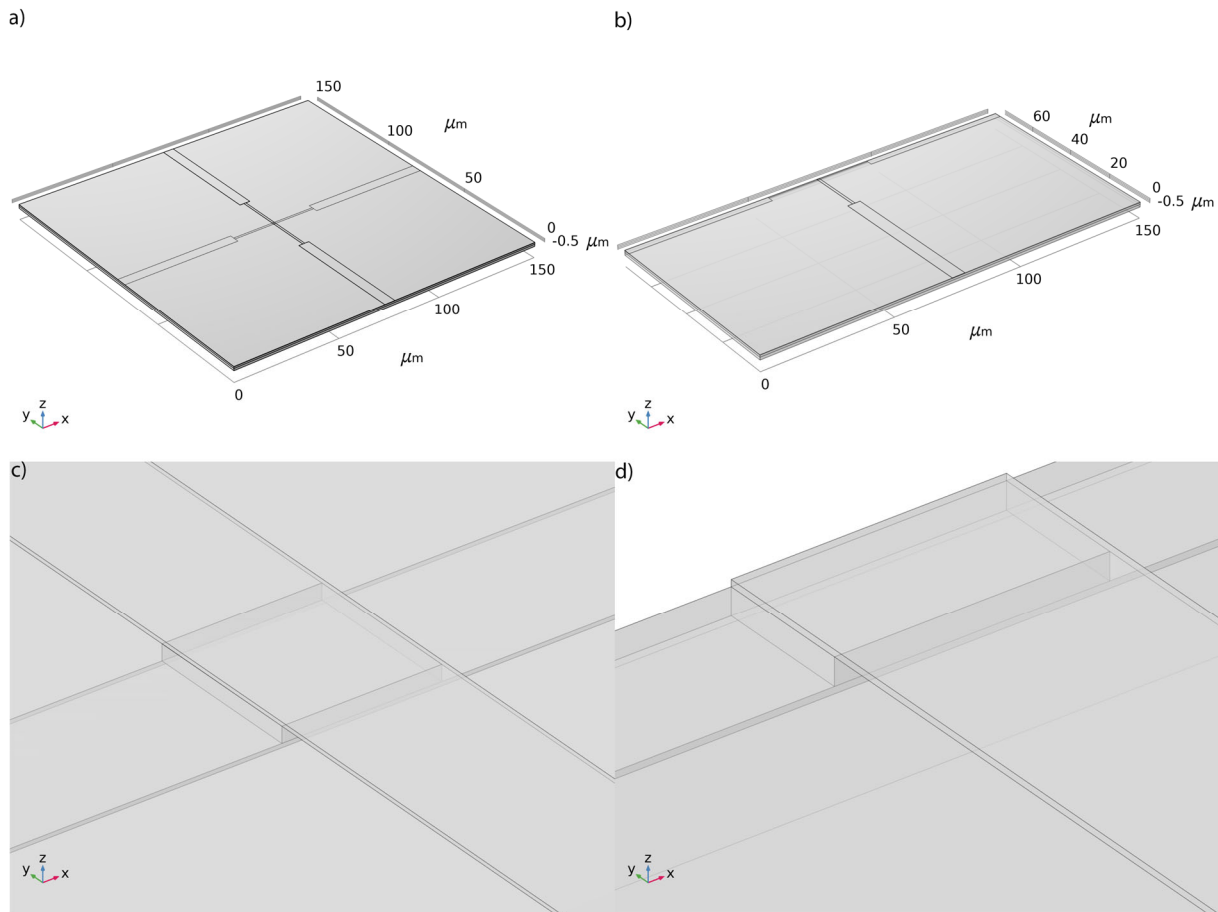
3. táblázat - A VO₂ szimulációs paraméterei (stacionárius eset)

4.2. Stacionáris szimuláció

4.2.1. Szimulációs geometria, egyszerűsítő lépések

A stacionárius szimulációk során a geometriát egy $150 \times 150 \mu\text{m}$ -es részére szűkítettem az eszköznek. Emellett kihasználom az eszköz szimmetriáját, és csak a modell felét szimulálom szimmetrikus határfeltételek alkalmazásával. A szimulációban $1 \mu\text{m}$ Si-ot veszek figyelembe, és 750 nm SiO_2 -t. Az elektródákat 25 nm vastag Pt-nek veszem. A VO_2 réteget úgy alkotom meg, hogy az elektródák közt 100 nm vastag legyen (aktív rész), az elektródákon kívül pedig 125 nm . Erre azért van szükség, mert a minta felületi hullámosságától eltekintek (amit az alsó elektróda okozna). A 25 nm vastagságtöbblet az elektródákon kívül valószínűleg elhanyagolható különbséget okoz csak az elektromos viselkedésben. A geometriát az 11. ábra mutatja.

A szimuláció során erőforrásmenedzsment szempontból a multifizikai szimulációt két elválasztott lépésben oldom meg. Először a szimulátor megadja az elektromos mezőket, majd a termikus adatokat számolom. Ebben az esetben, hogy a rendelkezésre álló számítógépek CPU teljesítménye, illetve RAM mennyisége nem fog szűk keresztmetszetet okozni a számítások során. Természetesen ez a megoldási módszer vihet pontatlanságot a szimulációba. Mivel a stacionárius szimuláció célja elsősorban megtudni, hogy milyen mértékben szűkíthető a geometria a tranziens szimulációhoz, ezért ez a pontatlanság megengedhető.



11. ábra - Stacionárius szimulációs geometria: a) Geometria szimmetria nélkül b) Geometria szimmetriával c) Aktív rész szimmetria nélkül d) Aktív rész szimmetriával

4.2.2. Határfeltételek

A szimuláció futtatásához a szimulációt megfelelő határfeltétekkel kell ellátni. A szimulációkban használt határfeltételek: elektromos szigetelés, földelés, gerjesztés, hőmérséklet, hőfluxus. A határfeltétek megfelelő használatával a probléma kellően specifikálható, ami megoldhatóvá teszi.

Elektromos szigetelés feltételt írtam elő a SiO_2 felületére. Ezzel erőforrást tudtam megtakarítani, mivel a SiO_2 -t kizárja az elektromos szimulációból. Ezt megtehetem, mivel a vezetőképessége nagyságrendekkel kisebb a Pt vagy a VO_2 vezetőképességénél, így feltételezhető, hogy nem alakul ki benne számottevő áram.

Földelés és gerjesztés feltételek előírásával a nulla potenciálú felületet tudom előírni (alsó elektróda megfelelő felülete), illetve a gerjesztő potenciált (felső elektróda megfelelő felülete). A szimulációk futtatásakor áramgenerátoros meghajtást írtam elő.

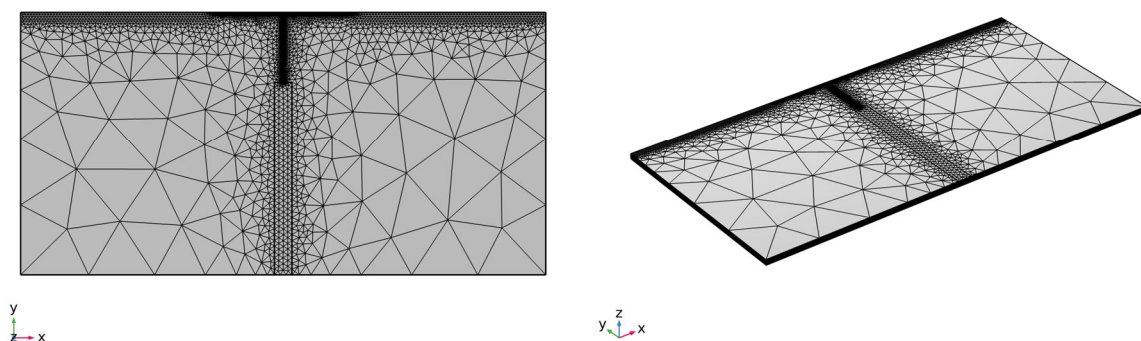
A hőmérséklet előírása a földpotenciálhoz hasonló. Feltételezem, hogy a termikus jelenségek lecsengenek a Si alsó határfelületén, illetve az eszköz kerületén. Ezeken a felületeken 293,15 K hőmérsékletet (20 °C) írtam elő.

A többi felületen hőfluxust írtam elő. Ez azért szükséges, mert ha nem adok a modellnek lehetőséget a hőenergia leadására, akkor nem tud kialakulni egyensúlyi állapot, és így nem lesz megoldható a modell. A hőfluxust egy hőátadási együtthatóval modellezem a levegő felé. Tipikusan $10 \text{ W}/(\text{m}^2 \cdot \text{K})$ -t szokás használni a levegő hőátadási tényezőjére, de a szakirodalmi forrásokban azt találtam, hogy a szimulációk során használandó érték a mikrométeres mérettartományban növekszik [45-49]. Ennek fényében a konvekciós együtthatót $35 \text{ W}/(\text{m}^2 \cdot \text{K})$ -nek adom meg [45, 47].

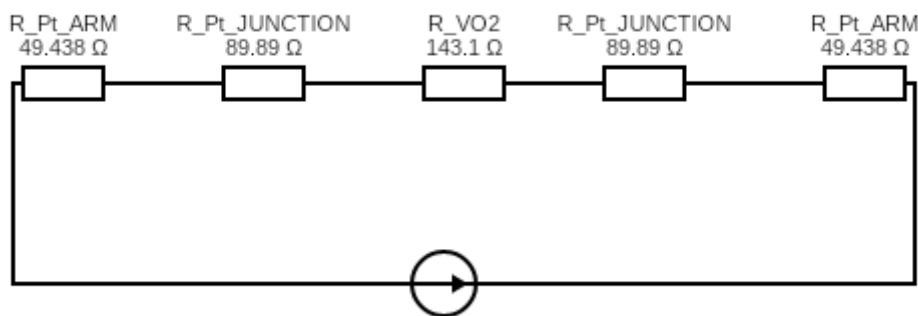
4.2.3. Végeselem háló

A vizsgált geometria a végeselem szimuláció szempontjából problémás. Ahhoz, hogy a szimulációt COMSOL-ban futtatni lehessen, szükséges a teret diszkretizálni egy végeselem háló segítségével. Sajnos a geometriában vannak olyan részek, ahol a rendszer akár 1500-szor szélesebb, mint amilyen magas. Ennek következtében egy szabad háló létrehozása lehetetlen erőforrásmennyiséget követelne meg. Ezt könnyítendő ún. söprött hálóval lehet diszkretizálni a geometriát, jelentősen csökkentve az elemszámot. Sajnos az ilyen strukturált hálók rontják a probléma konvergenciáját és a szimuláció pontosságát. A konvergencia-tulajdonságokat javítandó kezdeti értékeket lehet megadni a rendszernek, melyeket a 13. ábra **Hiba! A hivatkozási forrás nem található.** által szemléltetett modell alapján lehet számolni. Az így kapott értékeket használva a probléma megoldhatóvá válik. A generált végeselem hálót a 12. ábra **Hiba! A hivatkozási forrás nem található.** szemlélteti.

Bár több keresztmetszetű eszköz is létre lett hozva, a stacionárius szimuláció során csak az $1 \times 1 \mu\text{m}$ keresztmetszetű eszközt szimuláltam. Ennek oka, hogy a kisebb keresztmetszetek esetén még a strukturált végeselem hálók mérete is messze meghaladta a rendelkezésre álló erőforrásokat.



12. ábra - Végeselem háló, stacionárius szimuláció



13. ábra - Modell kezdeti értékek megadásához, stacionárius szimuláció

4.2.4. A stacionárius szimuláció eredményei

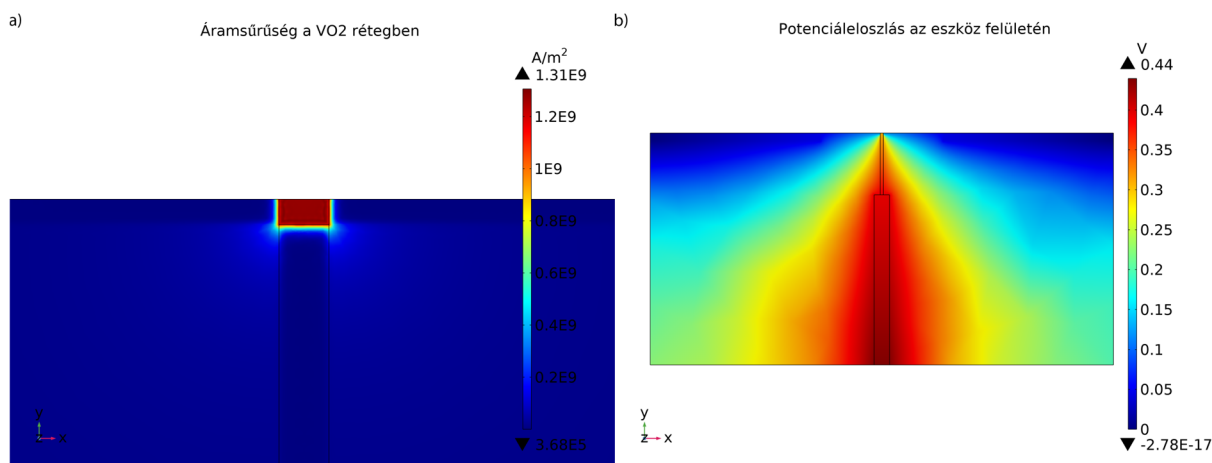
A stacionárius szimulációt két állapotban futtattam az anyagnak, a korábbiakban már megadott paraméterekkel. Először szigetelő állapotban több áramérték mellett, majd vezető állapotban. A labormérések során a tesztmintán áramgenerátoros meghajtással volt a gerjesztés, ezért a szimulációt is így futtattam, az eszközbe befolyó áramokat adtam meg.

