

HORNUNG PÉTER
TUDOMÁNYOS DIÁKKÖRI KONFERENCIA DOLGOZAT

BUDAPESTI MŰSZAKI ÉS GAZDASÁGTUDOMÁNYI EGYETEM
GÉPÉSZMÉRNÖKI KAR



M Ű E G Y E T E M 1 7 8 2

TUDOMÁNYOS DIÁKKÖRI KONFERENCIA DOLGOZAT

BUDAPESTI MŰSZAKI ÉS GAZDASÁGTUDOMÁNYI EGYETEM
GÉPÉSZMÉRNÖKI KAR

HORNUNG PÉTER
TUDOMÁNYOS DIÁKKÖRI KONFERENCIA
DOLGOZAT

Nanoméretű VO₂ fázisváltó memória kapcsolásának vizsgálata
végeelem szimulációval

Témavezető:

Dr. Pósa László
tudományos munkatárs,
EK MFA, Nanoérzékelők Laboratórium;
BME Fizika Tanszék

Budapest, 2022

Tartalomjegyzék

Absztrakt	iv
Jelölések jegyzéke	v
1. Bevezetés	1
2. Szakirodalmi áttekintés	3
2.1. Jelenlegi félvezető memóriák	3
2.2. Rezisztív kapcsolók	3
2.3. Memrisztorok alkalmazási területei.....	5
3. VO₂ fázisváltó memória	8
3.1. Általános bemutatás	8
3.2. Szimuláció alapjául szolgáló eszköz bemutatása.....	8
4. Matematikai háttér	14
4.1. Elektromos peremérték-probléma.....	14
4.1.1. Differenciálegyenlet	14
4.1.2. Peremfeltételek	14
4.2. Termikus peremérték-probléma.....	16
4.2.1. Differenciálegyenlet	16
4.2.2. Peremfeltételek	16
4.3. Elektrotermikus peremérték-probléma	17
5. Szimulációs modell	18
5.1. Geometria.....	18
5.2. Anyagtulajdonságok	19
5.3. Illesztési paraméterek	21
5.4. Térbeli diszkretizáció.....	22
5.5. Megoldási folyamat	23
6. Eredmények	25
6.1. Mezőváltozó eloszlások	25
6.2. Ellenállás-feszültség és áram-feszültség karakterisztikák	27
6.3. Kapcsolási paraméterek	30
7. Konklúzió	34

7.1. Fejlesztési javaslat	35
8. Összefoglaló	36
9. Felhasznált források	37
10. Summary	40

Absztrakt

A vanádium-dioxid (VO_2) 68 °C körüli hőmérsékleten szerkezeti átalakuláson megy keresztül, melynek során az anyag elektromos ellenállása több nagyságrenddel csökken. A fázisátalakulás azonban a tapasztalatok alapján nem csak a környezeti hőmérséklet megemelésével, hanem elektromos úton is kiváltható: elegendően nagy feszültség alkalmazása esetén a réteg átbillenthető a kis ellenállású állapotba, a feszültség levételével pedig visszalakul az eredeti nagy ellenállású állapotba. A VO_2 tehát alkalmas illékony memória létrehozására, melyek alapvető építőelemei lehetnek a mesterséges neurális hálózatok hardver szintű megvalósításának, mivel mesterséges neuron hozható létre belőlük.

Az elmúlt évtizedben a VO_2 alapú rezisztív kapcsolók rendkívül kutatott terület volt, azonban jelenleg sincs egyetértés az irodalomban, hogy milyen fizikai folyamatok váltják ki a kapcsolás jelenségét. Ebben a dolgozatban külön-külön bemutatom a kapcsolást feltételezetten kiváltó két fizikai folyamatot (elektromos mező, illetve Joule-hő), valamint, hogy ezek együttes hatása hogyan játszhat szerepet a folyamatban.

A dolgozat célja a kapcsolás körülményeinek és fizikai paramétereinek feltárása és bemutatása. A vizsgálatot egy valós eszköz alapján készült végeselem szimuláció segítségével végzem. Ismertetem az eszköz felépítését, az az alapján felállított szimulációs modellt, az eredményeket és a belőlük levonható következtetéseket. Az eredményeket mérési adatokkal való összehasonlítással validálom.

Kulcsszavak: *VO_2 rezisztív memória, mikroelektronika, végeselem szimuláció*

Jelölések jegyzéke

Latin betűk

Jelölés	Megnevezés, megjegyzés, érték	Mértékegység
c_p	állandó nyomáson vett fajhő	J/(kg·K)
d	rés mérete	m
E	elektromos térerősség	V/m
E_c	karakterisztikus elektromos térerősség	V/m
E_{tiltott}	tiltott sáv szélessége	eV
h	hőátadási tényező	W/(m ² ·K)
h_{th}	termikus kontakt hőátadási tényezője	W/(m ² ·K)
I	áram	A
J	áramsűrűség	A/m ²
J_i	beiktatott áraműrűség	A/m ²
J_n	áramsűrűség normál irányú komponense	A/m ²
k	hővezetési tényező	W/(m·K)
l	y irányú hosszmérték	m
M	memrisztivitás	Ω
$\mathbf{n}$	normálvektor	m
P	teljesítmény	W
q	elektromos töltés	C
$\mathbf{q}$	egységnyi felületre eső hőáram vektor	W/m ²
Q	térfogati hőforrás	W/m ³
Q_e	Joule-hő (egységnyi térfogatra jutó teljesítmény)	W/m ³
Q_{ted}	termoelasztikus csillapítás	W/m ³
$\mathbf{r}$	helyvektor	m
R	ellenállás	Ω
R_0	alacsony feszültség mellett mért ellenállás	Ω
R_s	sorosan kapcsolt ellenállás	Ω
R_{th}	termikus kontakt ellenállás	m ² ·K/W
t	vastagság	m
T	hőmérséklet	°C
T_0	alaphőmérséklet	°C
T_c	kapcsolási hőmérséklet	°C
$\mathbf{u}_{trans}$	transzlációs sebesség vektor	m/s

Latin betűk

Jelölés	Megnevezés, megjegyzés, érték	Mértékegység
V	feszültség	V
V_c	karakterisztikus feszültség	V
V_{bias}	eszközön eső feszültség	V
V_{drive}	meghajtó feszültség	V
w	x irányú hosszmérték	m

Görög betűk

Jelölés	Megnevezés, megjegyzés, érték	Mértékegység
α	vezetési mechanizmus típusát meghatározó kitevő	1
Γ	vizsgált felületrész	1
ρ	sűrűség	kg/m ³
ρ	fajlagos ellenállás	$\Omega \cdot m$
ρ_0	alacsony feszültségen mért fajlagos ellenállás	$\Omega \cdot m$
σ	fajlagos vezetőképesség	S/m
ϕ	mágneses fluxus	Wb
ϕ	skalárpotenciál	V
Ω	vizsgált térrész	1

Indexek, kitevők

Jelölés	Megnevezés, értelmezés
d	alsó felület
E	elektromos Dirichlet-peremfeltétel kapcsolódó mennyiség
H	termikus Robin-peremfeltétel kapcsolódó mennyiség
J	elektromos Neumann-peremfeltételhez kapcsolódó mennyiség
k	futóindex
ON	bekapcsolt állapot
OFF	kikapcsolt állapot
$reset$	kikapcsolási mennyiség
set	bekapcsolási mennyiség
T	termikus Dirichlet-peremfeltétel kapcsolódó mennyiség
u	felső felület

1. Bevezetés

A hagyományos félvezető memóriák egyre kevésbé tudják kiszolgálni a napjainkra jelentősen megnövekedett adattárolási és feldolgozási igényt. A rajtuk tartott információhoz való hozzáférés, illetve a velük való kommunikáció rendkívül energiaigényes, ezenfelül méretük további csökkentése megbízhatósági problémákhoz is vezethet. Éppen ezért szükség van újfajta architektúrák bevezetésére, melyek alkalmasak az imént felsorolt problémák kiküszöbölésére.

Alternatívaként szolgálhat a rezisztív kapcsolók használata, melyeknek nem csak erőforrás-szükséglete kisebb, de méretük is nagymértékben csökkenthető. Ezen felül képesek egyszerre a memória és a processzor szerepét ellátni, mivel adattárolásra és számítási feladatokra is felhasználhatók.

Dolgozatomban egy valós eszköz alapján, végeselem szimuláció segítségével elemzem egy rezisztív kapcsolóban végbemenő kapcsolási folyamat körülményeit, és az eszköz OFF állapotában mutatott karakterisztikáit. Ehhez a 2. fejezetben először bemutatom a jelenleg a piacon fellelhető félvezető memóriákat, majd a rezisztív kapcsolót. Utóbbit a szakirodalom alapján részletesebben is elemzem, ismertetve felépítését, működését és alkalmazási területeit, kitérve a legmodernebb kutatási területekre is.

A 3. fejezet elején röviden bemutatom a VO_2 alapú fázisváltó memóriát, majd hosszabban elemzem annak egy valós eszközben történő implementációját. Ismertetem a valós eszköz legyártásának körülményeit, a geometriai kialakítását és a rá jellemző elektromos karakterisztikákat. Kifejtem, hogyan változik az eszköz ellenállása a hőmérséklet függvényében, bemutatom az áram-feszültség karakterisztikákat, valamint leírást adok a kapcsolást jellemző paramétereiről. Az itt bemutatott eszköz az alapja a későbbi modellalkotásnak és végeselem szimulációnak.

A 4. fejezetben felvázolom az eszköz működéséről alkotott matematikai modellt, a problémát termikus és elektromos komponensekre bontva. Áttekintést adok a két esetet leíró differenciálegyenletekről, valamint a hozzájuk tartozó peremfeltételekről. Ezután bemutatom, hogy a két eset hogyan kapcsolható össze egy elektrotermikus modellben. Az ismertetett differenciálegyenleteket később numerikusan, végeselem szimuláció segítségével oldom meg.

Az 5. fejezetben először a használt végeselem szoftverről adok rövid áttekintést, majd bemutatom a valós eszköz alapján készült 3D geometriát, melyet a szimulációhoz használok. Részletesen felvázolom az alkalmazott anyagtulajdonságokat, melyek az eszköz viselkedését

jelentős mértékben meghatározzák. A szimuláció célja, hogy minél jobban visszaadja a valós eszköz által mutatott karakterisztikákat, ami által betekintést nyerhetünk a kapcsolás jelensége mögött álló fizikai folyamatokba. Röviden ismertetem a numerikus modellhez alkalmazott térbeli diszkretizációt és a megoldás folyamatát is.

A 6. fejezetben ismertetem a végeselem szimuláció eredményeit, bemutattva a kialakuló hőmérséklet és feszültség eloszlást az eszközben. Összehasonlítom a tisztán termikus, tisztán elektromos és az őket összekapcsoló elektrotermikus szimulációval kapott eredményeket egymással, valamint a mérési eredményekkel. Meghatározom a mérési eredményeket legjobban visszaadó modellt, és szemléltetem a hozzá tartozó ellenállás-feszültség, valamint áram-feszültség karakterisztikákat. Bemutatom a szimulációból kapott kapcsolási paramétereket, és magyarázatot adok az esetleges eltérések okaira.

A 7. fejezetben az eredmények fényében levonom a következtetést és javaslatot adok a munkafolyamat fejlesztésére, a jövőben elvégzendő feladatokra. Végül, a 8. fejezetben röviden áttekintem a feldolgozott témát és összefoglalom a dolgozatot.

2. Szakirodalmi áttekintés

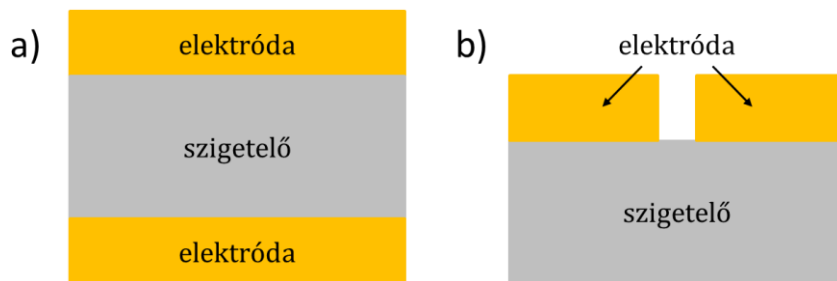
2.1. Jelenlegi félvezető memóriák

Az elektronikában digitális adattárolásra elsődlegesen fém-oxid alapú félvezető memóriákat alkalmaznak. Ezeken az eszközökön belül alapvetően két típust különböztethetünk meg: az illékony (felejtő) és nem illékony (nem felejtő) memóriákat. Az illékony memóriák sokkal nagyobb olvasási és írási sebességek elérésére képesek, ezáltal biztosítva a gyors adattárolást és hozzáférést. Az őket működtető elektromos jel lekapcsolásakor azonban törlődik belőlük minden információ, így azt csak ideiglenesen képesek tárolni. Általában kisebb tárhellyel rendelkeznek, mint a nem illékony memóriák. Egyik legismertebb példa rájuk a számítógépekben megtalálható RAM (Random-Access Memory). Ezzel szemben a nem illékony memóriák megőrzik állapotukat a tápfeszültség megszűnésekor is, tehát az információ tartósan tárolható rajtuk. Nagy mennyiségű adat megtartására képesek, hátrányuk azonban, hogy működésük jelentősen lassabb. Ezen kategóriába tartozik többek között a ROM (Read-Only Memory) és az EPROM (Erasable Programmable Read-Only Memory).