4.2.4.1. Szigetelő állapot

A szigetelő állapotú szimuláció célja, hogy sejtést adjon, milyen bemeneti áram, feszültség mellett fogja az átmenet az MIT jelenségét mutatni. A szimuláció emellett adatot szolgáltat arról, hogy adott átmeneti áramértékek mellett mekkora kiterjedésű hot spot fog létrejönni. Ennek érdekében több áramértékkel futtattam szimulációt. Először az elektromos szimuláció eredményét fogom bemutatni, majd a termikus szimulációét. A szimulált bemeneti áramok: 0,5 mA, 1 mA, 1,5 mA, 2 mA, 2,5 mA és 3 mA.

Az eszköz működési elvének egyik feltételezése, hogy nem alakul ki áram az elektródák körül. Ezt szemlélteti az 14. ábra a) része, amin az áramsűrűség látható az elektródák közti doménben. Az ábrán látszik, hogy az áramsűrűség jelentősen nagyobb a központi doménben, mint a környezetében. Természetesen az áramsűrűség mezőnek van kiterjedése (világoskék rész az ábrán), de relatív gyorsan lecseng. Az 4. táblázatban az áramsűrűség értékei láthatók összehasonlítva az elvi értékekkel. Az elvi érték feltételezi, hogy a teljes gerjesztő áram az $1 \times 1 \mu\text{m}$ keresztmetszetű doménen halad át, és egyenletesen oszlik el. Látható, hogy az elvi értékek és a szimulált értékek eltérnek. Ennek oka lehet, hogy a laboratóriumban leválasztott VO₂ réteg el-lenállása kicsi. Ennek következtében a vártnál nagyobb mennyiségű áram tud elszivárogni az elektródák közt azon a területen, ahol nem metszik egymást. Ez a szivárgó áram csökkenti az átmenet áramát, ahol így a vártnál kisebb áramsűrűség tud kialakulni. Ennek ellenére továbbra

is elmondhatjuk, hogy az áram nagysága az elektródák között folyik, és ott hozza létre melegítő hatását. Az 14. ábra b) részén látható a felületi potenciáeloszlás az eszköz szimulációja során. Látható, hogy a megfelelő felületek föld, illetve táp potenciált mutatnak. Az áramsűrűségről és elektromos potenciálról látható ábrák a kapott eredmények jellegét jól szemléltetik. Az adott áramhoz tartozó táppotenciál értékeit az 5. táblázat tartalmazza.



14. ábra - a) Áramsűrűség a VO₂ rétegben, 2 mA gerjesztés, szigetelő állapot b) Potenciáeloszlás az eszköz felületén, 2 mA gerjesztés, szigetelő állapot

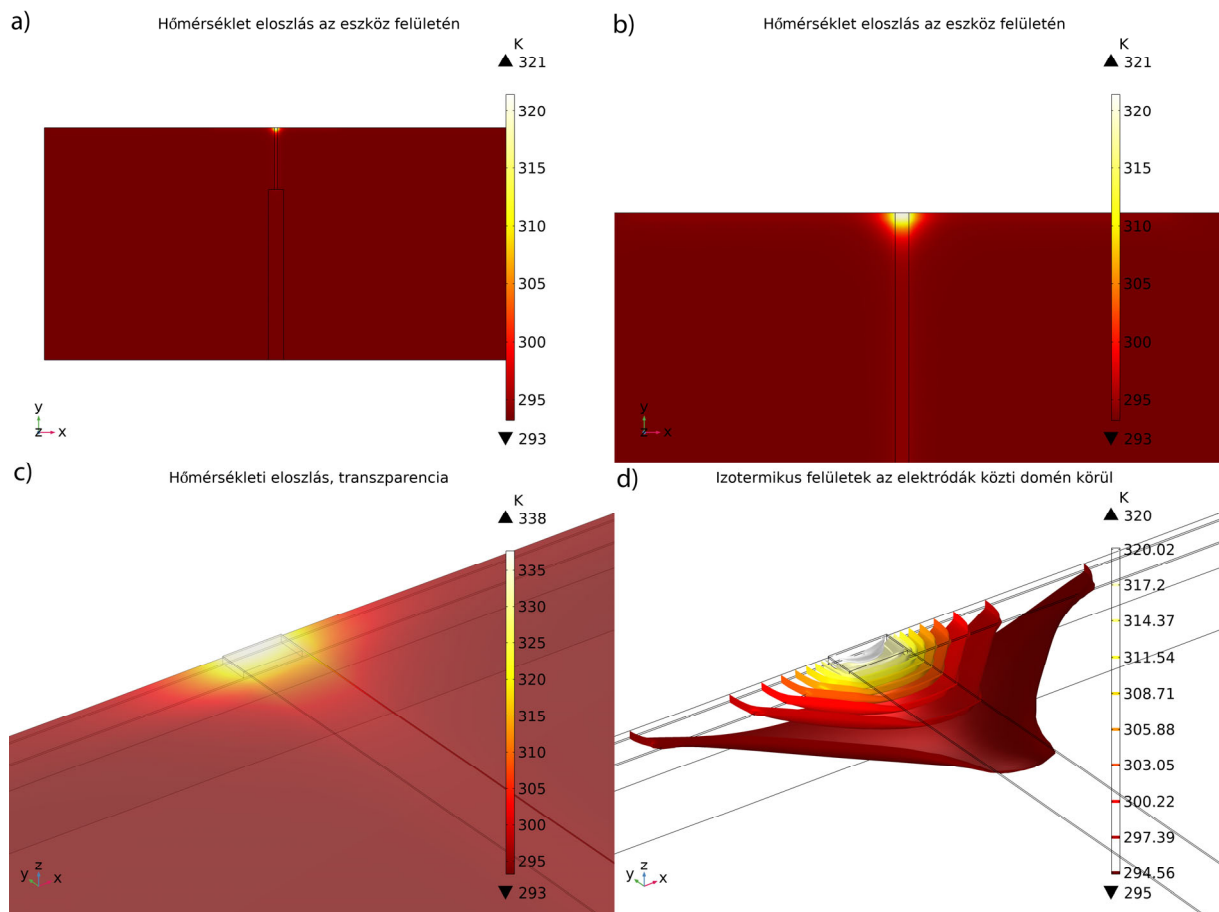
Gerjesztő áram [mA]	0,5	1	1,5	2	2,5	3	3,5
Elméleti áramsűrűség [A/m ²]	5,00E+08	1,00E+09	1,50E+09	2,00E+09	2,50E+09	3,00E+09	3,50E+09
Átlagos áramsűrűség a szimuláció alapján [A/m ²]	3,22E+08	6,44E+08	9,69E+08	1,28E+09	1,61E+09	1,96E+09	2,21E+09
Arány [%]	64,336	64,436	64,588	64,035	64,276	65,242	63,08286

4. táblázat - Gerjesztő áram és áramsűrűség a vanádium-dioxid rétegben, stacionárius szimuláció, szigetelő állapot

Gerjesztő áram [mA]	0,5	1	1,5	2	2,5	3	3,5
Tápfeszültség [V]	0,1102	0,2209	0,3317	0,4394	0,5511	0,6703	0,7571

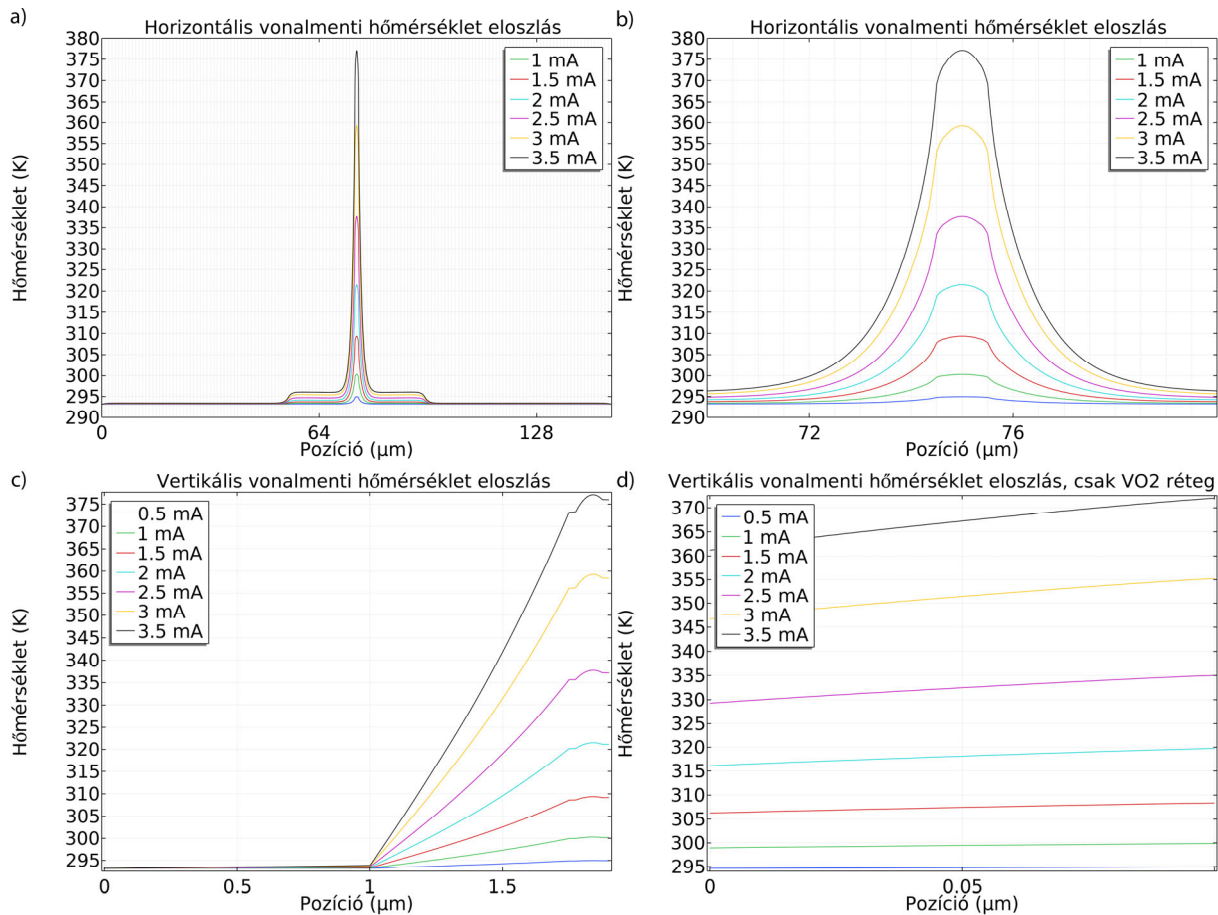
5. táblázat - Gerjesztő áram és tápfeszültség, stacionárius szimuláció, szigetelő állapot

A termikus szimuláció eredményeit mutatja a 15. ábra. Az eloszlás jellegre látható a 15/a)-c) ábrákon, izotermikus felületek az elektródák közötti domén körül láthatók a 15/d) ábrán. Jól látható, hogy egy szimmetrikus hőmérsékleti mező alakult ki a szimuláció során. Már ezen az ábrán is látszik, hogy az eszközben magas hőmérsékletű pontok csak az elektródák közötti térrész körül alakultak ki, pár mikron tartományban. A doméntól távolodva a hőmérséklet gyorsan leesik a széleken előírt 293,15 K-es értékre.



15. ábra - Hőmérsékleti eloszlások az eszközben, 2 mA gerjesztés, szigetelő állapot: a) Felületi eloszlás b) Felületi eloszlás, ráközelítve c) Térfigati eloszlás az elektródák között d) Izotermikus felületek az aktív rész körül

A 16. ábra a hőmérséklet vonalmenti eloszlásait mutatja. Az eloszlások a következők: hőmérséklet az elektródáktól egyenlő távolságra lévő vonal mentén a szimmetriasíkon (16/a)-b) ábrák), hőmérséklet mélységi eloszlás a VO₂ központi domén szélén a szimmetriasíkon (16/c) ábra), és hőmérséklet mélység szerinti eloszlása az eszköz közepén (16/d) ábra).