2.2. Rezisztív kapcsolók

A rezisztív kapcsoló olyan két terminállal rendelkező áramköri elem, melynek elektromos ellenállása változtatható megfelelő nagyságú feszültség/áram ráadásával. Általános esetben legalább két megkülönböztetett ellenállás-állapottal rendelkezik, melyek között az eszközt reverzibilisen kapcsolhatjuk. Ennek megfelelően a kapcsolás folyamata során nemlineáris karakterisztika jellemzi [1]. Alacsony feszültségen viszont az eszköz ellenállása változatlan marad, így kiolvasható az aktuális állapota. Az ellenállás értéke a múltbeli állapotaitól (is) függ, ezért az eszköz memóriával rendelkező ellenállásnak is tekinthető. Az irodalomban gyakran használják rá a memrisztor kifejezést, melyet a memória és a rezisztor szavak összevonásából kapunk. Dolgozatomban ezért a memriszor és rezisztív kapcsoló szavakat szinonimaként fogom használni. A memrisztor létezését L. Chua jósolta 1971-ben [2], első előállítás pedig a HP által 2008-ban készített TiO_2 alapú eszközhöz kötődik [3]. Szokás a negyedik fundamentális áramköri elemnek is nevezni az ellenállás, a kondenzátor és a tekercs mellett. Jellemzésére a memrisztivitást (M) használjuk, mely a töltésmennyiség (q) és a mágneses fluxus (ϕ) között teremt kapcsolatot. Megjegyzendő, hogy a rezisztív kapcsolás jelensége már az 1960-as évek óta kutatott terület, azonban az akkori eszközök megbízhatósága még nem tette lehetővé gyakorlati alkalmazásukat [4].

A rezisztív kapcsolók felépítésüket tekintve sokfélék lehetnek, a legelterjedtebb közülük a vertikális (szendvicsszerkezetes) kialakítás (1.a. ábra). Ebben egy szigetelő réteg van közrefogva két vezető (általában fém) elektróda által. Elegendően nagy feszültség alkalmazása esetén a szigetelő réteg magas ellenállású állapotból (HRS: high resistance state) alacsony ellenállású állapotba megy át (LRS: low resistance state), amely során egy vezetési csatorna alakul ki a két elektróda között. A HRS és LRS állapotokat az eszköz OFF és ON állapotaként is értelmezhetjük. Egy másik lehetséges elrendezésben az elektródákat a szigetelőréteg tetején helyezik el, köztük valamekkora rést hagyva. Ez a laterálisan kialakítás (1.b. ábra), melyben a szigetelő réteg, illetve a rés mérete tipikusan 5 – 100 nm között változik. A rés elrendezés előnye, hogy kisebb térrészre fókuszálható a kapcsoló aktív tartománya, azonban az elektródák instabilitása is jelentősebb.



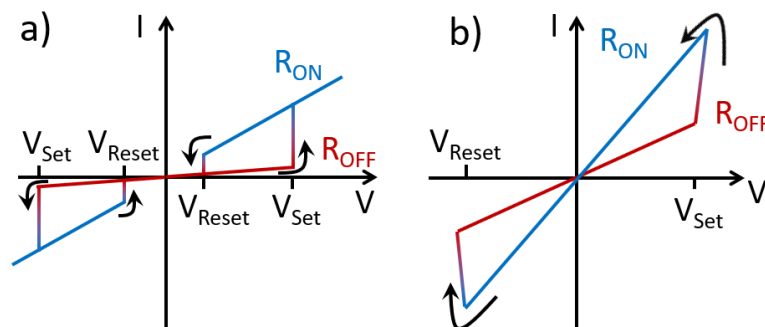
1. ábra: Rezisztív kapcsoló kialakítása a) vertikálisan és b) laterálisan

A memriszorokat számos szempont szerint csoportosíthatjuk a kapcsolási jellege és az azt kiváltó fizikai mechanizmusok alapján. A következő pár bekezdésben ezeket fogom bemutatni.

A félvezető memóriákhoz hasonlóan léteznek illékony és nem illékony rezisztív kapcsolók. Előbbi esetben az eszköz a ráadott feszültség megszűnésével visszatér az alacsony feszültségen felvett stabil állapotába, míg utóbbi esetben megtartja az írási folyamat során beállított állapotát. Az illékony memóriák közé tartozik többek között a VO_2 , melyet a 3. fejezetben mutatok be részletesebben.

A kapcsolási módot tekintve az eszköz lehet unipoláris vagy bipoláris. A feszültséget nulláról fokozatosan növelve elérhető az az érték, amelyen az eszköz HRS állapotból LRS állapotba vált. Ez a bekapcsolási folyamat és a hozzá tartozó küszöbértéket bekapcsolási feszültségnek (V_{set}) nevezzük. Ezzel ellentétes a kikapcsolási folyamat, melyhez a kikapcsolási feszültség (V_{reset}) tartozik. A kapcsolások közben az áram-feszültség ($I(V)$) görbében hiszterézis figyelhető meg, azonban a passzív áramköri jellegének következtében mindig áthalad az origón. Unipoláris esetben a be- és kikapcsolási feszültségek értéke nem függ a feszültség polaritásától, az eszköz karakterisztikája pozitív és negatív polaritás esetén

is azonos (2.a. ábra). Bipoláris kapcsolásnál a be- és kikapcsolás különböző polaritásokon valósul meg, tehát V_{set} és V_{reset} ellenkező előjellel rendelkezik (2.b. ábra).



2. ábra: Tipikus $I(V)$ karakterisztika illusztrációja a) illékony unipoláris és b) nem illékony bipoláris memrisztorhoz, [1] alapján

A két oldalt összekötő vezetési útvonal szerkezete szerint egy memrisztor lehet filamentáris vagy interfész alapú. Filamentáris vezetés esetén a gyakorlatban az első kapcsolás általában nagyobb feszültségen történik, mely következtében a szigetelő (memrisztív) rétegben kialakul egy vezető csatorna [5]. Ez a jelenség az elektroformáció. Filamentáris vezetés esetén az eszközre adott feszültség elektromos mezője áthangolja a vezető csatornában az anyag szerkezetét, mely aztán ellenállásváltozást eredményez. Ilyenkor a kapcsolás tulajdonságai nem függenek az elektródák felületeinek méretétől, csak a vezetési csatorna keresztmetszetétől. Interfész alapú vezetésnél az ellenállásváltozás az elektródák és a szigetelő közti felületen jön létre, ahol egy Skottky-gát alakul ki [6]. Az ellenállás ezen potenciálgát változtatásával hangolható. Ebben az esetben kapcsolási paraméterek függenek az elektródák felületének méretétől.

A rezisztív kapcsolás során számos fizikai jelenség játszódhat le egyszerre az aktív tartományban, amelyek pontos leírása a legtöbb esetben még tisztázatlan. Tovább nehezíti a megértést, hogy a folyamatok olykor egyidejűleg is jelen lehetnek [7]. Különböző memrisztív anyagok esetén más-más folyamatok játszódnak le, ezért csoportosíthatjuk őket az alapján, hogy melyik fizikai mechanizmus domináns az adott eszköznél. Ennek megfelelően vannak többek között elektrokémiai fémesezésen, vegyérték-változáson és fázisátalakuláson alapuló memóriák.

2.3. Memrisztorok alkalmazási területei

A memrisztor gyakorlati felhasználása nagy lehetőségeket rejt magában. Egyszerű szerkezeti felépítésének, illetve méretbeli és funkcionalitásbeli skálázhatóságának köszönhetően

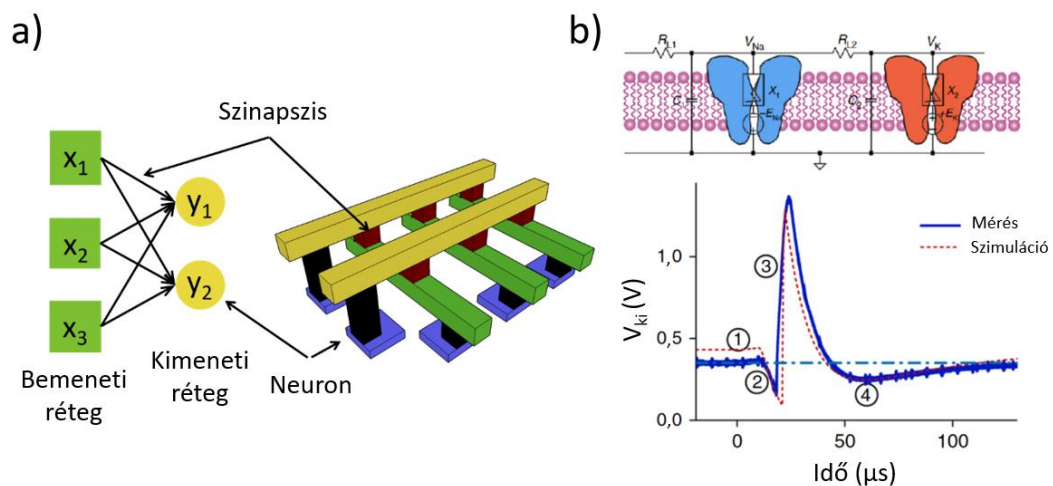
ígéretes jelölt arra, hogy bizonyos feladatokat a CMOS áramköröknél hatékonyabban (gyorsabban és kisebb fogyasztással) végezzen el.

Hangolható ellenállásának köszönhetően mind digitális, mind analóg elektronikus eszközök készítésében felhasználható. Digitális alkalmazásban az eszköz kvantált módon kapcsolható LRS és HRS között, míg analóg területen az ellenállás folytonosan változtatható egy adott tartományon belül. Áramkörökbe beépítve alkalmazható lehet erősítőként [8], oszcillátorként [9], adaptív filterként [10] vagy szélessávú vevőkészülékként [11]. Logikai kapuk megvalósítására is képes, ugyanis három párhuzamosan kapcsolt memrisztor segítségével a NAND művelet elvégezhető [12].

A memrisztorok legkézenfekvőbb alkalmazási területe memóriaként (RRAM: Resistive RAM) való használata. Ilyen téren már több fizikai megvalósítás is született, többet között fázisváltó memóriák (PCM: Phase Change Memory) [13], vagy elektrokémiai memóriák (CBRAM: Conductive Bridging RAM) [14] készítésével. Az RRAM-ok képesek a számítógépekben található flash memória kiváltására is, mivel már számos paraméterben lekörözi őket [15]. A memrisztorokat keresztsoros elrendezésbe (crossbar-array) kötve létrehozhatók nagyobb memóriatömbök is [16].

Ennél lényegesen innovatívabb kutatási terület mesterséges neurális hálózatok (ANN) memrisztorokkal történő hardver szintű megvalósítása. Napjainkban a szoftver-alapú ANN használata már elterjedtnek tekinthető, melynek működése azonban rendkívül gépigényes, mivel a memória és a feldolgozó egységek közötti kommunikáció jelentősen megnöveli a fogyasztást és korlátozza a sebességet. Ezt a problémát küszöböli ki a memrisztorok keresztsoros elrendezése, amely lehetővé teszi, hogy az adatok tárolása és feldolgozása egy helyen történjen (3.a. ábra). Ezentúl a műveletek jelentős párhuzamosítása tovább növeli a sebességet. A hardveresen létrehozott ANN esetén a nem illékony memóriák valósítják meg a szinapszisokat, míg az illékony memóriákból a nemlineáris aktivációs függvényt biztosító neuronokat lehet elállítani [17].

Illékony memrisztorok felhasználásával olyan mesterséges neuron is létrehozható, amellyel a biológiai akciós potenciálhoz nagyon hasonló jelalak állítható elő (3.b. ábra) [18]. Ez lehetővé teszi, hogy a mesterséges neuron bemenetére egy szenzort kötve, a szenzor jelét az emberi idegrendszer által befogadható jellé alakítsuk át, így mesterséges érzékelést (pl. hallás) valósítsunk meg.



3. ábra: Memriszorok felhasználása a) mesterséges neurális hálózatként, [1] alapján, b) mesterséges neuronként akciós potenciál létrehozására [18]

Összefoglalva tehát a memriszorok képesek az adatok egy helyen történő tárolására és feldolgozására, így sok számítási feladatot hatékonyabban és gyorsabban képesek megoldani a jelenlegi eszközökhöz képest. Lehetővé teszik továbbá az ember-gép interfész kialakítását is.

3. VO₂ fázisváltó memória

3.1. Általános bemutatás

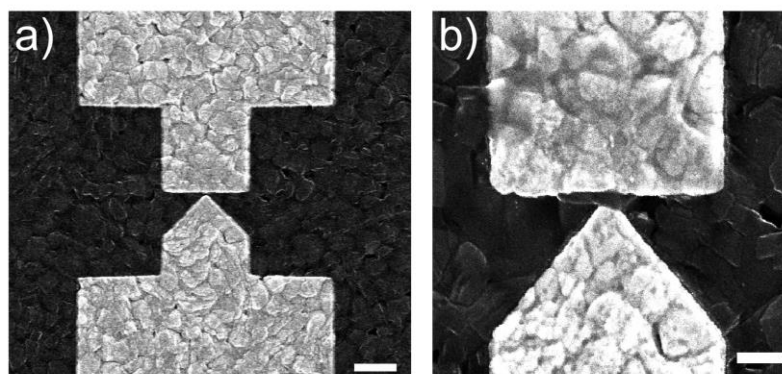
A vanádium-dioxid (VO₂) 68 °C körüli hőmérsékleten szerkezeti átalakuláson megy keresztül: félvezető monoklin szerkezetből fémes tetragonális állapotba vált. Ennek megfelelően az anyag elektromos ellenállása több nagyságrenddel csökken, illetve az optikai tulajdonságai is megváltoznak. Ez az úgynevezett szigetelő-fém átalakulás (IMT: Insulator-Metal Transition). A tapasztalatok alapján azonban nem csak a környezeti hőmérséklet megemelésével, hanem elektromos úton is kiváltható a fázisátalakulás: elegendően nagy (polaritástól független) feszültség alkalmazása esetén réteg átbillenthető a kis ellenállású állapotba. A feszültség levételével pedig visszaalakul az eredeti nagy ellenállású állapotba. Ezek a tulajdonságok alkalmassá teszik a VO₂-t a memrisztorokban való felhasználásra [19, 20]. A 2.2. alfejezetben a rezisztív kapcsolók csoportosítására alkalmazott szempontok alapján a VO₂ alapú memrisztor tehát: egy unipoláris kapcsolással bíró illékony memória, melynek vezetési módja filamentáris, illetve a kapcsolási jelensége fázisátalakulással magyarázható.

A VO₂ alapú memrisztorok megvalósítása általában az *1.b. ábrán* látható laterális elrendezésben történik (de lehetséges a vertikális is). Ennek megfelelően a VO₂ réteg tetején két fém elektródát helyeznek el, melyre aztán feszültséget adnak. Ha a feszültség eléri a V_{set} értéket, az eszköz HRS-ből LRS-be vált. Az így kivitelezett eszközök stabil és reprodukálható működést eredményeznek, melyek életciklusa elérheti a 10⁹ kapcsolást is [21]. A kapcsolási jelenség azonban rendkívül komplex (mind térben, mind időben), az IMT magyarázatára a szakirodalomban sincs egyetértés [22]. Bizonyos esetekben pusztán Joule-hővel, máskor pedig tisztán az elektromos tér jelenlétével magyarázzák a kapcsolást. Dolgozatom célja, hogy ezt a jelenséget részletesen bemutassam és elemezzem az OFF állapotban történő viselkedést, illetve, hogy a kapcsolás körülményeit és paramétereit meghatározzam. Külön hangsúlyt fektetek annak kifejtésére, hogy az elektromos és termikus folyamatok milyen szerepet játszanak az IMT-ben.

3.2. Szimuláció alapjául szolgáló eszköz bemutatása

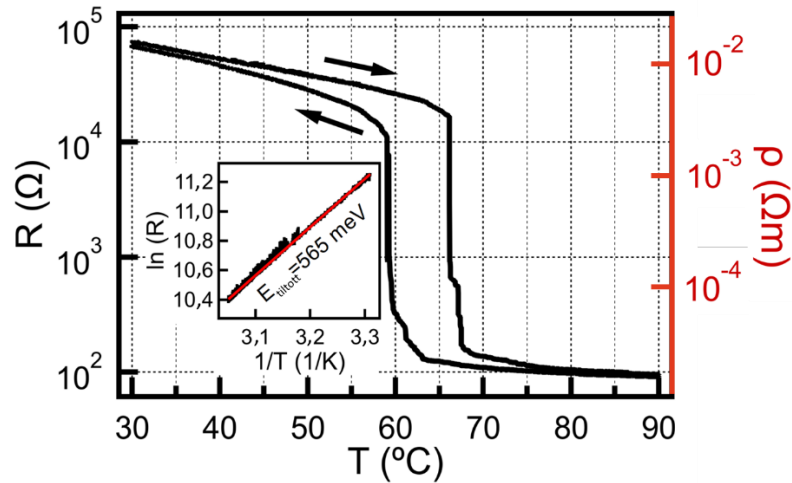
A vizsgálatot egy valós eszköz alapján végzem, melyet az Energiatudományi Kutatóközpontban készítettek el. A legyártott eszközben Si/SiO₂ hordozón lévő VO₂ rétegre Ti/Au elektródákat vittek fel, laterális elrendezésben. A VO₂-t termikus oxidációval hozták létre 100 nm vastag V rétegből, melyet 400 °C-on és 0,1 mbar nyomású ritkított levegőben

hőkezelték 4,5 órán keresztül. Transzmissziós elektronmikroszkóp (TEM) mérés alapján megállapítható, hogy az oxidáció során két különböző sztöchiometriájú vanádium-oxid réteg alakul ki. A felső VO_2 réteg alatt egy vastagabb V_2O_5 réteg jelenik meg. A két réteg vastagsága nem homogén: $t_{\text{VO}_2} = 30 - 50 \text{ nm}$, $t_{\text{V}_2\text{O}_5} = 170 - 190 \text{ nm}$. Az eszköz geometriájának különlegessége, hogy az egymással szemben elhelyezkedő elektródák közül az egyik téglalap, a másik viszont háromszög alakú, a köztük található rés pedig mindössze 30 nm széles (4. ábra). A kialakítás célja, hogy a kapcsolást (IMT-t) egy rendkívül kicsi és jól definiált térrészre összpontosítsa. Az irodalomban szokásos két téglalap alakú elektróda elrendezés esetén ugyanis nem egyértelmű, hogy a kapcsolat az elektródák között (legkisebb távolság és legmagasabb hőmérséklet) vagy az elektródák sarkainál (a csúcs hatás miatti nagy térerősség) történik-e [23]. Esetünkben azonban az elektródák közötti legkisebb távolság és leghegyesebb csúcs is ugyanott van. Az elektródák alakjának kijelölése elektronsugaras litográfiával történt.



4. ábra: Az eszközről készült SEM (Scanning Electron Microscopy) kép az elektromos mérések elvégzése a) előtt és b) után

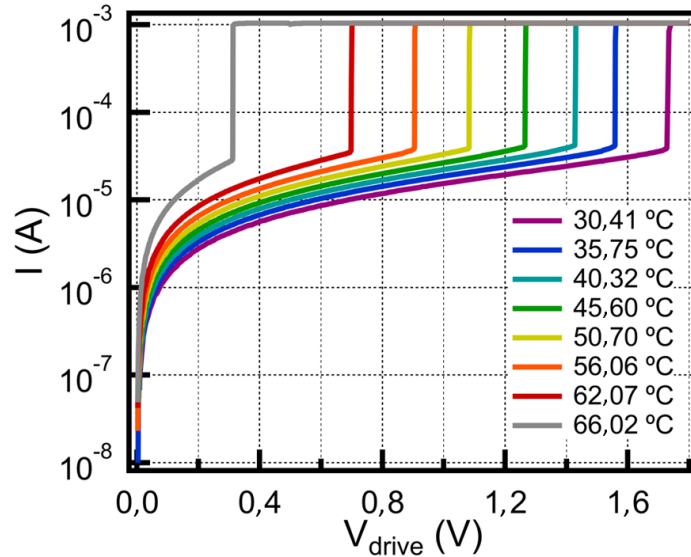
Elektromos ellenállás mérés segítségével megállapítható, hogy a fázisváltási hőmérséklet (T_c) alatt az eszköz félvezető tulajdonságokat mutat ($E_{\text{tiltott}} = 565 \text{ meV}$ tiltott sáv szélességgel, mely az 5. ábra belső paneljén látható). Alacsony feszültség ráadása mellett a hőmérsékletet növelve megvizsgálható az eszköz ellenállásának hőmérséklet függése. A hőmérsékletet szobahőmérsékletről fokozatosan növelve megfigyelhető, hogy amint annak értéke $T_c = 66,22 \text{ }^\circ\text{C}$ fölé emelkedik, az ellenállásban hirtelen csökkenés figyelhető meg (5. ábra), miközben a VO_2 fémes állapotba megy át. A $30 \text{ }^\circ\text{C}$ -on és $100 \text{ }^\circ\text{C}$ -on mért ellenállás értékek hányadosa eléri a 600-at. A visszahűtés során hiszterézis jelenség figyelhető meg, melynek következtében az eszköz $7,2 \text{ }^\circ\text{C}$ -kal kisebb hőmérsékleten vált vissza az eredeti félvezető állapotába.



5. ábra: Az eszköz elektromos ellenállásának hiszterézis görbéje a hőmérséklet függvényében

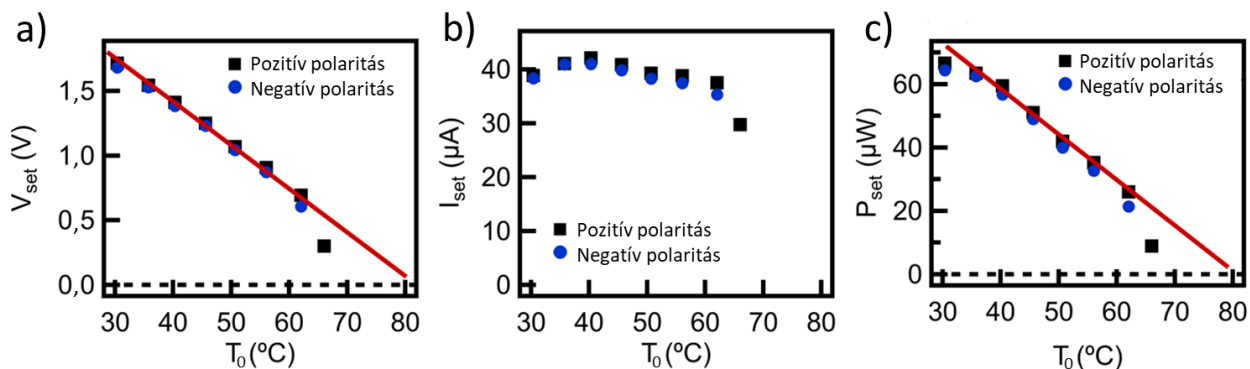
Mint ahogy azt korábban tárgyaltam, a fázisváltozás előidézhető feszültség ráadásával is. A fázisváltozás akkor következik be, amikor az eszközre kapcsolt meghajtó feszültség (V_{drive}) eléri a kapcsolási feszültséget (V_{set}). Ehhez V_{drive} értéke fokozatosan növelve volt 0 V-ról addig, amíg az eszköz alacsony ellenállású állapotba nem váltott. Ha a vizsgálatot szobahőmérsékleten végezzük, ez az érték $V_{set} = 1,71$ V. Megjegyzendő, hogy a memrisztorral sorosan egy $R_s = 380 \Omega$ ellenállás van bekötve, hogy az alacsony ellenállású állapotban a disszipált teljesítményt és az átfolyó áramot korlátozza (illetve, hogy az eszköz tönkremenetelét megelőzze). Így az eszközön valójában $V_{bias} = V_{drive} - I \cdot R_s$ nagyságú feszültség esik. A kapcsolási ciklus $10^4 - 10^5$ alkalommal megismételhető, melyek során a kapcsolási paraméterek nem változnak. Megfigyelhető továbbá, hogy az eszköz nem degradálódik jelentős mértékben (4.b. ábra).

Amennyiben a feszültséget szobahőmérséklet helyett valamilyen T_0 alaphőmérséklet alkalmazása mellett kapcsoljuk az eszközre, megfigyelhető, hogy V_{set} értéke megváltozik. A 6. ábra mutatja az $I(V)$ görbéket különböző hőmérsékletek alkalmazása mellett. Az átláthatóság kedvéért csak a pozitív polaritású feszültségre adott válasz látható az ábrán. Jól látható, hogy a kapcsolási feszültség csökkenő tendenciát mutat növekvő T_0 mellett. Ez a trend azonban mind termikusan, mind elektromos kiváltott IMT-vel megmagyarázható.



6. ábra: Mért áram-feszültség karakterisztikák különböző alaphőmérsékletek mellett

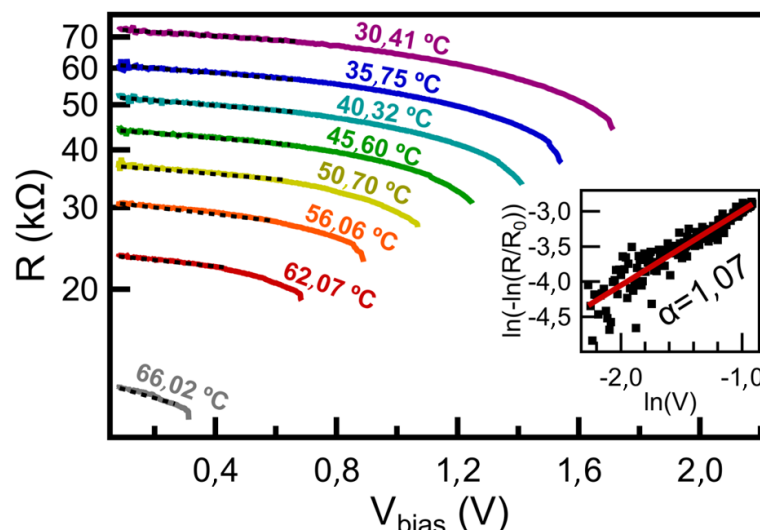
Az alaphőmérséklettől való függés részletesebb leírásához a kapcsolási feszültséget (V_{set}), a kapcsolási áramot (I_{set}) és a kapcsolási teljesítményt (P_{set}) használhatjuk. Ezeket az értékeket az egyes alaphőmérsékletek függvényében a 7. ábra mutatja. Az egyes értékek 10 egymást követő azonos alaphőmérsékleten elvégzett mérés eredményeinek átlagából adódtak. Az ábrázolt pontok közül a legmagasabb T_0 -hoz (66,02 °C) tartozó kapcsolási paraméterek esetében megfigyelhető némi eltérés a többi eredményhez képest. Ebben az esetben T_0 olyan közel volt T_c értékéhez, hogy a kapcsolások során az eszköz általában a fémes állapotban ragadt. Az ábrán fekete/kék színű jelölő pontok a pozitív/negatív polaritású feszültség mellett elvégzett méréshez tartoznak. A negatív polaritású feszültséghez tartozó kapcsolási paraméterek enyhén kisebb értéket mutatnak, mint pozitív polaritás esetén, mely a Thomson-effektussal magyarázható [24]. A legmagasabb T_0 -hoz tartozó V_{set} érték kivételével a kapcsolási feszültségek lineárisan csökkennek T_0 növekedésével, míg I_{set} értéke állandónak tekinthető ($\approx 40 \mu\text{A}$). A kapcsolási teljesítmény pedig ennek megfelelően hasonló tendenciát mutat, mint V_{set} , ugyanis $P_{set} = V_{set} \cdot I_{set}$.