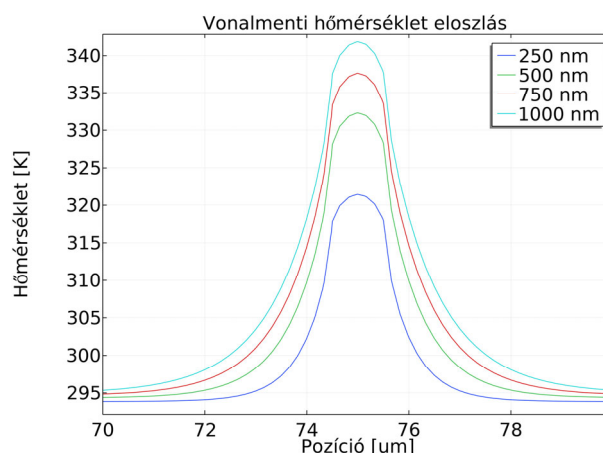
16. ábra - Vonalmenti hőmérséklet eloszlások az eszközben a szimmetriasíkon: a) Eloszlás az alsó elektródával párhuzamosan, az elektródától egyenlő távolságra b) Az a) eloszlás ráközelítve a 70-80 μm tartományra c) Vertikális eloszlás az eszköz közepén d) Vertikális eloszlás a VO₂ rétegben, az elektródák közti domén szélén

Először vegyük a 16. ábra a) részét. Az ábrán a nulla pont a geometria egyik széle, 150 μm a másik széle. A felső elektróda 74,5 és 75,5 μm-es pontok közt található. Az alsó elektróda a vonallal párhuzamosan, de a geometriában 50 nm távolságban fut, a vonal teljes hosszában. Látható, hogy az ábrán közeledve az elektródák közti doménhez, a hőmérséklet emelkedni kezd. A kezdeti emelkedés ott található, ahol az alsó elektróda szélessége csökken. Értelem-szerű, hogy a szélesség csökkenése a keresztmetszet csökkenéséhez vezet, ami miatt nő az el-lenállása az elektródának. Így ezen a szakaszon nagyobb lesz a disszipáció, mint az elektróda szélesebb részén, ami egy minimális (kb. 4-5 K) hőmérséklet emelkedéshez vezet a VO₂ réteg-ben az elektróda felett. Az emelkedés annyira kicsiny mértékű, hogy a réteg működését nem befolyásolja. Tovább közeledve az elektródák közti átmenethez, a hőmérséklet jelentősen nőni kezd. Ez az átfolyó áram hatása. Látható, hogy a csúcshőmérsékletet pont az átmenet közepén éri el a rendszer. Szintén látható, hogy a növekvő gerjesztő áram növekvő hőmérsékletet okoz. Mivel a fűtőtéljesítmény közvetlen függ az átfolyó áramtól, ezért ez kézenfekvő eredmény. Azt is észrevehetjük, hogy bár az áramok mindig azonos lépéssel (0,5 mA) nőnek, a hőmérséklet

egyre nagyobb ugrásokat mutat. Ennek az oka, hogy a $P = I^2R$ kifejezésben az áram négyzetesen szerepel, aminek köszönhetően az érzékenysége P -nek I -re nem konstans, hanem lineáris ($c_I = \frac{\partial P}{\partial I} = 2IR$), vagyis minél nagyobb I , annál nagyobb lesz P változása I azonos változására. A 16. ábra b) része csak azt a részét mutatja az eloszlásnak, ami az átmenet szűk környezetében található. Látható az ábrán, hogy 3 és 3,5 mA gerjesztéseknél a teljes átmenet 340 K feletti hőmérsékleten van, amiből arra lehet következtetni, hogy lejátszódik benne az MIT. Azt is észrevehetjük, hogy az eloszlás gyorsan lecseng, az eszköz középpontjától számítva 5 μm -en belül a legnagyobb gerjesztéshez tartozó csúcs is eltűnik.

A 16. ábra c)-d) részein mélységi eloszlások láthatók. Az egyik ábra az eszköz közepét hivatott mutatni, míg a másik ábrán az elektródák közti domén egyik éle mentén látható az eloszlás. Erre azért volt szükség, mert a hőtermelő folyamatok a domén közepén intenzívebbek lehetnek, így jó eséllyel a 16/d) ábrán látható eloszlás jobban modellezi az VO_2 vékonyréteg viselkedését az átmenettől távolodva.

A 16/c) ábrán a következőket figyelhetjük meg. A Pt elektródák jó hővezetők, így minimális a rajtuk létrejövő hőmérsékletkülönbség. Ezt az ábrán is megfigyelhetjük, az eszköz felszínéhez közeledve állandó szakaszok láthatók (természetesen itt is van valamekkora változás, de nagyon kicsi), melyek a Pt elektródákat jelölik. A második, amit észrevehetünk, hogy a hőmérsékleti csúcs nem a VO_2 felszínén jön létre, hanem a rétegben valamivel mélyebben. Ennek az oka az lehet, hogy a felszín a szimulációban (és a valóságban is) érintkezni tud a levegővel, aminek hatására a hő egy részét le tudja adni. Ez a leadott hő vezethet ahhoz, hogy a maximális hőmérsékletű pont valamivel beljebb tolódik a rétegben. Az ábrán megfigyelhető harmadik jelenség a jelentős meredekség a SiO_2 rétegben. Mivel az SiO_2 nem jó hővezető, ezért az eredmény várható. Lehetséges lehet, hogy a SiO_2 réteg vastagságának változtatásával a hőmérséklet hotspot kiterjedése növelhető. Ennek oka, hogy minél vastagabb a réteg, annál kisebb teljesítmény tud áramlani rajta, ami így a VO_2 rétegben más irányokban kell terjedjen. Ezt erősíti meg az 17. ábra is, mely 2,5 mA áram mellett egy paramétersöpréses szimuláció eredményét mutatja. Látható, hogy szélesebb az eloszlás, és nagyobb az adott áramhoz tartozó csúcshőmérséklet, ha nő a SiO_2 réteg vastagsága (vagyis vastagabb termikus szigetelés van az eszköz alatt). A kiterjedés mérete a Si hordozó vastagságának csökkentésével is befolyásolható lehet (pl. Si membrán marása a hátoldalon).



17. ábra – Vonalmenti hőmérséklet eloszlás 2,5 mA gerjesztés mellett, az elektródáktól egyenlő távolságra, a szimmetriasíkon, különböző SiO₂ vastagságokra.

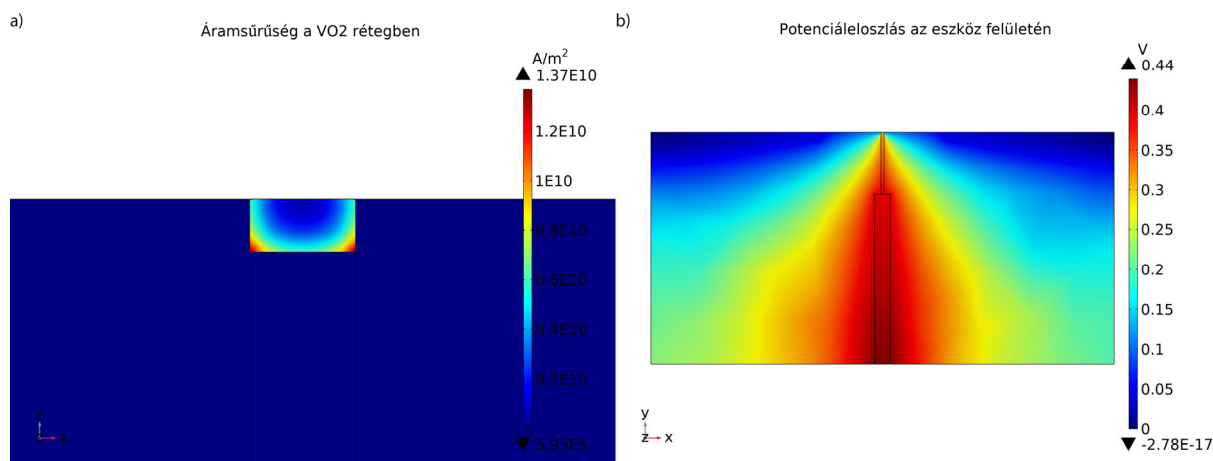
A 16. ábra d) részén a központi VO₂ domén szélén látható a mélységi eloszlás. Ennek az eloszlásnak a fő tanulsága az, hogy nem jön létre benne nagymértékű hőmérsékletcsökkenés. Ebből arra lehet következtetni, hogy a VO₂ termikusan vékonynak tekinthető, vagyis, ha a felületen adott szélességű eloszlás jön létre, az mélyebben a rétegben sem lesz jelentősen alacsonyabb hőmérsékletű. Ez fontos lehet, ha a vizsgált eszközt hot spotként szeretnénk használni.

4.2.4.2. Vezető állapot

A vezető állapotú szimuláció futtatásának célja megvizsgálni, hogy amikor a rendszer eléri az MIT hőmérsékletét és lezajlik a fém-félvezető átmenet, akkor az áramkorlátot betartva fenn képes-e tartani azt a hőmérsékletet, ami szükséges a vezető állapothoz. Mivel a stacionárius szimulációnál 3 és 3,5 mA gerjesztésnél már azt mutatta a szimuláció, hogy 340 K feletti az egész átmenet hőmérséklete, ezért a fém állapotú szimulációt 3 mA, 3,5mA és 4 mA értékek mellett futtattam.

Az elektromos szimuláció eredményét jellegre mutatja a 18. ábra. Az áramsűrűség eloszlása az elektródák között, azoktól egyenlő távolságra a 18. ábra a) részén látható. Az elektródák közti VO₂ domén vezető állapotban van, míg a többi rész szigetelő állapotban. Ennek megfelelően az áramsűrűség csak a vezető állapotú részen jön létre. A sarkok és a szélek közelében jelentősen megnő. A szigetelő részen nem alakul ki jelentős áramsűrűség. Az átlagos értékeit és az elméletileg vártat az 6. táblázat mutatja. Látható, hogy ebben az esetben közel vannak egymáshoz, az eltérés elfogadható mértékű (5% alatti). Ez arra utal, hogy a szigetelő szimulációban a szivárgás miatt volt kisebb a szimulált áramsűrűség érték. Mivel vezető állapotban gyakorlatilag fémes kontaktus van az elektródák között, jelentősen kisebb lesz a szivárgás. Az 7. táblázat a tápfeszültség értékeket mutatja az adott áramerősség mellett. Jól látható, hogy az

értékek kisebbek, mint a szigetelő állapot értékei, ami a VO₂-ra jellemző I-V karakterisztikának megfelelő.



18. ábra - a) Áramsűrűség a VO₂ rétegben, 4 mA gerjesztés, vezető állapot b) Potenciáeloszlás az eszköz felületén, 4 mA gerjesztés, vezető állapot