7. ábra: A kapcsolást jellemző paraméterek az alaphőmérséklet függvényében: a) kapcsolási feszültség, b) kapcsolási áram, c) kapcsolási teljesítmény

A kapcsolási paraméterek hőmérsékletfüggésének értelmezéséhez érdemes először a két lehetséges extrém esetet tárgyalni: amikor tisztán termikus és amikor tisztán elektromos hatások felelnek az IMT kiváltásáért. Tisztán termikus esetben az irodalom alapján azt várhatnánk, hogy P_{set} értéke a hőmérséklet függvényében lineárisan csökken és T_c -nél veszi fel a 0 értéket [25]. Esetünkben ugyan a lineáris csökkenés megvan (7.c. ábra), de P_{set} 66,22 °C helyett 80 °C körül metszi a vízszintes tengelyt. Ez a megfigyelés azt sugallja, hogy a Joule-hőnek fontos szerepe van, a termikus leírás önmagában azonban nem magyarázza meg teljesen a jelenséget. A feltételezést alátámasztja, hogy a legmagasabb T_0 (66,02 °C) mellett mért P_{set} értéke jelentősen eltér az addigi lineárisan csökkenő mintától, mely egy másik jelenség egyre növekvő jelenlétére utalhat.

Szintén nem magyarázható pusztán termikus leírással a mért ellenállás-feszültség ($R(V)$) karakterisztikák alakulása. Ezen $R(V)$ görbék láthatók a 8. ábra a különböző alaphőmérsékletek mellett. Az ellenállásoknak csak a HRS állapotban (fázisváltozás előtt) felvett értékei vannak ábrázolva, ugyanis ez a dolgozat csak ezen állapot vizsgálatára terjed ki. Itt arra számíthatnánk, hogy 0 V körüli tápfeszültség mellett az ellenállás értéke konstans marad, ugyanis a disszipált teljesítmény elhanyagolható ($P = V^2/R$ összefüggés miatt). Esetünkben azonban enyhe csökkenés figyelhető meg az ellenállás értékekben már kis feszültség ráadásakor is, mindegyik T_0 esetében. Megjegyzendő azonban, hogy az ellenállás értékek ily módon való csökkenése magyarázható elektromos mező által kiváltott töltéshordozó generálással [26].



8. ábra: Különböző alaphőmérsékletek mellett mért ellenállás-feszültség karakterisztikák a HRS állapotban

A másik extrém eset, amikor a fázisváltozást tisztán elektronikus úton szeretnénk magyarázni. Ekkor a szakirodalom alapján V_{set} értéke a termikus esethez hasonlóan lineárisan csökkenő mintát mutat, a kapcsolási teljesítmény azonban nem követi ezt a tendenciát [27]. Tudjuk azonban, hogy az elektromos mezőnek fontos szerepet kell játszania a kapcsolatban, ugyanis a nanoméretű résben az elektromos térerősség értéke meghaladhatja a 0,5 MV/cm értéket. Ekkora nagyságú elektromos mező egyes esetekben már önmagában is elég fázisváltozás indukáláshoz [27].

Így tehát összességében megfogalmazható az a sejtés, hogy az IMT jelenségét a termikus és az elektromos leírás külön-külön nem magyarázza, hanem ezeknek valamilyen együttes hatása váltja ki a kapcsolást. A következő fejezetekben bemutatom a jelenség részletes vizsgálatához használt végelelem szimulációt.

4. Matematikai háttér

A felvázolt probléma két részre bontható: elektromos és termikus komponensre. Ebben a fejezetben külön-külön bemutatom matematikai háttérüket, először az elektromos [28], majd a termikus részt [29] ismertetve. Ezután a két esetet összekapcsoló elektrotermikus leírásról adok áttekintést.

A folyamatoknak csak az állandósult állapotára vagyunk kíváncsiak, tehát stacionárius vizsgálatról beszélünk. A felhasznált egyenletekben ezért a változók időbeli deriváltjai nullát adnak ($\frac{\partial}{\partial t} = 0$). A megfogalmazott peremérték-problémákat numerikusan, véges elem módszerrel oldom meg.

4.1. Elektromos peremérték-probléma

4.1.1. Differenciálegyenlet

Jelen esetben egy olyan összetett szerkezetben szeretnénk meghatározni a ráadott gerjesztés (potenciálkülönbség) hatására fellépő áramot, mely különböző alakú és anyagtulajdonságú vezetőkből áll. A jelenség tehát (stacionárius) áramlási térként értelmezhető, melyben a mágneses indukció hatása elhanyagolható.

Legyen Ω a vizsgált vezető anyaggal töltött térfogat. Ekkor a megfogalmazott egyszerűsítésekkel a Maxwell-egyenletek a következőképpen írhatóak fel:

$$\nabla \cdot \mathbf{J} = 0, \quad (1)$$

$$\nabla \times \mathbf{E} = 0, \quad (2)$$

$$\mathbf{J} = \sigma \mathbf{E} + \mathbf{J}_i. \quad (3)$$

A (2) egyenletből látható, hogy a vektormező potenciális, így bevezethetjük ϕ skalárpotenciált:

$$\mathbf{E} = -\nabla \phi. \quad (4)$$

Az (1)-(4) egyenletek segítségével megadható az áramlási mezőt leíró Laplace-Poisson-egyenlet:

$$-\nabla \cdot (\sigma \nabla \phi) = -\nabla \cdot \mathbf{J}_i, \quad \mathbf{r} \in \Omega. \quad (5)$$

Esetünkben a beiktatott áramsűrűség nulla ($\mathbf{J}_i = 0$ A/m²), ezért (5) a következőre egyszerűsödik:

$$-\nabla \cdot (\sigma \nabla \phi) = 0. \quad (6)$$

4.1.2. Peremfeltételek

Az Ω tartományt körülvevő zárt Γ felületet felbonthatjuk Γ_{Ek} ($k = 1, 2, \dots, N_E$) és Γ_{Jk} ($k = 1, 2, \dots, N_J$) diszjunkt felületrészekre. A felületrészeket két csoportba sorolhatjuk

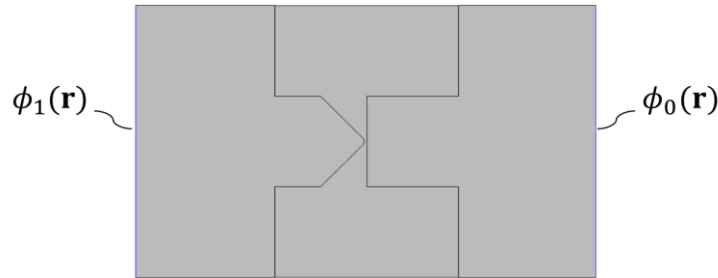
rajtuk definiált peremfeltételek alapján. Az első csoport a Dirichlet-peremfeltétel (E -típusú, Γ_E), a második a Neumann-peremfeltétel (J -típusú, Γ_J). A két típus együttesen az egész külső felületet adja:

$$\Gamma_E \cup \Gamma_J = \Gamma. \quad (7)$$

A Dirichlet-peremfeltétel alkalmazásánál a potenciál nagyságát írjuk elő:

$$\phi(\mathbf{r}) = \phi_k(\mathbf{r}), \quad \mathbf{r} \in \Gamma_{Ek}. \quad (8)$$

A jelölések értelmezésének megkönnyítése érdekében bevezetem az oldalak megkülönböztetésére a 0, 1 indexeket, az eszköz aljának jelölésére pedig a 2 indexet. Esetünkben az eszköz egyik oldalán $\phi_1(\mathbf{r}) = V_{bias}$, a második oldalán pedig $\phi_0(\mathbf{r}) = 0$ V (föld) van definiálva. Az így fellépő potenciálkülönbség $\phi_1(\mathbf{r}) - \phi_0(\mathbf{r}) = V_{bias}$ nagyságú feszültséget hoz létre az eszközön. A 9. ábra az előírt potenciálokat mutatja.



9. ábra: Elektromos Dirichlet-peremfeltételek az eszköz szélein (felülnézetből)

Az eszköz többi külső felületdarabján a Neumann-peremfeltétel érvényesül, azaz az áramsűrűség normál irányú komponense ismert:

$$\sigma \frac{\partial \phi}{\partial n} = J_{n,k}(\mathbf{r}), \quad \mathbf{r} \in \Gamma_{Jk}. \quad (9)$$

Mivel nem folyik ki áram a felületből, $J_{n,k}(\mathbf{r}) = 0$ A/m².

Definiálhatjuk ezen felül a két vezető közeg határán érvényesülő belső feltételeket is. Az elektromos térerősség tangenciális komponense folytonosan halad át a határfelületen:

$$\mathbf{n} \times (\mathbf{E}_u - \mathbf{E}_d) = 0. \quad (10)$$

Az áram normál irányú komponense szintén folytonos két érintkező felületen:

$$\mathbf{n} \cdot (\mathbf{J}_u - \mathbf{J}_d) = 0. \quad (11)$$

A jelenség elektromos leírását tehát a (6) differenciálegyenlet adja, a (8) és (9) peremfeltételekkel kiegészítve.

4.2. Termikus peremérték-probléma

4.2.1. Differenciálegyenlet

A stacionárius hőátadást leíró differenciálegyenlet szilárdtestek esetében:

$$\rho C_p \mathbf{u}_{trans} \cdot \nabla T + \nabla \cdot (\mathbf{q} + \mathbf{q}_r) = Q + Q_{ted} . \quad (12)$$

A mi esetünkben a translációs mozgás sebessége nulla ($\mathbf{u}_{trans} = 0$), a hősugárzás ($\mathbf{q}_r = 0$), valamint a termoelasztikus csillapítás ($Q_{ted} = 0$) hatása pedig elhanyagolható.

A (12) egyenlet bal oldalán található egységnyi felületre eső hőáram vektor ($\mathbf{q}$) a következőképpen határozható meg:

$$\mathbf{q} = -k \nabla T , \quad (13)$$

mely egyenlet a Fourier-féle hővezetési törvény differenciális formája.

A fenti egyszerűsítésekkel élve (12) és (13) a következő közös alakra hozható:

$$-\nabla \cdot (k \nabla T) = Q . \quad (14)$$

4.2.2. Peremfeltételek

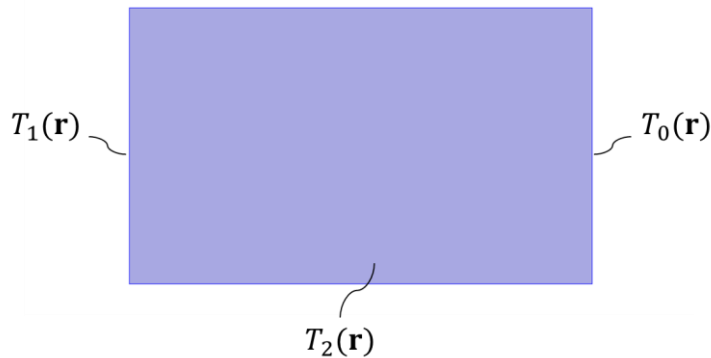
A termikus peremfeltételek definiálásához Γ felületet az elektronikushoz analóg módon felbontjuk diszjunkt Γ_{Tk} ($k = 1, 2, \dots, N_T$) és Γ_{Hk} ($k = 1, 2, \dots, N_H$) felületrészekre. Ezeket a felületrészeket két csoportba sorolhatjuk: Dirichlet-peremfeltétel (T -típusú, Γ_T) és Robin-peremfeltétel (H -típusú, Γ_H). A két típus ezúttal is a teljes külső felületet adja:

$$\Gamma_T \cup \Gamma_H = \Gamma . \quad (15)$$

A Dirichlet-peremfeltétel alkalmazásával a hőmérséklet nagyságát adjuk meg:

$$T(\mathbf{r}) = T_k(\mathbf{r}) , \quad \mathbf{r} \in \Gamma_{Tk} . \quad (16)$$

A vizsgált esetben az eszköz alján, illetve két oldalán fixáljuk a hőmérsékletet $T_0(\mathbf{r}) = T_1(\mathbf{r}) = T_2(\mathbf{r}) = T_0$ konstans értéken. A 10. ábra az előírt hőmérsékleteket ábrázolja.



10. ábra: Termikus Dirichlet-peremfeltételek az eszköz szélein (T_0, T_1) és alján (T_2) (alulnézetből)

Az eszköz többi felületrészén a Robin-peremfeltétet alkalmazunk, mely a szilárd test és a levegő közötti hőátadást jellemzi:

$$-k \frac{\partial T(\mathbf{r})}{\partial n} = h(T - T_\infty), \quad \mathbf{r} \in \Gamma_{Hk}. \quad (17)$$

Az eszközön belüli érintkező felületek között nem folytonos a hőmérséklet-átmenet, melyet a következőképpen definiálhatunk:

$$\mathbf{n} \cdot \mathbf{q} = -h_{th}(T_u - T_d). \quad (18)$$

A h_{th} segítségével definiálható a termikus kontakt ellenállás:

$$R_{th} = \frac{1}{h_{th}}. \quad (19)$$

A jelenség termikus leírását tehát a (14) differenciálegyenlet adja, a (16) és (17) peremfeltételekkel kiegészítve.