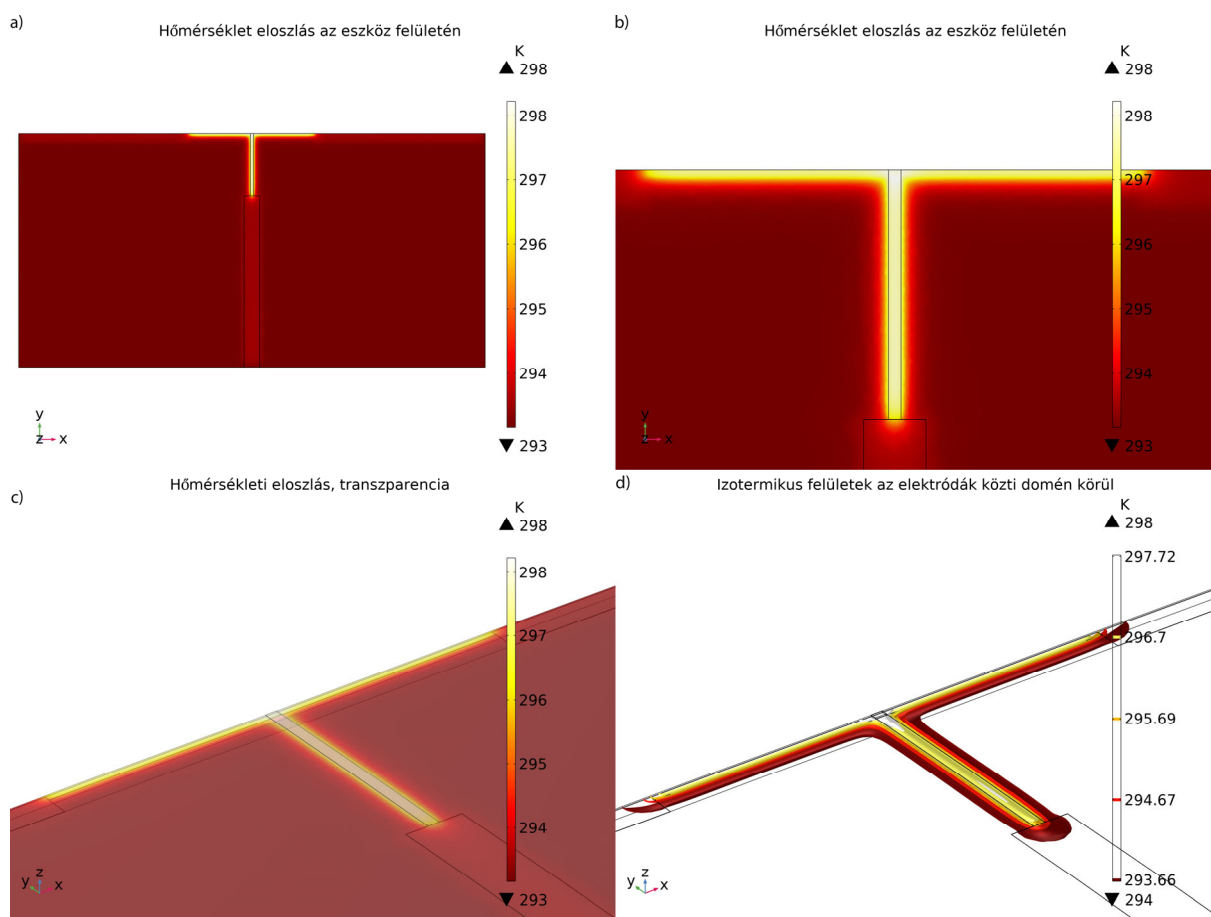
Gerjesztő áram [mA]	3	3,5	4
Elméleti áramsűrűség [A/m ²]	3,00E+09	3,50E+09	4,00E+09
Átlagos áramsűrűség a szimuláció alapján [A/m ²]	3,13E+09	3,62E+09	4,18E+09
Arány [%]	104,46	103,3314	104,4775

6. táblázat - Gerjesztő áram és áramsűrűségek a vanádium-dioxid rétegben, stacionárius szimuláció, vezető állapot

Gerjesztő áram [mA]	3	3,5	4
Tápfeszültség [V]	4,02E-01	4,63E-01	5,35E-01

7. táblázat - Gerjesztő áram és tápfeszültség stacionárius szimuláció során, vezető állapot

A kapott hőmérséklet mezők jellegét a 19. ábra mutatja. Látható, hogy magasabb hőmérsékletű pontok az elektródák közelében alakulnak csak ki, a hőmérséklet emelkedése ott is kicsi, 5 K körüli. A pontos értékeket az 8. táblázat mutatja. Az eredményből arra lehet következtetni, hogy áramkorlátos meghajtás mellett a vezető állapotba lépve a rendszer nem fogja tudni fenntartani az átmenethez szükséges hőmérsékletet. Az átmenet ennek ellenére fennmaradhat, a szakirodalom is arra utal, hogy elektromos mező fenntarthatja a vezető állapot a hőmérséklet csökkenése mellett is (tirisztorszerű működés) [2, 10, 19, 31].



19. ábra - Hőmérsékleti eloszlások az eszközben, 4 mA gerjesztés, vezető állapot: a) Felületi hőmérséklet eloszlás b) Felületi hőmérséklet eloszlás, ráközelítve c) Térfigati hőmérséklet eloszlás az elektródák között d) Izotermikus felületek az elektródák körül

Gerjesztő áram [mA]	3	3,5	4
Maximális hőmérséklet [K]	296,01	296,96	298,23
Eltérés a környezeti hőmérséklettől [K]	2,86	3,81	5,08

8. táblázat - Gerjesztő áram és maximális hőmérséklet stacionárius szimuláció során, vezető állapotban

4.2.4.3. A stacionárius szimuláció összegzése

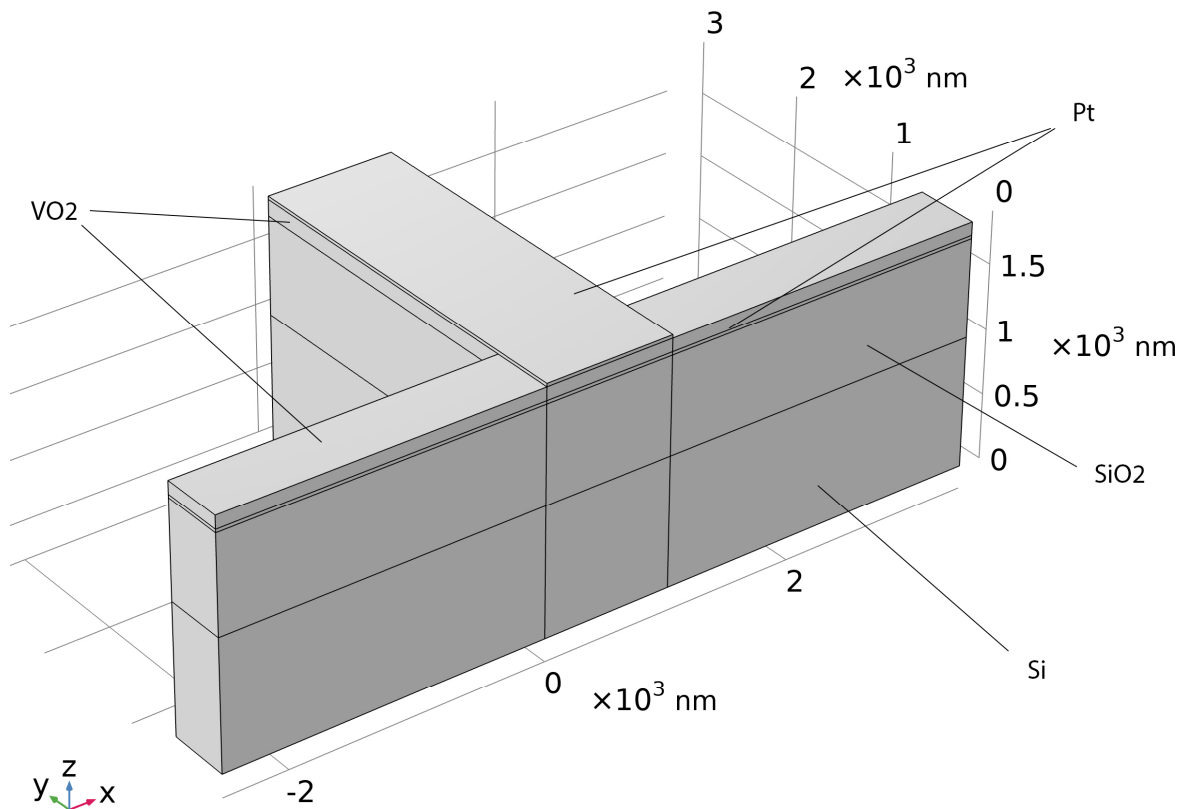
A stacionárius szimuláció alapján az alábbi következtetéseket tehetjük. Az eszköz elektromos áram segítségével az MIT-be vezérelhető. Az átmenet után, az elektromos áramot korlátozva, a hőmérsékleti értékek nem fognak fennmaradni. Annak ellenére, hogy a hőmérséklet lecsökken az átmenet után, egyéb hatások miatt (pl. elektromos mező, átfolyó áram) az eszköz nyitva maradhat [2, 10, 19, 31].

4.3. Tranziens szimuláció

4.3.1. Szimulációs geometria, egyszerűsítő lépések, anyagparaméterek

4.3.1.1. Geometria

A stacionárius szimuláció alapján a tranziens szimulációhoz felhasznált geometriát leszűkíthetjük egy közvetlen az aktív rész körüli $3 \times 3 \mu\text{m}$ -es tartományra, melyet utána szimmetria feltételek felhasználásával tovább lehet csökkenteni. A geometriában megteszem továbbá azt az egyszerűsítést, hogy csak az elektródák és az aktív rész alatti területeket veszem figyelembe. A VO_2 , Si és SiO_2 további részeit a szimulációból kihagyom. Ez az egyszerűsítés a következő miatt szükséges. Amint az 1. táblázat mutatja, véges mennyiségű erőforrás állt rendelkezésre a szimulációhoz. A tranziens szimulációnál emellett az se mindegy, hogy milyen sebességgel zajlik a szimuláció. A stabil konvergenciához szükséges, hogy direkt lineáris megoldókat használjak, ebben az esetben MUMPS (Multifrontal Massively Parallel Sparse Direct Solver) és PARDISO (Parallel Space Direct Solver) megoldókat. Az elektromos egyenleteket MUMPS, a termikus egyenleteket PARDISO megoldóval oldottam meg. Ezeknek a megoldóknak sajnos a hátránya, hogy lassúak és sok RAM-ot használnak. Ennek fényében egy olyan kicsi modell kellett létrehozni, ami már belátható idő alatt, stabilan megoldást ad. A geometriát a 20. ábra szemlélteti.



20. ábra - Tranziens szimulációs geometria

4.3.1.2. Egyszerűsítések, elhanyagolások

A tranziens modellben több egyszerűsítéssel is éltem. Egyrészt, elhanyagolhatónak feltételeztem a szivárgó áramot a VO₂ aktív részén kívül. Ennek következtében csak az elektródák alatti VO₂-t vettem figyelembe. Ennek következtében a teljes betáplált áramnak át kell folyni az elektródák közti aktív részen, ott kifejtve melegítő hatását, alacsonyabb küszöbáramhoz és feszültséghez vezetve a szimuláció során.

A környező VO₂, Si és SiO₂ rétegeket termikus szempontból elhanyagolhatónak feltételeztem, a doméneket csak az elektródák alatt hagytam meg, hogy a termikus határfeltételek kellően specifikálhatók legyenek. Ezzel az elhanyagolással szintén erőforrást takarítottam meg. Azzal, hogy a modellből az említett részeket eltávolítottam, termikus szempontból jelentős kapacitást távolítottam el az aktív rész környékéről, aminek köszönhetően az kevesebb hőt tud leadni. Ennek következtében adott áram mellett nagyobb hőmérsékletre lehet számítani, valamint a termikus jelenségek nagyobb sebességére.

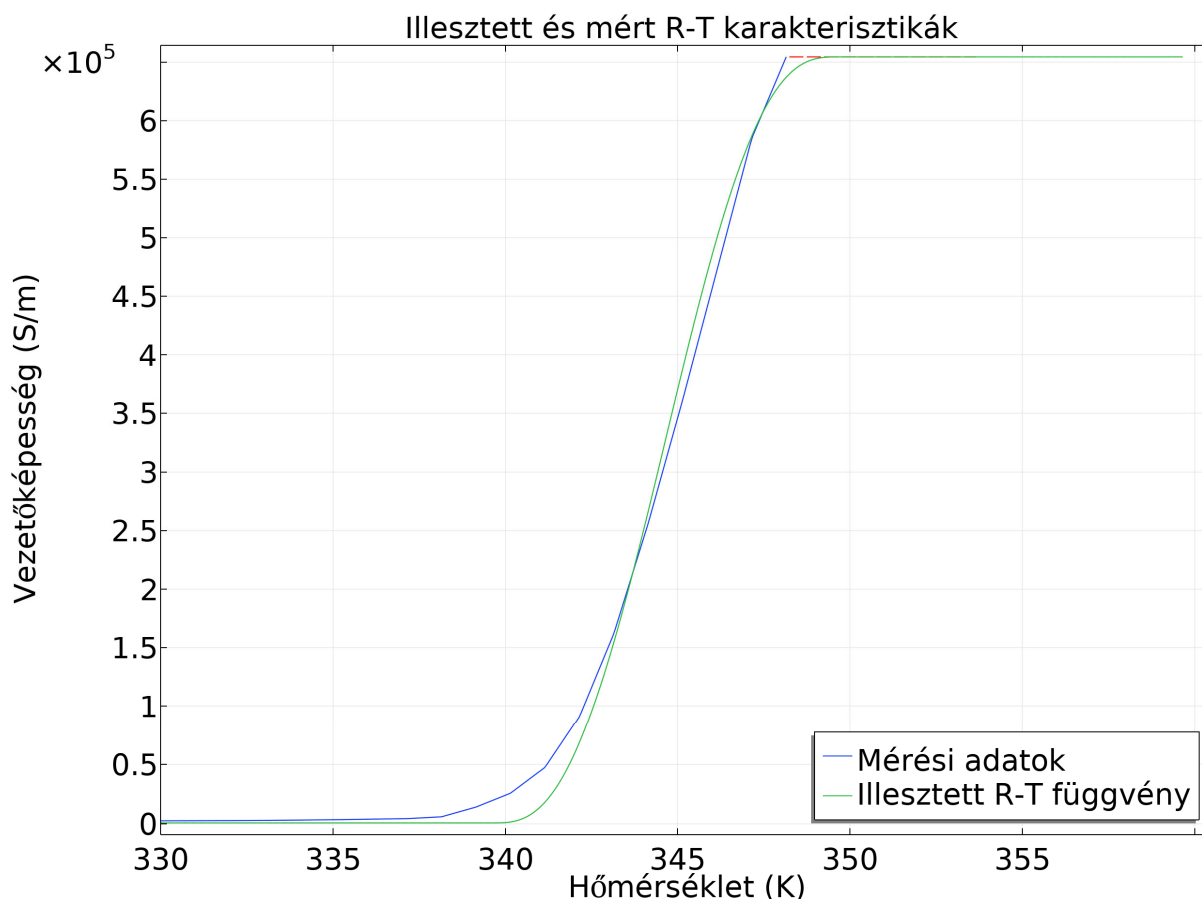
4.3.1.3. Határfeltételek

A modell megfelelő specifikálásához megfelelő határfeltételeket kell megadni. Ebben az esetben is megadtam elektromos, illetve termikus feltételeket. Elektromos feltételnek a befolyó áramot a felső elektróda megfelelő felületén és a földelés feltételt az alsó elektróda megfelelő felületein határoztam meg. Elektromos szempontból minden más felületen szigetelés lett előírva.

Termikus szempontból hőfluxust adtam meg az elektródák és a VO₂ felső felületére. Hőmérséklet (293,15 K) feltételt adtam meg a modell alsó felületeire, valamint az elektródák, a SiO₂, VO₂ és Si határoló felületeire. Szimmetria határfeltételt alkalmaztam a szimmetriasíkon.

4.3.1.4. Anyagparaméterek

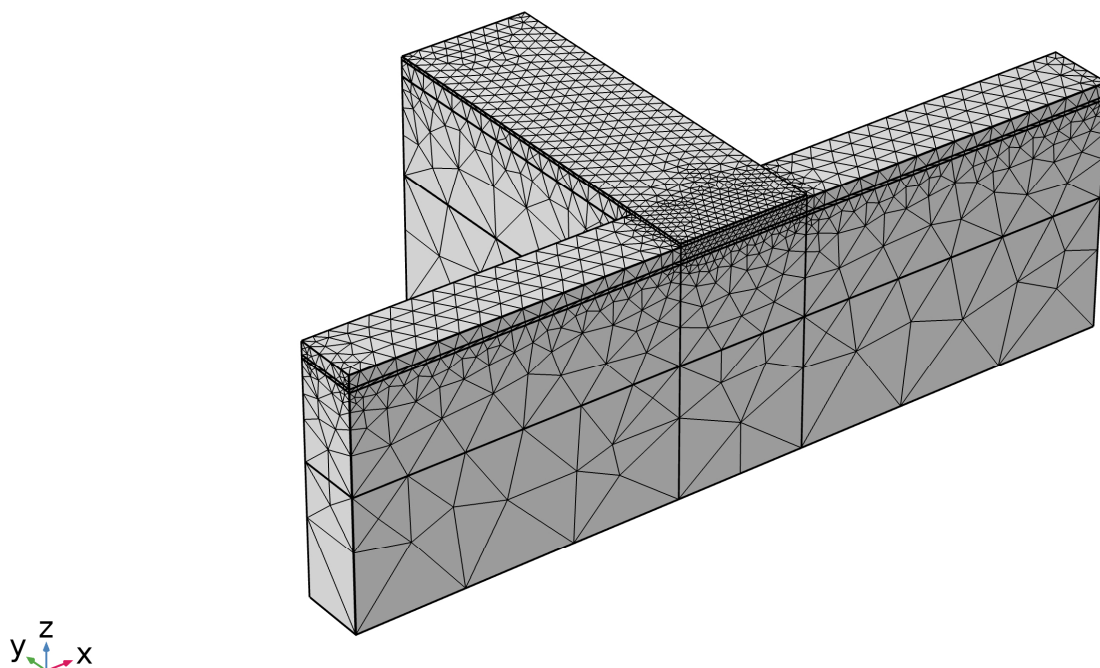
Az anyagparaméterek megegyeznek a stacionárius paraméterekkel az Si, SiO₂ és Pt anyagokra. VO₂ esetén az Elektronikus Eszközök Tanszéken korábban mért fajlagos vezetőképesség adatokra illesztettem függvény a jobb konvergencia érdekében, és ezt használtam a szimulációhoz. A mért adatok és az illesztett függvény a 21. ábraán láthatók. Az illesztésre azért volt szükség, hogy javuljon a modell konvergenciája. A vezetőképesség hiszterézisétől eltekintettem a szimuláció során, csak a melegítéshez tartozó adatokat használtam. A VO₂ egyéb paraméterei esetén a szigetelő állapotot vettem alapul, azok változásától eltekintettem.



21. ábra - Illesztett (zöld) és mért (kék) R-T függvények

4.3.1.5. Végeselem háló

A tranziens szimulációhoz használt geometria jelentősen kisebb, mint a stacionárius szimulációhoz használt geometria. Mivel a tranziens szimuláció során egy jelentős nemlinearitás kerül a problémába a hőmérsékletfüggő ellenállás miatt, ezért a memóriakímélő strukturált hálók használata nem volt járható út, mivel rossz konvergenciához vezettek. Ennek fényében a tranziens szimulációknál egy szabad, tetraéder alapcellából álló végeselemhálót használtam. A hálószerkezetet a 22. ábra mutatja. A korábbi stacionárius szimuláció eredményéből kiindulva, az aktív résztől távolodva a hőmérsékleti mező gyorsan lecseng. Ennek fényében az aktív résztől távolodva egyre durvább hálót használtam a szimulációk futtatására, míg az aktív részen a háló finomságát jelentősen megnöveltem, hogy az ellenállás változását a szimuláció kezelni tudja.

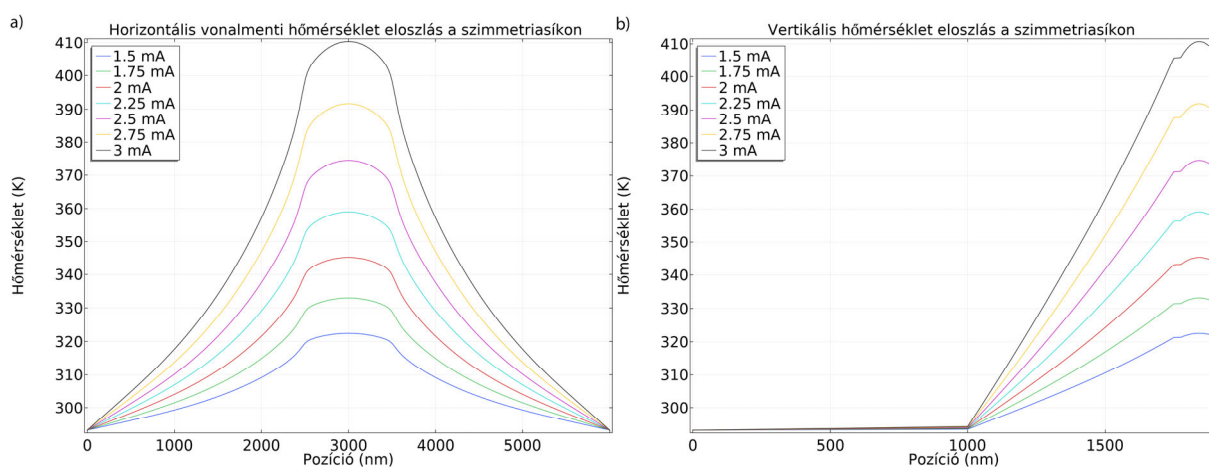


22. ábra - Véges elem háló tranziens szimulációs geometria

4.3.2. 1 μm -es geometria

4.3.2.1. Előzetes stacionárius szimulációk

A tranziens szimulációk futtatása előtt stacionárius szimulációkat is futtattam a rendszeren, ellenőrizendő, hogy jellegre azonos hőmérsékleti eloszlások jönnek-e létre. A kapott eredményeket a 23. ábra szemlélteti.

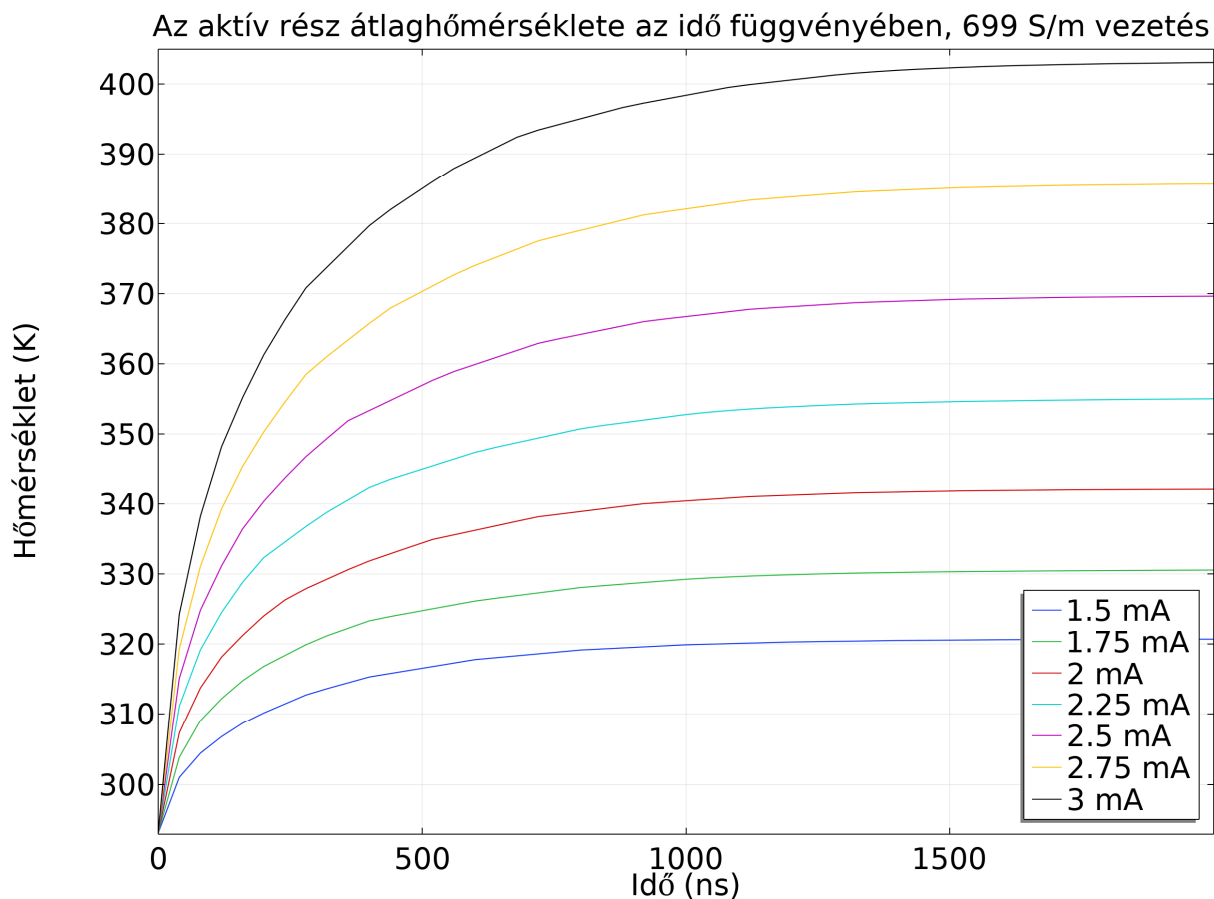


23. ábra - Vonalmenti hőmérsékleti eloszlások a szimmetriasíkon: a) Elektrodák közt egyenlő távolságra, horizontális b) Az eszköz közepén, vertikális

Látható, hogy a korábbi, teljes geometrián végzett szimulációhoz hasonló alakú eloszlások jöttek ki. Amit meg lehet figyelni, hogy a hőmérséklet határfeltétel az 23/a) ábrán egy gyors lecsengéshez vezet. A 23/b) ábrán a mélységi eloszlás jellegre teljesen azonos a korábban kapott eredményekkel, megfigyelhető rajta a Si, SiO₂, Pt és VO₂ egyaránt. Eltérés még, hogy a korábbihoz képest adott áram mellett magasabb hőmérséklet jön létre. Összességében azt mondhatom, hogy ezekre az eltérésekre a közelítések alapján számítani lehetett Si, SiO₂ és VO₂ elhanyagolása a kereszt alakú geometrián kívül. A stacionárius szimuláció alapján a tranziens szimuláció során már 2 mA-es gerjesztés mellett is számítani lehet az MIT-re az aktív részen.