4.3. Elektrotermikus peremérték-probléma

Az elektromos és termikus modell a Joule-hőn keresztül kapcsolható össze, mely az egységnyi térfogatra jutó teljesítményként határozható meg:

$$Q_e = \mathbf{J} \cdot \mathbf{E}. \quad (20)$$

Az elektromos teljesítmény disszipáció hőforrásként jelenik meg, így megadható a két modult együttesen leíró differenciálegyenlet:

$$-\nabla \cdot (k \nabla T) = Q_e. \quad (21)$$

5. Szimulációs modell

A 4. fejezetben bemutatott peremérték-problémák megoldásához a COMSOL Multiphysics végeelem szoftvert használtam. A programhoz a licencet az Energiatudományi Kutatóközpont biztosította.

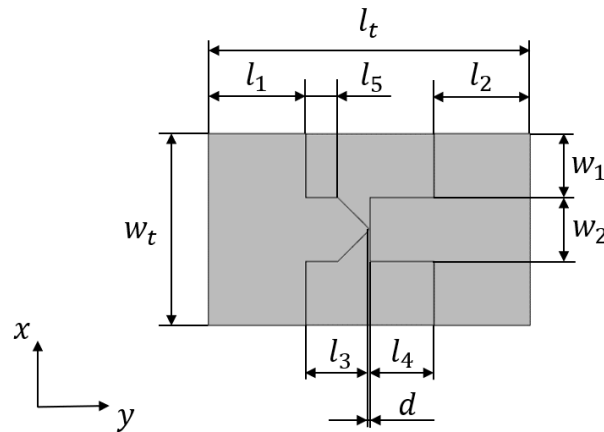
Az elektromos részhez az *Electric Currents* interfészt használtam fel, mellyel meghatározhatók az elektromos mező, áram és potenciál eloszlások vezetőkben, az induktív hatások elhanyagolása mellett. A modul által használt mezőváltozó a skalár értékű elektromos potenciál.

A termikus résznél a *Heat Transfer in Solids* modult alkalmaztam. Ez a felület lehetőséget nyújt a vezetés (kondukción), áramlás (konvekció) és sugárzás (radiáció) útján történő hőátadás modellezésére. Az interfész mezőváltozója a skalár értékű hőmérséklet.

Az elektromos és termikus rész összekapcsolására az *Electromagnetic Heating* modult használtam, mely segítségével az elektrotermikus differenciálegyenlet, (21) megoldható.

5.1. Geometria

Mivel az egyes változók térbeli eloszlásának meghatározása is fontos szempont volt, a modellalkotás folyamán 3D szimulációra volt szükség. A szimulációban használt geometria dimenziói megegyeznek a valós eszköz méreteivel, melyek a következők: $l_t = 5000 \text{ nm} + d$, $l_1 = l_2 = 1500 \text{ nm}$, $l_3 = l_4 = 1000 \text{ nm}$, $l_5 = 500 \text{ nm}$, $w_{total} = 3000 \text{ nm}$, $w_1 = w_2 = 1000 \text{ nm}$. A résméret: $d = 30 \text{ nm}$. Az egyes jelölések jelentését a 11. ábra szemlélteti.

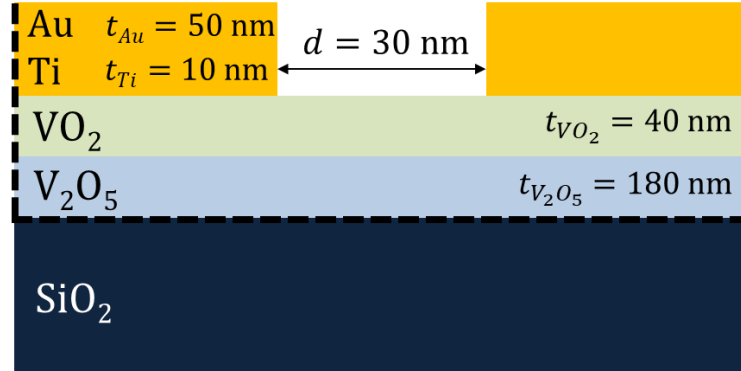


11. ábra: Geometriai paraméterek (felülnézetből)

Az eszköz alján található SiO_2 tökéletes szigetelő, tehát nem folyik rajta áram. Ez egyenértékű azzal, mint hogyha a V_2O_5 réteg alján a (9) elektromos Neumann-peremfeltételt definiáljuk ($J_{n,k}(\mathbf{r}) = 0 \text{ A/m}^2$ kikötéssel). Mivel a peremfeltétel megadása egyszerűbb

modellt és rövidebb futási időt eredményez, mint egy teljes rétegnyi geometria hozzáadása, ezért ezt a módszert alkalmaztam. Így a (16) termikus Dirichlet-peremfeltétel is a V_2O_5 réteg alján került megadásra.

A többi réteg vastagsága: $t_{Au} = 50$ nm, $t_{Ti} = 10$ nm, $t_{VO_2} = 40$ nm, $t_{V_2O_5} = 180$ nm. Az elkészített modellben a hegyes elektróda görbületi sugara 50 nm-re volt állítva. A szimuláció minden külső és belső (érintkező) felületet tökéletesen simának feltételez. A rétegek elrendezését oldalnézetből a 12. ábra illusztrálja.



12. ábra: Rétegek elrendezése és vastagsága (oldalnézetből)

5.2. Anyagtulajdonságok

A szimulációban minden anyag mikroszkopikusan homogénnek és izotrópnak tekinthető. Az anyagok termikus és elektromos anyagtulajdonságainak definiálásánál a szakirodalomban fellelhető értékeket használtam. Ez alól kivétel a VO_2 fajlagos vezetőképessége, melynek értéke kísérleti eredményekből és további elméleti megfontolásból származik.

Az elektródák hővezetési tényezőit a COMSOL által alapértelmezetten megadott értékekre állítottam: $k_{Au} = 311$ W/(m·K), $k_{Ti} = 21,9$ W/(m·K). A V_2O_5 hővezetési tényezője 0,45 – 3,84 W/(m·K) között mozog a kristályszerkezet és egyéb anyagi jellemzők (szemcseméret, rétegvastagság) függvényében [30]. A szimulációban egy köztes értéket, $k_{V_2O_5} = 1,75$ W/(m·K)-t használtam, mely egy 150 nm vastag kristályos film rétegen lett lemérve [31]. A fázisváltozás során a VO_2 hővezetési tényezője hirtelen megváltozik, mivel megnő az elektronok hővezetési járuléka (Wiedemann–Franz törvény). Ezt egy hőmérsékletfüggő ugrásfüggvény segítségével definiáltam a szimulációban: $k_{VO_2} = 3,5$ W/(m·K), ha $T < T_c$ és $k_{VO_2} = 6$ W/(m·K), ha $T > T_c$ [32]. A (17) egyenletben megjelenő hőátadási tényező definiálására a *Convective Correlation* funkciót alkalmaztam, mely empirikus adatok alapján határozza meg a hőátadási tényező értékét különböző geometriákra. Ehhez a felület elhelyezkedésének és karakterisztikus méretének definiálására van szükség.

Utóbbi függőleges fal esetében a magassággal egyezik meg, felfelé, illetve lefelé néző felületeknél pedig a terület és a kerület hányadosa.

Az elektródák nagy fajlagos vezetőképességgel rendelkeznek: $\sigma_{Au} = 45,6 \cdot 10^6$ S/m, $\sigma_{Ti} = 2,6 \cdot 10^6$ S/m. Ezzel szemben a V_2O_5 fajlagos vezetőképessége szinte elhanyagolható, melynek értéke a szakirodalom alapján: $\sigma_{V_2O_5} = 0,04$ S/m [33].

A VO_2 fajlagos vezetőképességének meghatározása összetettebb probléma. Mivel a fázisváltáskor lezajló ellenállás változás kulcsfontosságú a kapcsoláskor, külön hangsúlyt kell fektetni a meghatározására. Ahogy azt az 5. ábra is mutatja az eszköz ellenállása hőmérséklet-függő. Ezen felül azonban szemléltettem (3.2. alfejezet), hogy a kapcsolási mechanizmusban szerepet játszik az elektromos mező is, mely a VO_2 ellenállásában is megjelenik valamilyen elektromos transzport mechanizmuson keresztül. A szakirodalom alapján a VO_2 vezetési mechanizmusa, mely hőmérséklet és feszültség függő is egyben, a következő egyenlettel foglалható össze:

$$R(V_{bias}, T) \approx R_0(T) \cdot \exp \left[- \left(\frac{V_{bias}}{V_c} \right)^\alpha \right]. \quad (22)$$

A (22) egyenletben $R_0(T)$ az alacsony feszültség mellett mért hőmérséklet-függő ellenállás; V_c pedig egy karakterisztikus feszültség, amely tipikusan több különböző fizikai mennyiség és állandó összevonásából álló kifejezés. Az eszközön eső feszültség (V_{bias}) segítségével megbecsülhető az elektromos térerősség nagysága az aktív régióban (részben):

$$E \approx \frac{V_{bias}}{d}. \quad (23)$$

Ennek megfelelően a V_c karakterisztikus feszültség segítségével meghatározható egy karakterisztikus elektromos mező is:

$$E_c \approx \frac{V_c}{d}. \quad (24)$$

Megjegyzendő azonban, hogy ez az érték csak nagyságrendi becslés és csak homogén elektromos tér esetén (azaz két széles, téglalap alakú elektróda esetén) kapnánk ezt az elektromos térerősséget. Az E_c pontos értékét a végeelem szimuláció alapján állítottam be. A kitevőben szereplő α pedig megadja a vezetési mechanizmus típusát. Attól függően, hogy milyen fizikai folyamat áll a vezetés hátterében, α különböző értékeket vehet fel. Ha $\alpha = 0,5$, Poole-Frenkel vezetésről beszélhetünk [34], ha $\alpha = 2$, fononok által elősegített alagútazásról van szó [22], ha pedig $\alpha = 1$, a Zener alagútazásról adja az elektromos vezetés alapját [35].

A COMSOL-ban való anyagtulajdonságok definiálásához ellenállás helyett a fajlagos vezetőképességre (σ) van szükségünk. Ennek reciproka, a fajlagos ellenállás (ρ), a (22), (23) és (24) egyenletek segítségével számítható:

$$\rho(E, T) \approx \rho_0(T) \cdot \exp \left[- \left(\frac{E}{E_c} \right)^\alpha \right]. \quad (25)$$

Alacsony feszültségen a Joule-hő elhanyagolható, ezért $R_0(T)$ egy egyszerű, hőmérséklet független geometriai szorzótényezővel (G) átskálázható, hogy $\rho_0(T)$ értékét megkapjuk:

$$R_0(T) = G \cdot \rho_0(T) = \frac{G}{\sigma_0(T)}. \quad (26)$$

Ezt a szorzótényezőt a valós geometriával végrehajtott végelem szimulációból határozzuk meg, úgy, hogy egy kezdeti $\tilde{\sigma}_0(T)$ megadása mellett a szimulációt lefuttatva visszakapunk egy $\tilde{R}_0(T)$ -t. A geometriai szorzótényezőt a $\tilde{\sigma}_0(T) \cdot \tilde{R}_0(T)$ szorzatból kapjuk. Ezután ezt az értéket $R_0(T)$ -vel leosztva adódik a valódi $\sigma_0(T)$. Az ellenállásból származtatott fajlagos ellenállás értékek az 5. ábra jobb oldali vertikális tengelyén vannak feltüntetve.

A domináns vezetési mechanizmust (vagyis, hogy α milyen értéket vesz fel), a (22) egyenlet átrendezésével határozhatjuk meg:

$$\ln \left(- \ln \left(\frac{R}{R_0} \right) \right) = \alpha \ln(V_{bias}) - \alpha \ln(V_c). \quad (27)$$

Ha $\ln(-\ln(R/R_0))$ -t ábrázoljuk $\ln(V_{bias})$ függvényében, ahol V_{bias} értéke a 0,005 – 0,4 V tartományon belül változik, akkor α az egyenes meredekségét adja, míg $-\alpha \ln(V_c)$ az egyenes y tengellyel vett metszetét (8. ábra belső panel). Megtehetjük ezt minden T_0 mellett kapott ellenállás görbékkel, melyből látszik, hogy α értéke 0,9 – 1,07 között mozog. Így a vezetési mechanizmus a Zener alagútazással azonosítható.

Ezután V_c értéke meghatározható volt a Zener vezetési mechanizmusból, a (22) egyenletbe $\alpha = 1$ értéket helyettesítve. A karakterisztikus térerősség így már (24) segítségével számolható volt minden T_0 esetére.

5.3. Illesztési paraméterek

A szimuláció során az eszköz különböző hőmérsékleten mért nemlineáris $I(V)$ karakterisztikáját, illetve az ezekből származtatott kapcsolási paraméterek értékeit igyekeztem minél pontosabban reprodukálni. Ahogy a fentiekben bemutattam, a legtöbb anyagi és geometriai paraméter értéke ismert volt, azonban 2 paramétert a mérésekhez kellett illeszteni. Későbbiekben látni fogjuk, hogy ennek a két mennyiségnek helyes beállításával a szimuláció nagy pontossággal leírja az eszköz komplex viselkedését, amelyet alapesetben

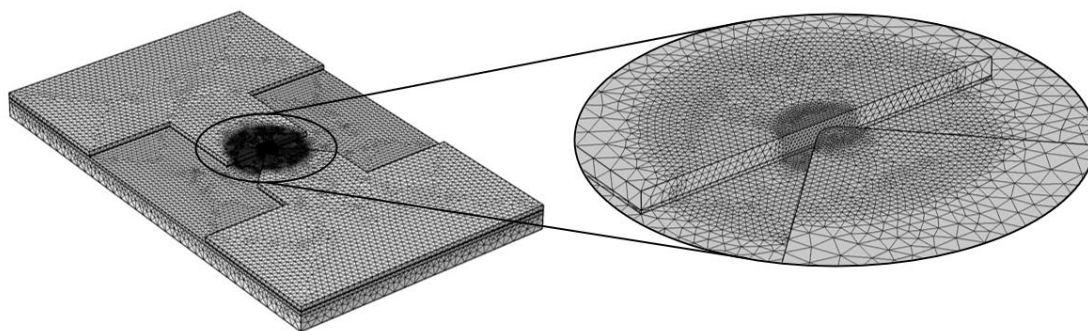
sokkal több paraméterrel lehetne csak jellemezni. Tehát a két paraméter illesztésével nem esünk abba a hibába, hogy túlságosan szabaddá tesszük a modellünket, hogy bármilyen mérési eredményt le tudjunk illeszteni vele.