4.3.2.2. Szimulációs időtartam meghatározása

A tranziens szimuláció szempontjából az egyik legfontosabb paraméter a szimuláció hossza. A szimulációs idő elsősorban meghatározza az szimuláció számításának időtartamát, az erőforrásigényt. A szimulációs idő emellett azért is fontos szempont, mert úgy kell meghatározni, hogy a kívánt jelenség már látszódjon rajta. Azért, hogy a szimulációs időre becslést tudjak adni, először a VO₂ vezetőképességére konstans 699 S/m-t vettem. Ezzel a beállítással szimuláltam a rendszer ugrásválaszát megadott áramú gerjesztésekre. Ez alapján lehet következtetni arra, hogy milyen időnél fog bekövetkezni a fém-félvezető átmenet. A szimulációk során egy $t = 2$ ns időpontban belépő ideális egységugrás függvényével gerjesztettem a rendszert. A kapott ugrásválaszok az egytárolós rendszerre jellemző viselkedést mutatnak (exponenciális felfutás, nincs túllövés és oszcilláció) (ld.: 24. ábra).



24. ábra - Az aktív rész átlaghőmérséklete az idő függvényében szigetelő állapotban, különböző gerjesztésekre

Az ábra alapján a stacionárius szimulációval összhangban az várható, hogy 2 mA gerjesztés felett be fog következni az MIT az aktív részen. Ennek alapján a tranziens szimulációt a következő időig futtattam (9. táblázat):

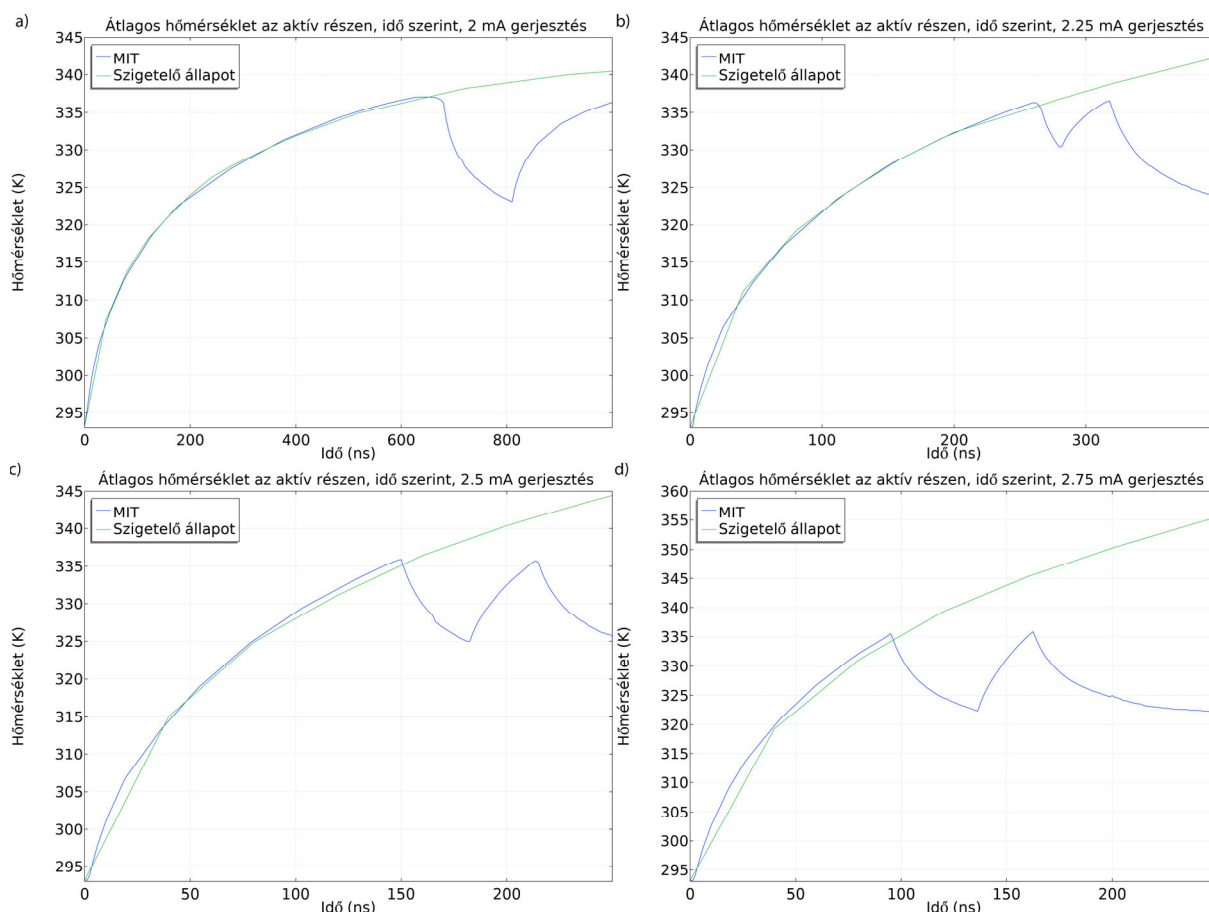
Gerjesztő áram [mA]	2	2,25	2,5	2,75	3
Szimulációs időtartam [ns]	1000	400	250	250	250

9. táblázat - Szimulációs időtartamok a tranziens szimulációhoz

2 mA alatti gerjesztésnél az R-T karakterisztikát figyelembe véve nem volt látható átmenetre utaló adat, ami igazolja a 24. ábra adatainak helyességét.

4.3.2.3. Tranziens szimuláció eredményei

Az aktív rész átlaghőmérsékletét idő szerint az 25. ábra mutatja, összehasonlítva azzal az esettel, mikor az R(T) függés nem volt figyelembe véve.



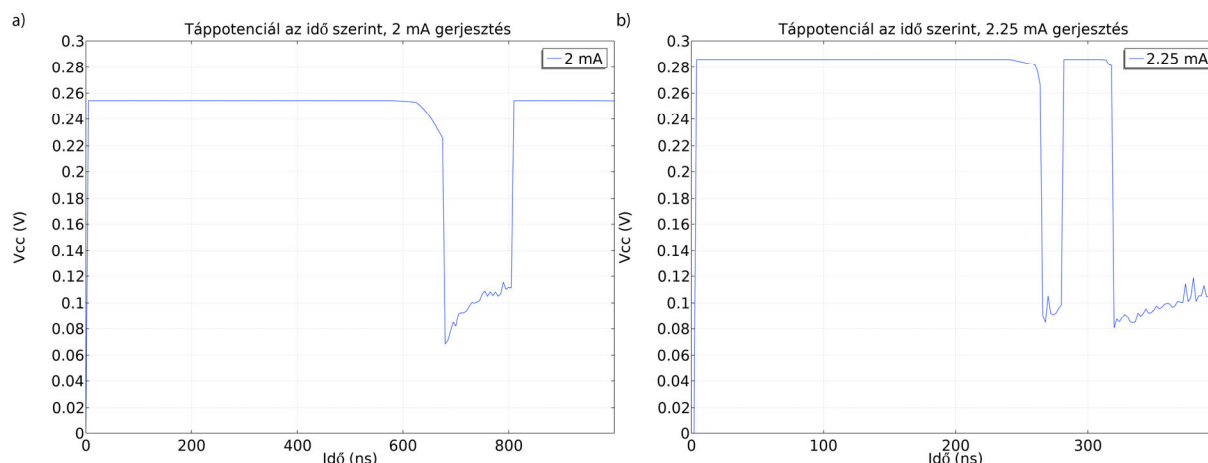
25. ábra - Elektrodák közti domén átlaghőmérséklete az idő szerint: a) 2 mA b) 2,25 mA c) 2,5 mA d) 2,75 mA

A kezdeti szakaszon az R-T karakterisztikát figyelembe nem vevő és figyelembe vevő szimulációk eredménye együtt fut, kis eltérést mutatnak. Ez annak a következménye, hogy a transziens szimulációk során a COMSOL egy időben iteratív eljárással próbálja megkeresni a megoldást, ami minimálisan más eredményhez vezethet a szimulációk között. A szimulációk során a kb. 335 K-es hőmérséklet elérésekor következik be az átmenet. Ekkor leesik a hőmérséklet. Amit figyelembe kell venni, hogy 335 K-en a VO_2 még nem mutat MIT-t, viszont a diagramokon az átlaghőmérséklet látható, és mikor az átlaghőmérséklet 335 K körüli, akkor már lehetnek olyan részek, ahol 340 K fölé kerül a hőmérséklet. Az átmenet a növekvő árammal egyre gyorsabban következik be (2 mA esetén még kb. 700 ns, 2,75 mA esetén már csak kb. 100 ns).

A VO_2 karakterisztikáját figyelembe véve a következő a magyarázat az eredményekre. A betáplált elektromos áram melegíteni kezdi a VO_2 aktív részét. Ennek hatására a hőmérséklet emelkedik. Mikor létrejön egy olyan térrész, ahol a hőmérséklet T_{MIT} fölé kerül, akkor lecsökken az ellenállás, aminek következtében lecsökken a fűtőtéljesítmény (hiszen $P = I^2 R$). A lecsökkent fűtőtéljesítmény hatására az átmenet hűlni kezd. Mikor kellően lehűl, akkor újra le-

játszódik az MIT. Ekkor a folyamat újraindul. Erre a viselkedésre lehetett számítani a stacionárius szimuláció alapján is. A valóságban lehetséges, hogy adott áram mellett az átmenet fennmarad, és nem indul oszcilláció.

Az 26. ábra a táppotenciált mutatja az idő szerint. Ahogy azt várnánk, az átmenet után a potenciál jelentősen csökken. Ennek oka, hogy áramgenerátoros a szimulációban a meghajtás, aminek köszönhetően az áram konstans előírt értéken van. Az átmenet után az aktív rész ellenállása lecsökken, aminek köszönhetően a feszültségesés is jelentősen kisebb lesz rajta, ami a táppotenciál lecsökkenéséhez vezet.



26. ábra - Táppotenciál az idő szerint: a) 2 mA gerjesztés b) 2.25 mA gerjesztés

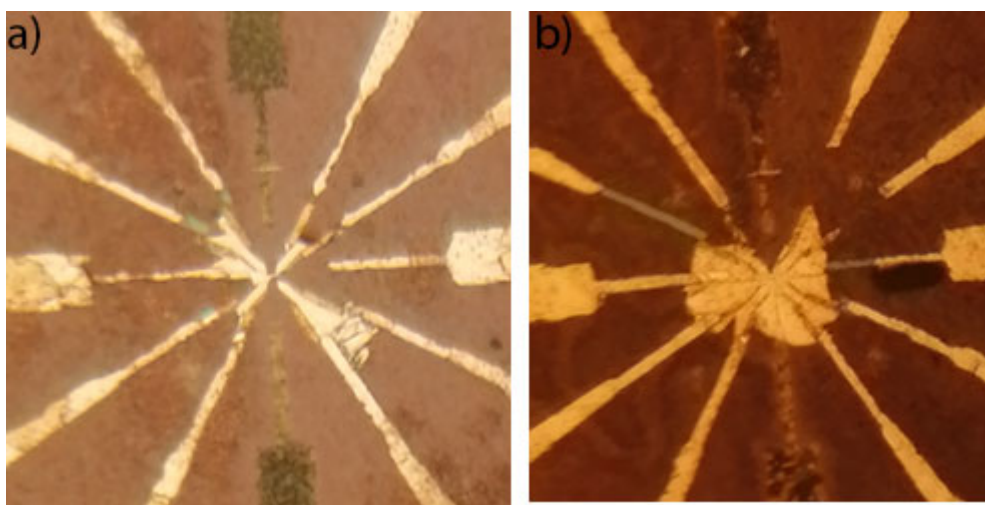
4.3.3. 50 nm-es geometria

A dolgozat keretei közt egy 50x50 nm keresztmetszetű geometria is született, a 20. ábrán látható elrendezésben. Bár stacionárius szimuláció során ígéretes volt, 40 μ A gerjesztés környékén mutatott T_{MIT} feletti hőmérsékleteket, sajnos tranziens esetben nem volt megfelelő a modell konvergenciája. Ez rendkívül hosszú, kiszámíthatatlan számítási időkhöz és fizikailag helytelen eredményekhez vezetett.

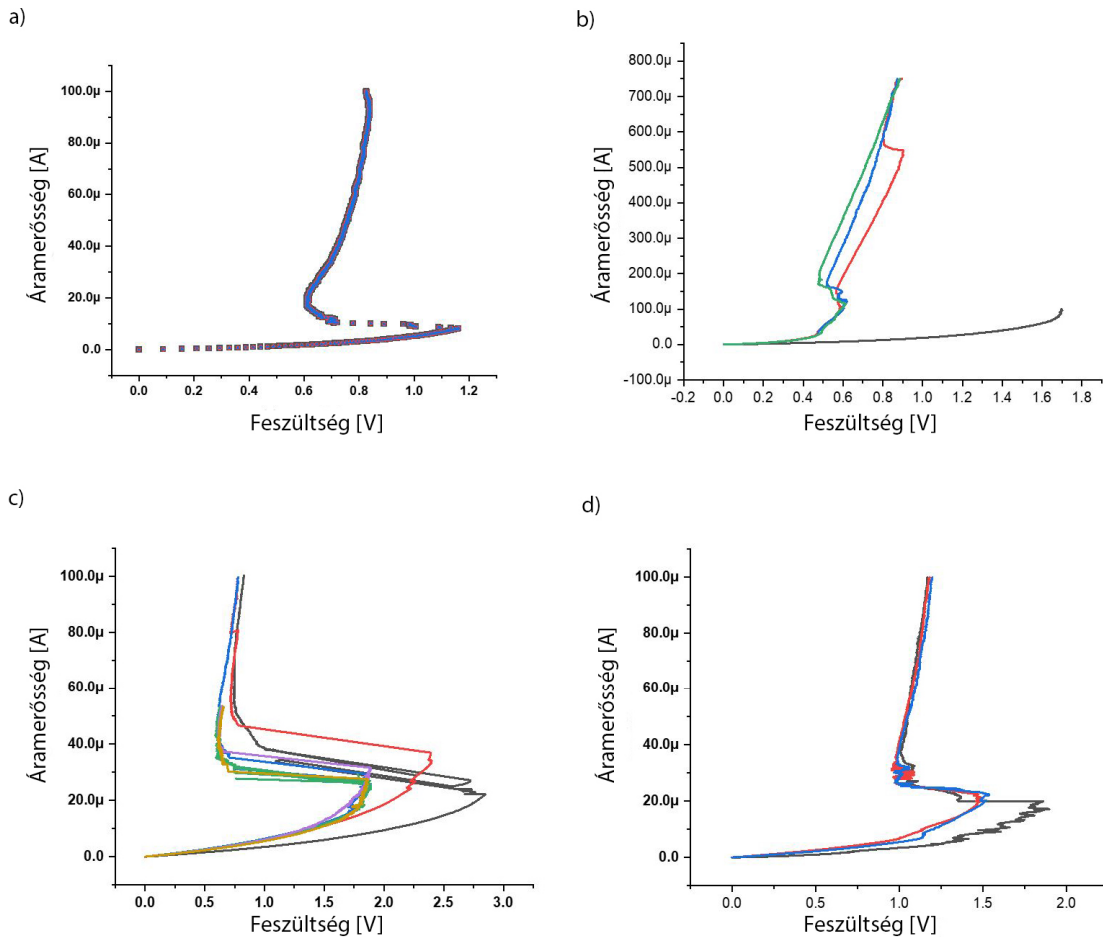
5. Mérési eredmények

A szimulációban vizsgált eszközön a Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem Elektronikus Eszközök Tanszékén mérések is készültek. A méréseket Al -abassi Salam Abd Al-Ameer Waheed készítette. A VO_2 -ra jellemző MIT jelenséget a mintákon végzett mérések során demonstrálni lehetett. Sajnálatos módon nem minden minta mutatta a jelenséget, illetve volt olyan minta is, amin a jelenség nem várt módon játszódott le (például váratlan többszöri váltás a fázisok között). Olyan minták is voltak, ahol technológiai hiba miatt nem volt lehetséges mérést végrehajtani. Ilyen hiba például, hogy nem jött létre megfelelő összeköttetés az

elektrodák között (27. ábra), vagy éppen a Pt marásakor rövidzár maradt az elektrodák között, ezzel működésképtelenné téve az eszközt.



27. ábra – a) Eszköz hiányzó összeköttetéssel b) 28/a) ábrán látható karakterisztikát mutató, stabilan működő eszköz képe



28. ábra – Működő eszközök mérési eredményei: a) 300x300 nm névleges keresztmetszet, 380x380 nm keresztmetszet megvalósítás után. A minta kifejezetten stabil volt, a különböző mérésekhez tartozó görbék egymásra estek. b) 250x250 nm névleges keresztmetszet, 280x280 nm keresztmetszet megvalósítás után c) 1x1 μ m keresztmetszet, 200 μ A körüli nyitó áram d) 1x1 μ m keresztmetszet, 20 μ A körüli nyitó áram

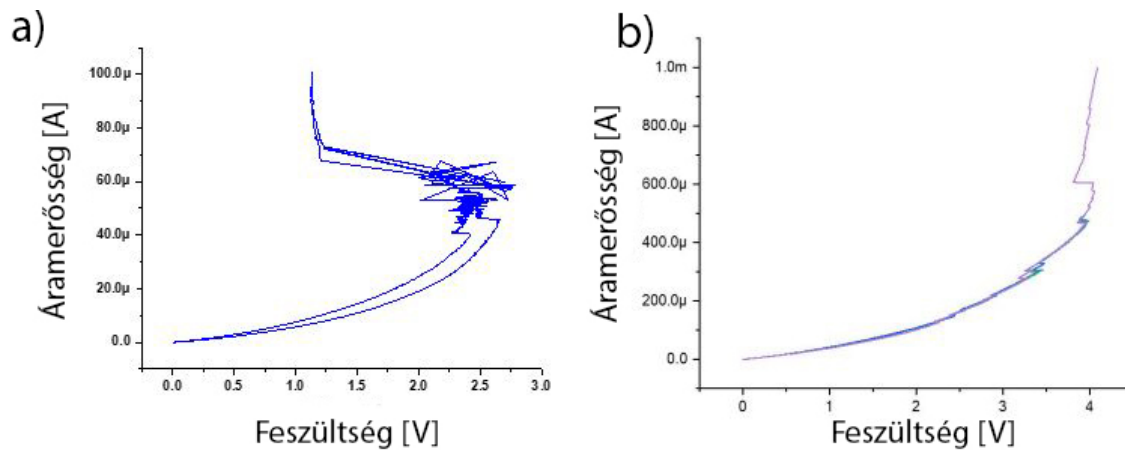
Elektromos mérések eredményeit mutat a 28. ábra. Ezek az eszközök működnek, de észrevehető, hogy a működési feszültségek, áramok eltérnek. Azt is meg lehet figyelni, hogy az MIT jelenség nem minden esetben ugyanúgy zajlik le (ld.: 28. ábra b) rész). A mérések során az eszközök keresztmetszete 50x50 nm és 1x1 μ m között változott. A működő eszközök többsége 20 μ A körüli áramerősségeknél mutatta az MIT jelenséget, ez látható a 28. ábra a), c) és d) részein. A különböző eszközök esetén a nyitófeszültség értékek jelentősen eltérnek: az a) ábrán látható karakterisztikák 1,2 V nyitófeszültséget mutatnak, míg a c) ábra karakterisztikái közt 3 V-os nyitófeszültség is megjelenik.

A 28. ábra c) és d) részein látható 1x1 μ m-es eszközök mérései esetén a nyitófeszültségek az 1-3 V tartományban vannak, míg a nyitóáramok 20-40 μ A közé esnek. Sajnálatos módon ez nem egyezik meg a szimulációban kapott értékekkel. Amennyiben a szimuláció értékeit arányosítjuk a kisebb geometriákhoz, akkor azokkal ugyan nem megegyező, de közeli értékeket

kapunk a nyitóáramra. Feltéve, hogy az MIT jelenséget csak az áram melegítő hatása idézi elő, nagyjából ugyanarra a fűtőtéljesítményre lenne szükség az átmenet előidézéséhez. Mivel a keresztmetszet élhosszúságára és az áramra egyaránt négyzetesen érzékeny a $P = I^2 R = I^2 \rho \frac{l}{x^2}$ kifejezés, ahol x a keresztmetszet élhosszúsága és l az ellenállás hossza, ezért az áramnak és a keresztmetszetnek azonos arányban kellene változnia az eszközök között, vagyis a szimuláció alapján, ami 2 mA értékre már mutatott MIT jelenséget, 250x250 nm-es keresztmetszet esetén 250 μ A körüli nyitási áramot kellene kapjunk. A mérések során a 28/b) ábrán látható karakterisztika 200 μ A körüli átmenetet mutatott, ami nagyságrendileg hasonló. A többi mérésnél jelentősen kisebb áramnál bekövetkezett az MIT effektus.

Az eltérést a szimulált értékek és a mért értékek közt többféleképpen is meg lehet magyarázni. Először is, lehetséges, hogy a mérések során a VO₂ rétegnek csak egy keskeny részén jött létre vezetés. Ez magyarázná, hogy miért közel azonos a nyitóáram a különböző keresztmetszetű eszközök esetén. A nyitóáram eltéréséhez hozzájárulhat az is, hogy a szimuláció névértékkel lett futtatva, viszont a tényleges eszközben az elektródák közti VO₂ réteg nem 100 nm, hanem 140 nm és 180 nm között változik. Ez befolyásolja az ellenállást az elektródák között, ami befolyásolhatja az átmenethez szükséges áramértéket. Végezetül pedig a szakirodalom egyenes abban, hogy az MIT jelenséget a VO₂ esetén nem csak termikus úton lehet előidézni. Sajnos a COMSOL-ban szimulált eszköz csak a termikus jelenségeket veszi figyelembe. A termikus jelenségek mellett az MIT előidézhető elektronok injektálásával a VO₂ rétegbe [2, 19], az átmenetre hatással van a rétegben létrejövő rácsfeszültség [1, 11, 16, 18] és az átmenet történhet lavinaszerűen a kristályszemcsék közt [22]. Ezek a hatások eredményezhetik azt, hogy az átmenetek a megvalósított eszközökben nagyon hasonlóak a keresztmetszet-különbség ellenére, és alacsonyabb áramnál történnek, mint azt a szimuláció alapján várnánk. A vékonyrétegben létrejövő rácsfeszültség hajlamosabbá teheti a VO₂-ot az MIT-re, majd mikor elkezd áram folyni, a rétegbe jutó elektronok a kristályszemcsék lavinaszerű átmenetét okozzák, ami egy vékony vezető csatorna kialakulásához vezet. Egy ilyen folyamat magyarázhatja a szimulált és mért értékek eltérését.

A 29. ábra olyan eszközök mérési eredményeit mutatja, amik nem mutattak MIT-t, vagy nem megfelelően ment végbe a jelenség. Az a) ábra egy olyan eszközt mutat, amin ugyan a szigetelő és a vezető fázisok stabilak voltak, de az átmenet nem várt módon viselkedett. A b) ábrán látható eszköz az MIT jelenséget nem az elvárt minőségben mutatta.



29. ábra - Nem működő eszközök mérési eredményei a) 750x750 nm névleges keresztmetszetű eszköz, a megvalósított eszköz 960x812 nm keresztmetszetű b) 100x100 nm névleges keresztmetszet, megvalósított eszköz 120x120 nm keresztmetszetű

6. Összefoglalás

A dolgozatban bemutattam egy vertikális kialakítású VO₂ nanoszerkezet stacionárius és tranziens végeelem szimulációját. A szimuláció célja, hogy sejtést adjon, lehetséges-e a VO₂ vékonyréteg egy kis térrészét elektromosan vezérelve egy termikus munkapont beállítására használni a térrész szűk környezetében létrehozott áramkörei számára. A stacionárius és tranziens szimulációk egyaránt arra engednek következtetni, hogy a VO₂ szerkezeten az MIT effektust elektromos árammal elő lehet idézni. Arra is engednek következtetni, hogy a hot spot kiterjedése elég nagy ahhoz, hogy más áramkörök működését befolyásolhassuk vele. A szimulációk alapján a hőmérséklet az átmenet után csökkenni fog, de ennek ellenére az elektromos mező, elektromos áram hatására a VO₂ vezető állapotban maradhat.

A szimulációból kapott eredmények a mért eredményektől eltérnek. Az eltérést valószínűleg a szimulációban nem szereplő másodlagos hatások okozzák, melyek az MIT jelenség létrehozásában szerepet játszanak. Ennek a feltevésnek az alátámasztásához további kutatásokra van szükség.