Az anyagon belül történő hőterjedésen kívül figyelembe kell venni a két szomszédos érintkező felületek közti hőátadást is, ahogy az a (18) egyenletben is látszik. A szimuláció folyamán a hőmérséklet átmenetet a felületek között folytonosnak tekintettem, kivéve a VO_2 /fém elektródák között. Az ezen a felületen megtalálható termikus kontakt ellenállás (R_{th}) fontos szerepet játszik a VO_2 felmelegedésében [36, 37]. Ez az érték a modellben egy állítható paraméter, melyet úgy választottam meg, hogy a szimulált kapcsolási feszültségek különböző alaphőmérsékletek mellett minél jobban közelítsék a mért kapcsolási feszültségeket.

Ahogy azt a (25) egyenlet szemlélteti, VO_2 fajlagos ellenállása függ a karakterisztikus elektromos térerősségtől (E_c). Ennek értékét minden egyes T_0 hőmérsékleten meghatároztam oly módon, hogy az ellenállás feszültségfüggése a mérésekkel megegyező tendenciát mutasson (8. ábra). A kiindulási értékét az 5.2. alfejezetben bemutatott módszerrel becsültem meg, majd a szimulációval tovább finomítottam, hogy a szimulált $\ln(R(V)) - V$ görbe alacsony feszültségen mért meredeksége visszaadja a mért értéket. Azt tapasztaltam, hogy E_c értéke függ a hőmérséklettől, azonban egy adott alaphőmérséklet (T_0) mellett fix E_c értéket használtam, azaz nem vettem figyelembe, hogy a Joule-hő hatására lokálisan felmelegedett anyagdarabnál E_c értéke lecsökken.

5.4. Térbeli diszkretizáció

A 3D geometria térbeli diszkretizálásához tetraéderes numerikus hálót hoztam létre, négy különböző elemmérettel. A legkisebb elemméretet az elektródák közti részben alkalmaztam, hogy a kis tartományra eső hőmérsékletgradienst érzékelní lehessen. Itt egy 100 nm sugarú körön belül a beállított elemméret 5 nm volt. A réstől kifelé haladva az elemméretet növeltem, mivel itt már egy durvább háló alkalmazása is elegendő volt. A numerikus hálót a 13. ábra szemlélteti.



13. ábra: Numerikus háló, az elektródák közötti rés környékének kinagyításával

A generált háló minőségének ellenőrzése céljából hálófüggetlenségi vizsgálatot végeztem. Mivel az eredmények szempontjából a rés és annak környéke a legkritikusabb, a területen belül 5 különböző elemméretet (2, 3, 5, 10, 20 nm) alkalmazva futtattam a szimulációt. A maximális hőmérsékletet és az eszközön átfolyó áramot használtam az 5 hálóval kapott eredmények összehasonlítására, melyek egymáshoz képest minden esetben 0,5%-on belül adódtak. Kijelenthető tehát, hogy a választott elemméret megfelelő, és annak további csökkentése nem vezetne az eredmények változásához, azonban megnövekedett futási időt eredményezne. A szimulációban használt háló 306698 elemet tartalmazott. Az alapértelmezett mérőszám az elemek minőségének leírására a *skewness*, melynek értéke tökéletes elem esetén 1, illetve teljesen torz elem esetén 0. A modellben az *skewness* összes elemre vett átlaga 0,7457, tehát a generált háló ilyen szempontból is megfelelő.

5.5. Megoldási folyamat

A differenciálegyenletek megoldásához szükségünk van azoknak térbeli diszkrétizációjára, melynek eredményeként egy nemlineáris egyenletrendszert kapunk (ezt a program magától elvégzi, nincs vele külön teendő). Az *Electromagnetic Heating* modulon belül a problémát leíró nemlineáris egyenletrendszer megoldása *Segregated* módon történik. Ez azt jelenti, hogy a megoldó szétválasztja a kétféle fizikát (elektromos és termikus), és lépésről lépésre, egymás után szimulálja őket. Először a program (6) egyenlet alapján az elektromos potenciált számítja ki a kezdeti feltételekkel és anyagtulajdonságokkal. Ebből az értékből a (20) egyenlet segítségével meghatározza a Joule-hőt, melyet aztán hőforrásként felhasznál (21) elektrotermikus differenciálegyenletben. Az így kapott hőmérsékleteloszlást minden iterációban frissíti. Ezt a két lépést addig ismételgeti, amíg a megoldás nem konvergál. Ez azt jelenti, hogy az elektromos potenciálra és a hőmérsékletre vonatkozó eredmények két

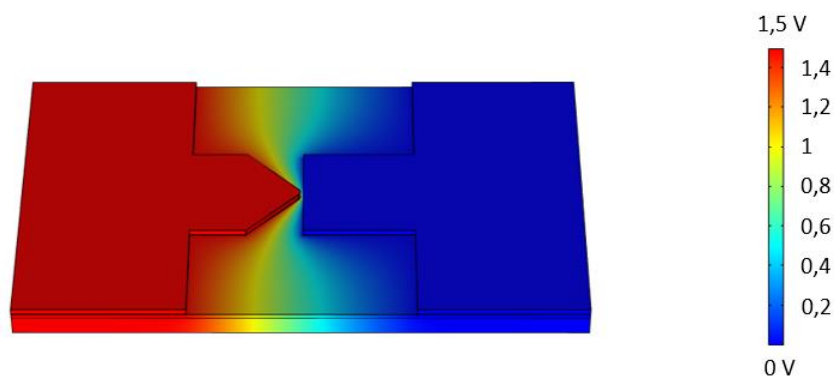
lépés között nem változnak egy előre meghatározott értéknél nagyobb mértékben. Ez az érték a relatív tűrés, melynek értéke 0,0001-re van beállítva.

6. Eredmények

Ebben a fejezetben az előzőekben felvázolt szimulációs modell futási eredményeit ismertetem. Először bemutatom az elektrotermikus modell által elsődlegesen számított elektromos potenciál és hőmérséklet térbeli eloszlását, majd rátérek az áram-feszültség karakterisztikák vizsgálatára külön-külön szemléltetve a termikus és elektromos hatásokat. Végezetül pedig a különböző eseteket feltételezve a kapcsolási paraméterek hőmérsékletfüggését hasonlítom össze a mérési eredményekkel. Az eszközt mindvégig csak kikapcsolt állapotban vizsgáltam, azaz a VO₂ réteg minden esetben a nagy ellenállású félvezető állapotban van.

6.1. Mezőváltozó eloszlások

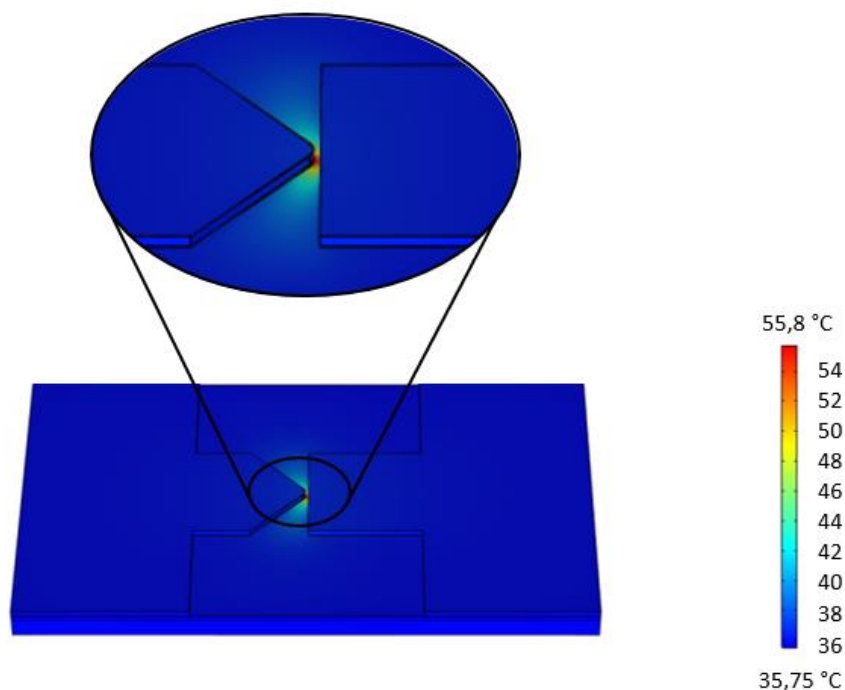
A feszültségeloszlás az eszközben minden ráadott feszültség mellett hasonló mintázatot mutat. A végeelem szimuláció eredményeként kapott feszültségeloszlást az eszközben $V_{bias} = 1,5$ V mellett, $T_0 = 35,75$ °C alaphőmérsékleten a 14. ábra mutatja. Látható, hogy a potenciál nagysága a fémelektródák közel állandónak tekinthető és a VO₂ rétegen keresztül esik le az értéke. A potenciál változása a réstől távoli régiókban is, azaz a teljes VO₂ rétegen megfigyelhető.



14. ábra: Feszültségeloszlás az eszközön belül 1,5 V tápfeszültség mellett

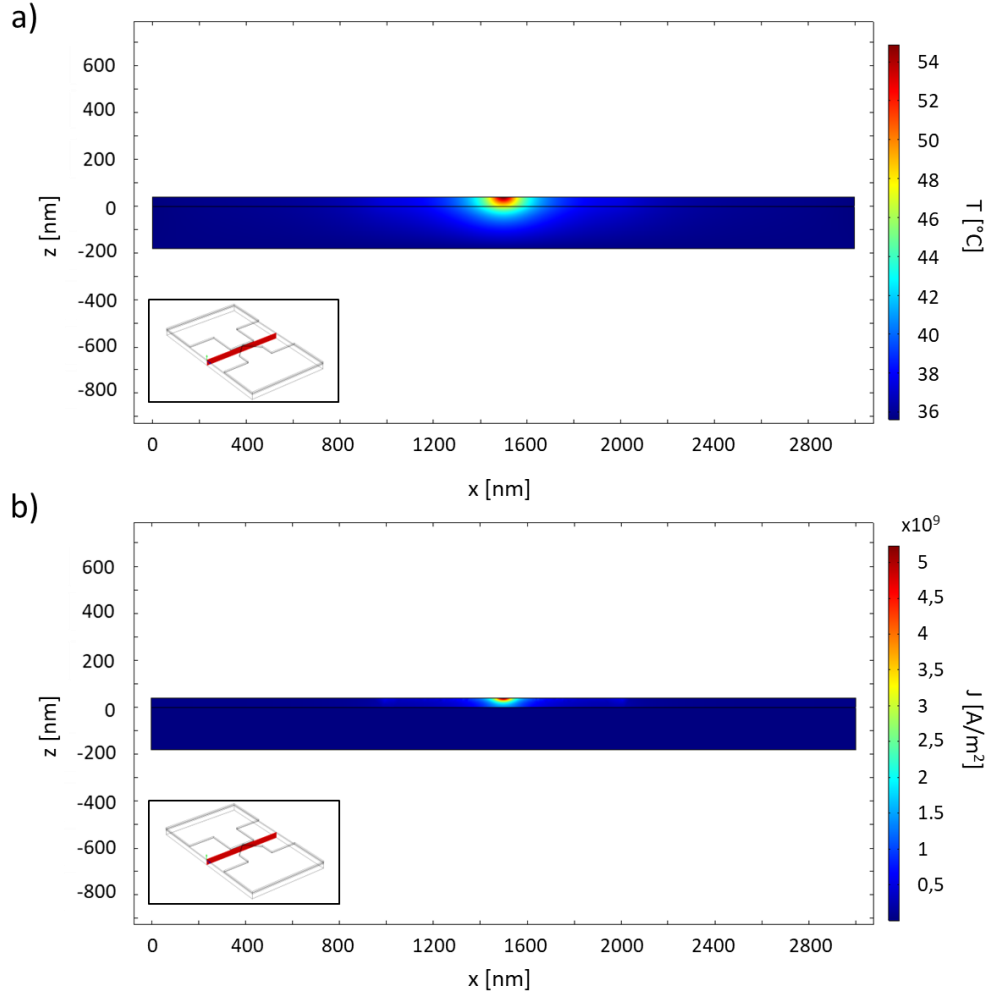
Ezzel szemben a hőmérsékleteloszlás csak a réshez közeli tartományban mutat inhomogenitást, amely szintén hasonló mintázatot mutat különböző feszültségek ráadása mellett. A hőmérsékleteloszlást az eszközben $V_{bias} = 1,5$ V mellett, $T_0 = 35,75$ °C alaphőmérsékletre indulva a 15. ábra szemlélteti, melyen a rés környéke kinagyítva van ábrázolva. Ebben az esetben V_{bias} kisebb, mint V_{set} , így a HRS állapotban van az eszköz. A 16.a. ábra ugyanehhez az esethez tartozó hőmérsékleteloszlást mutatja az eszköz résnél vett keresztmetszetében. Ezek alapján megfigyelhető, hogy jelentős felmelegedés az eszközön belül csak a résben megy végbe. Itt a hőmérsékletváltozás nagyjából 20 °C, míg az eszköz

többi része csak az alaphőmérsékletre melegszik fel. A várakozásoknak megfelelően minél nagyobb az eszközre kapcsolt feszültség, annál nagyobb a résben elért hőmérséklet.