Irodalomjegyzék

- [1] N. F. Quackenbush, J. Tashman, J. A. Mundy, S. Sallis, H. Paik, R. Misra, J. A. Moyer, J.-H. Guo, D. A. Fischer, J. C. Woicik, D. A. Muller, D. G. Schlom and L. F. J. Piper, "Nature of the Metal Insulator Transition in Ultrathin Epitaxial Vanadium Dioxide," *Nano Letters*, vol. 13, no. 10, pp. 4857-4861, 2013.
- [2] S. D. Ha, Y. Zhou, A. E. Duwel, D. W. White and S. Ramanathan, "Quick Switch: Strongly Correlated Electronic Phase Transition Systems for Cutting-Edge Microwave Devices," *IEEE Microwave Magazine*, vol. 15, no. 6, pp. 32-44, 2014.
- [3] F. J. Morin, "Oxides Which Show a Metal-To-Insulator Transition at the Neel Temperature," *Physical Review Letters*, vol. 3, no. 1, pp. 34-36, 1959.
- [4] J. Lappalainen, J. Mizsei and M. Huotari, "Neuromorphic thermal-electric circuits based on phase-change VO₂ thin-film memristor elements," *Journal of Applied Physics*, vol. 125, 044501, pp. 1-10, 2019.
- [5] W. Yi, K. K. Tsang, S. K. Lam, X. Bai, J. A. Crowell and E. A. Flores, "Biological plausibility and stochasticity in scalable VO₂ active memristor neurons," *Nature Communications*, vol. 9, 4661, pp. 1-10, 2018.
- [6] E. Corti, B. Gotsmann, K. Moselund, A. M. Ionescu, J. Robertson and S. Karg, "Scaled resistively-coupled VO₂ oscillators for neuromorphic computing," *Solid State Electronics*, vol. 168, 107729, pp. 1-7, 2020.
- [7] G. Song, D.-H. Kim, D.-H. Song, J.-B. Sung and S.-j. Yook, "Heat-dissipation performance of cylindrical heat sink with perforated fins," *International Journal of Thermal Sciences*, vol. 170, 107132, 2021.
- [8] S. V. Garimella, "Advances in mesoscale thermal management technologies for microelectronics," *Microelectronics Journal*, vol. 37, no. 11, pp. 1165-1185, 2006.
- [9] G. J. Snyder, M. Soto, D. Alley, D. Koester and B. Conner, "Hot Spot Cooling using Embedded Thermoelectric Coolers," in *Twenty-Second Annual IEEE Semiconductor Thermal Measurement And Management Symposium*, Dallas, 2006.
- [10] I. S. Gibin and P. E. Kotlyar, "Experimental Dynamics of Temperature-Initiated Metal-Insulator Transition in Vanadium Dioxide," *Journal of Communication Technology and Electronics*, vol. 66, no. 3, pp. 340-347, 2021.

- [11] W.-T. Liu, J. Cao, W. Fan, Z. Hao, M. C. Martin, Y. R. Shen, J. Wu and F. Wang, "Intrinsic Optical Properties of Vanadium Dioxide near the Insulator-Metal Transition," *Nano Letters*, vol. 11, no. 2, pp. 466-470, 2011.
- [12] E. Pop, S. Sinha and K. E. Goodson, "Heat Generation and Transport in Nanometer-Scale Transistors," *Proceedings of the IEEE*, vol. 94, no. 8, pp. 1587-1601, 2006.
- [13] J. Al-Ghalith and T. Dumitrică, *Nano-scale Heat Transfer in Nanostructures*, Springer Cham, 2018.
- [14] Y. Wu, *Experimental Investigation of Size Effects on Surface*, Université Paris-Saclay, 2019.
- [15] K. Gambár and F. Márkus, "Heat Propagation Dynamics in Thin Classical Semiconductors," *INFORMATIKA*, vol. 15, no. 1, pp. 24-28.
- [16] L. Rodríguez, F. Sandiumenge, C. Frontera, J. M. Caicedo, J. Padilla, G. Catalán and J. Santiso, "Strong strain gradients and phase coexistence at the metal-insulator transition in VO₂ epitaxial films," *Acta Materialia*, vol. 220, 117336, pp. 1-11, 2021.
- [17] V. Devthade and S. Lee, "Synthesis of vanadium dioxide thin films and nanostructures," *Journal of Applied Physics*, vol. 128, 231101, pp. 1-18, 2020.
- [18] J. Sang, T. Zheng, L. Xu, X. Zhou, S. Tian, J. Sun, X. Xu, J. Wang, S. Zhao and Y. Liu, "Modulating the metal-insulator transition in VO₂/Al₂O₃ (001) thin films by grain size and lattice strain," *Journal of Alloys and Compounds*, vol. 879, 160208, pp. 1-10, 2021.
- [19] N. V. Andreeva, P. A. Turalchuk, D. A. Chigirev, I. Vendik, E. A. Ryndin and V. V. Luchinin, "Electron impact processes in voltage-controlled phase transition in vanadium dioxide thin films," *Chaos, Solitons and Fractals*, vol. 142, 110503, pp. 1-6, 2021.
- [20] Z. Yang, C. Ko, V. Balakrishnan, G. Gopalakrishnan and S. Ramanathan, "Dielectric and carrier transport properties of vanadium dioxide thin films across the phase transition utilizing gated capacitor devices," *Physical Review B*, vol. 82, 205101, pp. 1-7, 2010.
- [21] S. H. Lee, M. K. Kim, J. W. Lee, Z. Yang, S. Ramanathan and S. Tiwari, "Vanadium Dioxide (VO₂) is also a Ferroelectric: Properties from Memory Structures," in *2011 11th IEEE International Conference on Nanotechnology*, 2012.

- [22] K. Kawatani, H. Takami, T. Kanki and H. Tanaka, "Metal-insulator transition with multiple micro-scaled avalanches in VO₂ thin film on TiO₂(001) substrates," *Applied Physics Letters*, vol. 100, 173112, pp. 1-3, 2012.
- [23] A. Ueno, J. Kim and H. Nagano, "Thermophysical Properties of Metal-Insulator Transition Materials During Phase Transition for Thermal Control Devices," *International Journal of Heat and Mass Transfer*, vol. 166, 120631, pp. 1-8, 2021.
- [24] V. A. Klimov, I. O. Timofeeva, S. D. Khanin, E. B. Shadrin, A. V. Ilinskiĭ and F. Silva-Andrade, "Hysteresis Loop Construction for the Metal-Semiconductor Phase Transition In Vanadium Dioxide Thin Films," *Technical Physics*, vol. 47, no. 9, pp. 1134-1139, 2002.
- [25] C. JiKun, L. XinLing, Y. Xun, Z. YuLiang, G. YanFeng, Z. YanFei, L. RuiHeng, C. LiDong and C. NuoFu, "Investigation of the thermal conductivities across metal-insulator transition in polycrystalline VO₂," *Chinese Science Bulletin*, vol. 57, no. 26, pp. 3393-3396, 2012.
- [26] G. Hamaoui, N. Horny, C. L. Gomez-Heredia, J. A. Ramirez-Rincon, J. Ordonez-Miranda, C. Champeaux, F. Dumas-Bouchiat, J. J. Alvarado-Gil, Y. Ezzahri, K. Joulain and M. Chirtoc, "Thermophysical characterisation of VO₂ thin films hysteresis and its application in thermal rectification," *Scientific Reports*, vol. 9, no. 1, pp. 8728-8737, 2019.
- [27] J. Mizsei and J. Lappalainen, "Thermal-electronic integrated circuits using thermally sensitive VO₂ MIT material," *Materials Today: Proceedings*, vol. 2, no. 8, pp. 4272-4279, 2015.
- [28] J. Mizsei, M. C. Bein, J. Lappalainen, L. Juhász and B. Plesz, "The phonsistor - a novel VO₂ based nanoscale thermal-electronic device and its application in thermal-electronic logic circuits (TELC)," *Procedia Engineering*, vol. 168, pp. 1070-1073, 2016.
- [29] J. B. Goodenough, "The two components of the crystallographic transition in VO₂," *Journal of Solid State Chemistry*, vol. 3, no. 4, pp. 490-500, 1971.
- [30] D.-H. Qiu, Q.-Y. Wen, Q.-H. Yang, Z. Chen, Y.-L. Jing and H.-W. Zhang, "Electrically-driven metal-insulator transition of vanadium dioxide thin films in a metal-oxide-insulator-metal device structure," *Materials Science in Semiconductor Processing*, vol. 27, pp. 140-144, 2014.

- [31] V. Raja, K. Hadiyal, A. K. Nath, L. R. Viannie, P. Sonar, J. Molina-Reyes and R. Thamankar, "Effect of controlled humidity on resistive switching of multilayer VO₂ devices," *Materials Science & Engineering B*, vol. 264, 114968, pp. 1-8, 2021.
- [32] L. Rodríguez, E. d. Corro, M. Conroy, K. Moore, F. Sandiumenge, N. Domingo, J. Santiso and G. Catalan, "Self-Pixelation Through Fracture in VO₂ Thin Films," *ACS Applied Electronic Materials*, vol. 2, no. 5, pp. 1433-1439, 2020.
- [33] S. Chouteau, S. Mansouri, M. L. O. N. Mohamedou, J. Chaillou, A. O. Suleiman, B. L. Drogoff and M. Chaker, "Investigation of the metal-to-insulator transition of N-doped VO₂(M1) thin films," *Applied Surface Science*, vol. 554, 149661, pp. 1-8, 2021.
- [34] Y. Zhang, J. Zhang, X. Zhang, C. Huang, Y. Zhong and Y. Deng, "The additives W, Mo, Sn and Fe for promoting the formation of VO₂(M) and its optical switching properties," *Materials Letters*, vol. 92, pp. 61-64, 2013.
- [35] A. Krammer, A. Magrez, W. A. Vitale, P. Mocny, P. Jeanneret, E. Guibert, H. J. Whitlow, A. M. Ionescu and A. Schüler, "Elevated transition temperature in Ge doped VO₂ thin films," *Journal of Applied Physics*, vol. 122, no. 4, 2017.
- [36] D.-W. Oh, C. Ko, S. Ramanathan and D. G. Cahill, "Thermal conductivity and dynamic heat capacity across the metal-insulator transition in thin film VO₂," *Applied Physics Letters*, vol. 96, 151906, pp. 1-3, 2010.
- [37] E. Stavrinidou, R. Gabrielsson, E. Gomez, X. Crispin, O. Nilsson, D. T. Simon and M. Berggren, "Electronic plants," *Science Advances*, vol. 1, no. 10, 2015.
- [38] H.-S. P. Wong, S. Raoux, S. Kim, J. Liang, J. P. Reifenberg, B. Rajendran, M. Asheghi and K. E. Goodson, "Phase Change Memory," *Proceedings of the IEEE*, vol. 98, no. 12, pp. 2201-2227, 2010.
- [39] J. Ordonez-Miranda, Y. Ezzahri, K. Joulain and J. Drevillon, "Modeling of the electrical conductivity, thermal conductivity, and specific heat capacity of VO₂," *Physical Review B*, vol. 98, 075144, pp. 1-7, 2018.
- [40] S. Samanta, A. K. Raychaudhuri, X. Zhong and A. Gupta, "Dynamic phase coexistence and non-Gaussian resistance fluctuations in VO₂ near the metal-insulator transition," *Physical Review B*, vol. 92, 195125, pp. 1-9, 2015.

- [41] P. J. Hood and J. F. DeNatale, "Millimeterwave dielectric properties of epitaxial vanadium dioxide thin films," *Journal of Applied Physics*, vol. 70, 376, pp. 376-381, 1991.
- [42] H. N. S. Krishnamoorthy, Y. Zhou, S. Ramanathan, E. Narmanov and V. M. Menon, "Tunable hyperbolic metamaterials utilizing phase change heterostructures," *Applied Physics Letters*, vol. 104, 121101, pp. 1-5, 2014.
- [43] G. V. Chandrashekhar, H. L. C. Barros and J. M. Honig, "Heat Capacity of VO₂ Single Crystals," *Materials Research Bulletin*, vol. 8, no. 4, pp. 369-374, 1973.
- [44] C. Leroux, G. Nihoul and G. V. Tendeloo, "From VO₂(B) to VO₂(R): Theoretical structures of VO₂ polymorphs and in situ electron microscopy," *Physical Review B*, vol. 57, no. 9, pp. 5111-5121, 1998.
- [45] R. P. Manginell, D. A. Rosato, D. A. Benson and G. C. Frye-Mason, "Finite Element Modeling of a Microhotplate for Microfluidic Applications," in *Conference: Modeling and Simulation of Microsystems (MSM '99)*, San Juan, 1999.
- [46] X. J. Hu, A. Jain and K. E. Goodson, "Investigation of the natural convection boundary condition in microfabricated structures," *International Journal of Thermal Sciences*, vol. 47, no. 7, pp. 820-824, 2007.
- [47] A. Jain, K. Ness, A. McConnell, L. Jiang and K. Goodson, "Design, Fabrication and Thermal Characterization of a MEMS Device For Control of Nerve Cell Growth," in *Proceedings of the ASME 2003 International Mechanical Engineering Congress and Exposition*, Washington, DC, USA. , 2003.
- [48] X. Wang, R. Guo, Q. Jian, G. Peng, Y. Yue and N. Yang, "Thermal characterization of convective heat transfer in microwires based on modified steady state "hot wire" method," *ES Materials & Manufacturing*, vol. 5, pp. 65-71, 2019.
- [49] C. Cheng, W. Fan, J. Cao, S.-G. Ryu, J. Ji, C. P. Grigoropoulos and J. Wu, "Heat Transfer across the Interface between Nanoscale Solids and Gas," *ACS Nano*, vol. 5, no. 12, pp. 10102-10107, 2011.