15. ábra: Hőmérsékleteloszlás az eszközön belül 1,5 V tápfeszültség mellett, a rés környékének kinagyításával

A nagyon erősen a rés környékére koncentrálódó hőmérsékleteloszlás megértése érdekében fontos megvizsgálni az eszköz keresztmetszetében kialakuló áramsűrűséget is, melyet a 16.b. ábra ábrázol. Ennek a maximális értéke $J = 5,44 \cdot 10^9 \text{ A/m}^2$ és látható, hogy az áram jelentős része mindössze pár tíz nm^2 területre korlátozódik. Ez a megfigyelés a hőmérséklet alakulásával együtt alátámasztja azt a megfigyelést, miszerint a hegyes elektródás kialakítás miatt a fázisváltozás egy jól definiált kis térrészben megy végbe, és ez felelős az elektródák közötti vezetési csatorna kialakításáért.



16. ábra: Az eszköz keresztmetszetében 1,5 V tápfeszültség mellett elért a) hőmérséklet és b) áramsűrűség

6.2. Ellenállás-feszültség és áram-feszültség karakterisztikák

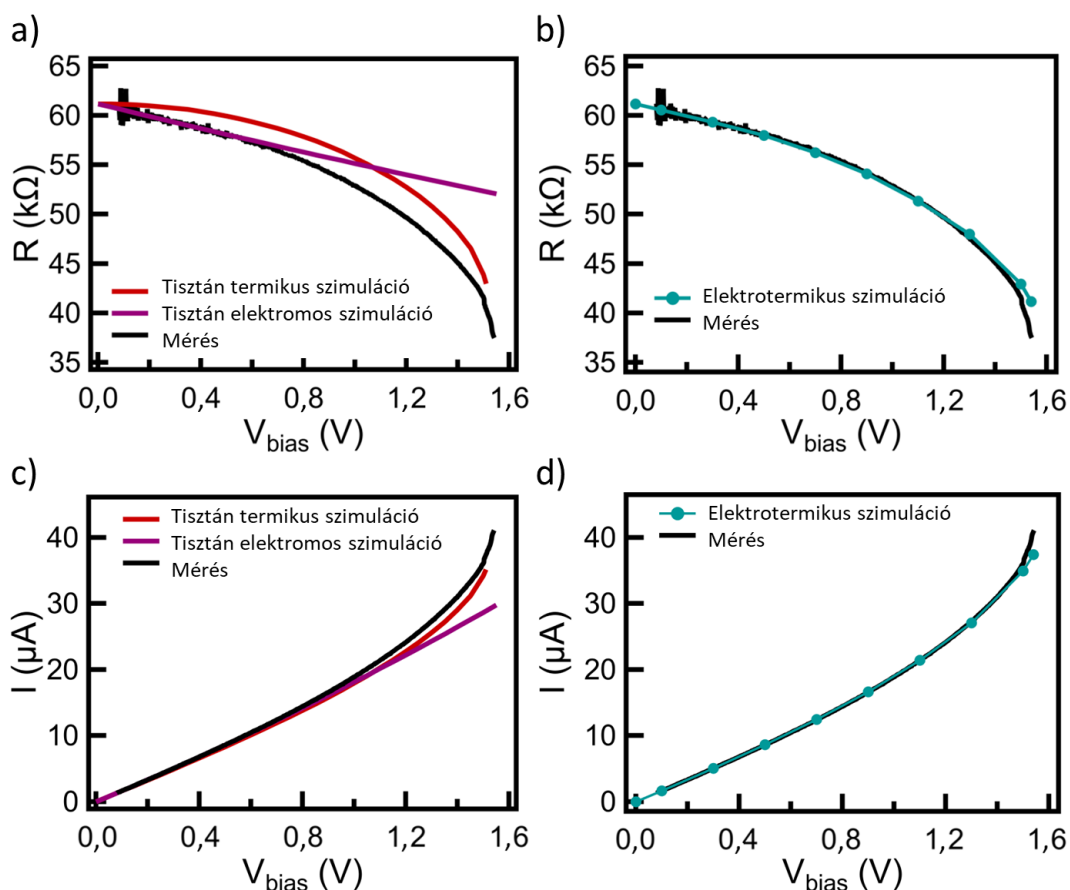
A következőkben szemléltetem, hogy mi történik, ha külön vizsgáljuk a termikus és elektromos eseteket. A 17. ábra fekete görbéi ábrázolják az $R(V)$ mérés eredményét $T_0 = 35,75$ °C-on, a HRS állapotban (fázisváltozás előtt). A végelelem szimulációból az eszközön átfolyó áram nagysága az áramsűrűség keresztmetszetre vett integráljaként számítható. Ebből és a ráadott feszültség értékéből az Ohm-törvény segítségével meghatározható az eszköz ellenállása.

A 17.a. ábra piros színe jelöli a tisztán termikus esethez tartozó szimulált $R(V)$ görbét, azaz amikor a fajlagos ellenállás elektromos mező függésétől eltekintünk. Ebben az esetben $\rho(E, T) = \rho_0(T)$, tehát az ellenállás csak a Joule-hő következtében változik. A modellben így egyetlen változtatható paraméter a termikus kontakt ellenállás (R_{th}) volt, melynek értéke úgy lett beállítva, hogy a szimulált kapcsolási feszültség minél jobban közelítse a mért

értéket. Az elektromos hatások nélkül az ellenállás értéke kis feszültségértékek mellett szinte konstans az elhanyagolható Joule-hő miatt, a nemlineáris hatások csak magasabb feszültségen jelentkeznek. A 17.c. ábra piros színe az ugyanehhez az esethez tartozó $I(V)$ görbét ábrázolja. Az $R(V)$ és $I(V)$ karakterisztikák alapján látszik, hogy a tisztán termikus eset jelentősen különbözik a mérési eredménytől.

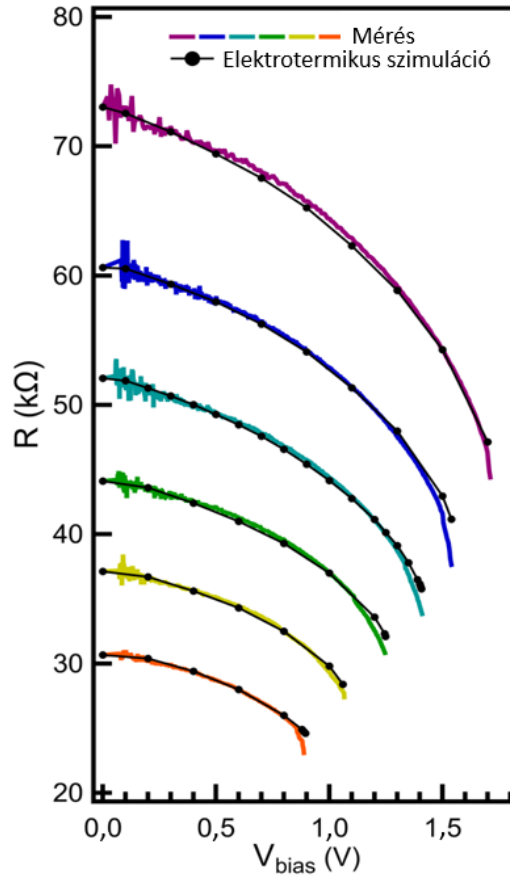
A 17.a. ábra lila színe ábrázolja a tisztán elektromos esethez tartozó szimulált $R(V)$ görbét. Ebben az esetben a fajlagos ellenállásnak csak mezőfüggése volt, a Joule-hő hatásaitól eltekintettünk. Itt a karakterisztikus elektromos tér (E_c) volt az egyetlen illesztett paraméter, melynek értékét először az $\ln(R) - V_{bias}$ görbéből becsültem, majd a szimuláció során úgy változtattam, hogy a szimuláció eredménye visszaadja az alacsony feszültség mellett mért $R(V)$ görbe meredekségét. Megfigyelhető, hogy a tisztán elektromos esetben a szimulált görbe kezdeti meredeksége ugyan megegyezik a mért görbe meredekségével, magasabb feszültségen azonban nem reprodukálja a megfigyelt nemlineáris viselkedést. A 17.c. ábra lila színe az ugyanehhez az esethez tartozó $I(V)$ görbét ábrázolja, mely szintén jelentősen eltér a méréstől.

A 17.b. ábrán ábrázolt elektrotermikus esetben mind az elektromos mezőtől és a hőmérséklettől függő fajlagos ellenállás alkalmaztam. Ebben az esetben a szimuláció eredményeként kapott $R(V)$ görbe alacsony feszültség mellett a mérésnek megfelelő meredekséggel indul, valamint, magas feszültségen erős nemlineáris viselkedést mutat a Joule-hő miatt, így tehát jól leköveti a mérést. Kis eltérés a méréstől mindössze közvetlenül a kapcsolási feszültség előtt figyelhető meg. Ezt az eredményezheti, hogy E_c hőmérséklettől független paraméterként szerepel a modellben. A valóságban azonban a kapcsolási feszültséghez közeledve E_c értéke feltételezhetően lokálisan lecsökken a résben felmelegedett térrészben. A modellben a két változtatható paraméter a termikus kontakt ellenállás, illetve a karakterisztikus elektromos mező. Előbbi értéke 17.b. ábra által szemléltetett esetben $R_{th} = 7,5 \cdot 10^{-9} \text{ m}^2\text{K/W}$ -nak adódott, mely az irodalomban fellelhető értéke tartományába esik [22], E_c értéke pedig 96,7 MV/m volt.



17. ábra: A szimuláció eredményeként kapott $R(V)$ görbék a HRS állapotban a) tisztán termikus és elektromos és b) elektrotermikus esetben; valamint $I(V)$ görbék a HRS állapotban c) tisztán termikus és elektromos és d) elektrotermikus esetben

Az imént bemutatott példához hasonlóan kiterjeszthetjük az elektrotermikus szimulációt, és elvégezhetjük a többi alaphőmérséklet mellett is a vizsgálatot. Az így kapott $R(V)$ görbék minden T_0 mellett jó közelítést adnak a mérési eredményekhez viszonyítva, melyeket a 17.b. ábrához hasonlóan a 18. ábra szemléltet. A különböző színek a különböző alaphőmérsékletek melletti szimulációkat jelölik. Az egyes esetekhez tartozó $I(V)$ görbék hasonlóan jó közelítést adnak.



18. ábra: A szimulált ellenállás-feszültség görbék összehasonlítása a mérési eredményekkel a HRS állapotban, több T_0 alkalmazása mellett

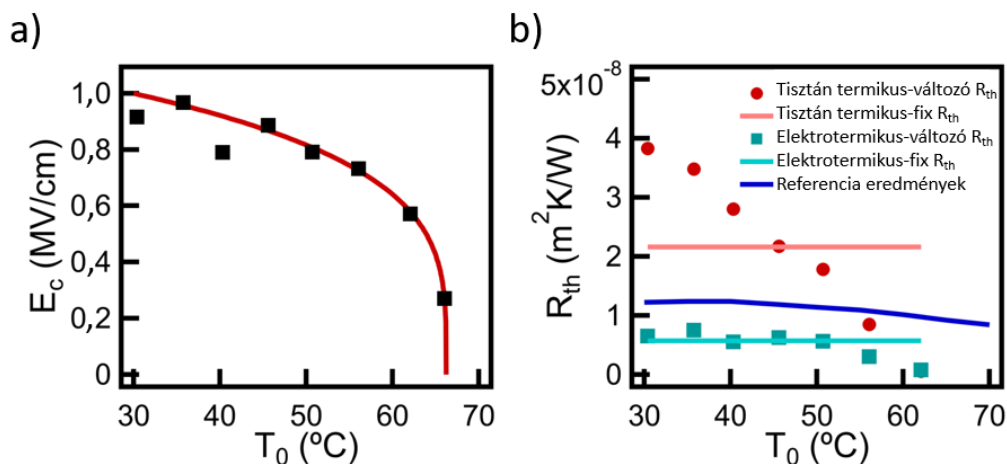
6.3. Kapcsolási paraméterek

Az eddig bemutatott példáknál az elektrotermikus esetben minden T_0 mellett illesztve volt mind E_c , mind R_{th} értéke, hogy a lehető legjobban közelítsük a mért eredményeket. Az E_c határozza meg az $R(V)$ görbe kis feszültségen tapasztalt meredekségét, míg az R_{th} a kapcsolási feszültséget a modellünkben. Az E_c alakulását T_0 függvényében a 19.a. ábra mutatja. Ezen megfigyelhető, hogy E_c értéke csökkenő tendenciát mutat az alaphőmérséklet növekedésével, különösen T_c -hez közeledve. Ez a viselkedés magyarázatot adhat arra, hogy P_{set} értéke jelentősen lecsökken $T_0 = 66,02$ °C-on és eltérő tendenciát mutat a többi mérési adatponthoz képest (7.c. ábra). Mivel ezen a hőmérsékleten E_c értéke jelentősen lecsökken, alacsonyabb feszültség is elég az eszköz ellenállásának lecsökkentésére, amely növeli a hődisszipáció szerepét, mely feltehetőleg tovább csökkenti a karakterisztikus elektromos mező értékét. Így a termikus és elektromos hatások egy pozitív visszacsatolásban egymás hatását erősítve jelennek meg. Kritikus viselkedést feltételezve a fázisátalakulási hőmérséklet közelében, leillesztettem az elektromos térerősség hőmérsékletfüggését az $E_c(T) =$

$E_0(T_c - T)^{1/\beta}$ próbafüggvénnyel (19.a. ábra piros görbéje). Látható, hogy a függvény $E_0 = 40,4$ MV/m és $\beta = 4$ paraméterek mellett jó leírást ad, azonban a kritikus viselkedés bizonyítása még részletesebb vizsgálatot igényel a későbbiekben.

Az elektrotermikus esethez tartozó R_{th} értékek is változnak az alaphőmérséklet függvényében, melyet a 19.b. ábra türkíz pontjai ábrázolnak. Ezek az értékek $7,5 \cdot 10^{-9}$ m²·K/W és $8 \cdot 10^{-10}$ m²·K/W között változnak, mely jó egyezést mutat az irodalomban Ti/VO₂ felületen mért termikus kontakt ellenállással (19.b. ábra sötétkék vonal) [38]. A szimuláció alapján kapott értékekhez hasonlóan ezen mérési értékekben is megfigyelhető egy enyhe csökkenés a hőmérséklet növekedésével. Az R_{th} értékét adott T_0 mellett az E_c -hez hasonlóan szintén állandónak vettük, azonban ennek lényegesen kisebb hatása van az elektromos áram nagyságára. A VO₂ réteg ugyanis nem melegszik fel jelentősen a fém elektródák alatt, mivel azok nagyon jó hővezetők. Ebből kifolyólag a VO₂/Ti átmenet hőmérséklete és R_{th} értéke is állandónak tekinthető az eszközre kapcsolt feszültségtől függetlenül. Annak érdekében, hogy csökkentsük az illesztendő paraméterek számát, megvizsgáltam milyen hatással van a szimulációs eredményekre, ha T_0 -tól független átlagos R_{th} értéket használunk. Ha ebben az esetben is jó egyezést kapunk a mérési adatokkal, az lehetővé tenné, hogy olyan hőmérsékleten is megjósoljuk a kapcsolási paramétereket, amelyen nem történt mérés (E_c értéke jól becsülhető a fent vázolt analitikus függvénnyel). Az átlagos R_{th} érték az elektrotermikus esetben $5,73 \cdot 10^{-9}$ m²·K/W, amely világos kék vonallal van feltüntetve a 19.b. ábrán.

A kapcsolási paraméterek vizsgálatához az elektrotermikus szimuláció eredményeit összehasonlíthatjuk a tisztán termikus esetben kapott eredményekkel. A tisztán termikus szimuláció esetében R_{th} értékét szintén az előző bekezdésben bemutatott megfontolásokkal határoztam meg, azaz először úgy állítottam be az egyes T_0 hőmérsékleteken, hogy a kapcsolási feszültség megegyezzen a mért értékekkel (piros pontok a 19.b. ábrán), majd a szimulációkat lefuttattam egy átlagos érték mellett (rózsaszín vonal a 19.b. ábrán). Az átlagos R_{th} értéke ebben az esetben $2,16 \cdot 10^{-8}$ m²·K/W. Látható, hogy tisztán termikus esetben lényegesen nagyobb termikus kontakt ellenállásra van szükség, továbbá sokkal nagyobb tartományban is változik, mint az elektrotermikus esetben. Tendenciában kevésbé egyezik az irodalomban tapasztaltakkal.

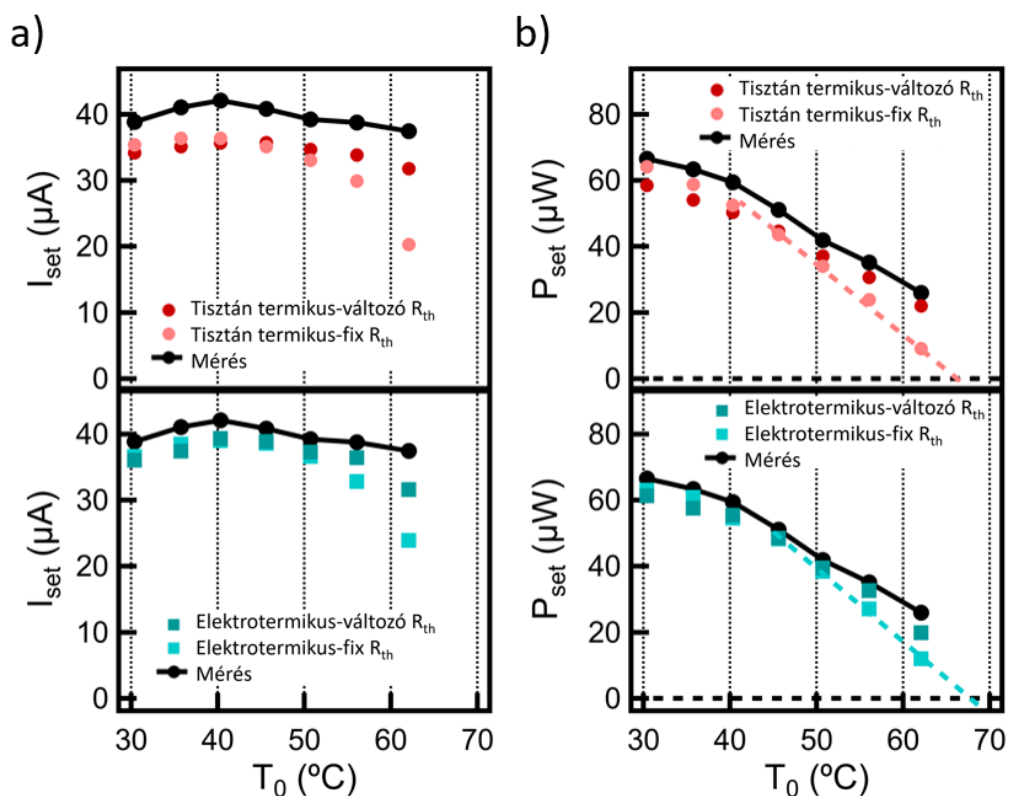


19. ábra: Illesztett paraméterek az alaphőmérséklet függvényében: a) karakterisztikus térerősség az elektrotermikus esetben, b) termikus kontakt ellenállás több esetre nézve

Az összehasonlítást először a kapcsolási áramra végeztem el, melyet a 20.a. ábra illusztrál. Látható, hogy mind a tisztán termikus eset (felső panel, piros pontok) mind az elektrotermikus eset (alsó panel, türkiz négyzetek) jól leírja a kapcsolási áram (I_{set}) közel állandó viselkedését. Azonban az elektrotermikus modell jobban közelíti a mért értékeket és még a felfedezhető kisebb fluktuációkat is jól leköveti. Az enyhe eltérést a méréshez képest az E_c hőmérsékletfüggésének elhanyagolása okozhatja, ahogy azt korábban tárgyaltam. Jelentősebb eltérés a kapcsolási hőmérséklethez közeledve figyelhető csak meg, mely az ellenállás hiszterézis jellegéből következhet. Ennek következtében a $T_0 > 60$ °C esetén a szimulált értékeket, azaz a 20. ábrán az utolsó adatpontokat fenntartással érdemes kezelni, mivel azok már a hiszterézis görbén belül helyezkednek el (5. ábra). A rózsaszín, illetve a világoskékkel jelölt pontok az átlagos R_{th} értékekkel számolt esethez tartoznak. Látható, hogy ezek lényegesebben eltérnek a mérési eredményektől, különösen magasabb hőmérsékleteken.

A másik kapcsolást jellemző paraméter, a kapcsolási teljesítmény, melyet a 20.b. ábra mutat. Az elektrotermikus modell ez esetben is közelebb áll a mérési eredményekhez, mint a tisztán termikus esetben kapott értékek. Jelentős eltérés itt is csak a legmagasabb T_0 esetén figyelhető meg, amely viszont már a hiszterézisen belül helyezkedik el. Az átlagos R_{th} (rózsaszín és világoskék) mellett szimulált esetekben a kapcsolási teljesítmény számottevő eltérést mutat, tehát nem feltételezhető egy állandó termikus ellenállás a VO₂ és a fém elektródák között. Azonban felfedezhető, hogy a tisztán termikus esetben a kapcsolási teljesítmény lineárisan csökken és annak extrapolációja (szaggatott rózsaszín egyenes) a $T_c = 66,2$ °C környékén éri el a $P_{set} = 0$ W értéket, amely a tisztán termikus esetben várható.

Elektrotermikus esetben az extrapoláció (szaggatott világoskék egyenes) kissé nagyobb hőmérsékletnél éri el a nulla kapcsolási teljesítményt, amely az E_c hőmérsékletfüggéséből következhet. A mérési eredményekben tapasztalt azon tendencia, hogy a lineáris extrapoláció 80 °C-on éri el a $P_{set} = 0W$ értéket nagyrészt a változó R_{th} -nak tudható be, kisebb részben pedig az E_c hőmérsékletfüggésének.



20. ábra: Kapcsolási paraméterek összehasonlítása: a) kapcsolási áram tisztán termikus és elektrotermikus esetben, b) kapcsolási teljesítmény tisztán termikus és elektrotermikus esetben

7. Konklúzió

A 6.1. alfejezetben bemutatott hőmérséklet- és árameloszlás (15. ábra és 16. ábra) alapján megállapítható, hogy az eszköznél csak a részben nő meg az áram sűrűség, mely aztán jelentős felmelegedést okoz a területen. Ez alapján kijelenthető, hogy a hegyes elektróda alkalmazása miatt az IMT jelensége a sejtésnek megfelelően egy jól definiált térrészre korlátozódik.

A 6.2. alfejezetben ismertettem a két extrém eset (tisztán termikus és a tisztán elektromos modell) alkalmazásával kapott szimulációs eredményeket. A tisztán termikus esetben az $R(V)$ karakterisztika vizsgálatánál megfigyelhető, hogy a görbe kis feszültségen nagyjából 0 meredekséggel indul és a nemlinearitás csak nagyobb feszültség mellett érzékelhető (17.a. ábra). Ezzel szemben a tisztán elektromos eset kis feszültségen visszaadja a mérés eredményeit, viszont nagyobb feszültségen végig lineárisan csökken (17.a. ábra). Mivel az áram és az ellenállás egymásból vannak származtatva, az $I(V)$ görbék esetében is hasonló eltérés figyelhető meg (17.c. ábra). Ezek alapján látható, hogy a két extrém eset alkalmazásakor a szimulációs eredmények nem követik az eszköz által OFF állapotban mutatott karakterisztikákat. Így ezek a modellek önmagukban nem alkalmasak az IMT jelenségének magyarázatára.

A harmadikként alkalmazott elektrotermikus szimuláció esetében az ellenállásra vonatkozó mind a két feltétel teljesült: a görbe kis feszültségen vett meredeksége visszaadta a méréssel kapott értéket és a magasabb feszültségen megfigyelhető nemlinearitás is kielégítő volt (17.b. ábra). Ezzel együtt az áram-feszültség karakterisztika is jó közelítést adott (17.d. ábra). Megállapítható tehát, hogy az eszköz működését a OFF állapotban akkor tudjuk a legpontosabban leírni, ha az elektrotermikus modellt használjuk, amiben a termikus és elektromos folyamatok egyszerre, egymással párhuzamosan vannak jelen.

Tovább alátámasztja az elektrotermikus modell alkalmazhatóságát a kapcsolási paraméterek vizsgálata. Ehhez a tisztán termikus és az elektrotermikus modellhez tartozó I_{set} és P_{set} értékeket hasonlítottam össze egymással és a mérési eredményekkel, fix és változtatott R_{th} mellett. Az elektrotermikus szimulációval kapott eredmények ezúttal is jobban közelítették a mérést. A fix és T_0 függő termikus kontakt ellenállás közül az utóbbi használata mellett kaptunk pontosabb értékeket, mivel a fix R_{th} használatával magasabb alaphőmérsékleteken egyre kevésbé adta vissza a méréshez tartozó kapcsolási paramétereket.

7.1. Fejlesztési javaslat

A VO_2 alapú memrisztor működésének bemutatásához és viselkedésének reprodukálásához végesem szimulációt alkalmaztam, melynek fejlesztése a későbbiekben mindenképp megfontolandó. Ugyan a szimulációban alkalmazott háló megfelelőnek bizonyult az eredmények szempontjából, a modellt tovább lehet fejleszteni egy jobb, strukturált háló létrehozásával, mely a futási idő csökkenését eredményezheti. Ezen felül a modell megbízhatósága még tovább növekedhetne, hogy ha az illesztett paraméterek alkalmazása valamilyen módon kiküszöbölhető lenne (még ha ezek használata teljesen indokolt és a szakirodalommal megegyező volt).

Jelen dolgozatban az eszköz OFF állapota került részletes bemutatásra. Annak érdekében, hogy az eszköz működésének teljes leírását megkapjuk, a jövőben érdemes kiterjeszteni a modellt az ON állapot vizsgálatára is. Továbbá, stacionárius szimuláció helyett célravezető lehet tranziens szimulációt használni. Ezzel az eszköz karakterisztikáinak időbeli változása is vizsgálható lenne, mely alkalmas lehet többek között a kapcsolási idő meghatározására.

8. Összefoglaló

Dolgozatom célja egy VO_2 alapú memrisztor bemutatása és működésének végeselem szimulációval történő reprodukálása volt. Ehhez először a szakirodalom alapján ismertettem a rezisztív kapcsolók felépítését és működését. Több alkalmazási példán keresztül szemléltettem, hogy kutatásuk nagyon is indokolt, ugyanis felhasználásuk rendkívül széleskörű.

Ezután először röviden bemutattam a VO_2 alapú memrisztorokat, melyet egy valós eszköz hosszabb ismertetése követett. Ebben kifejtettem, hogyan gyártották le az eszközt és hogy mitől különleges a geometria hegyes elektródával való megvalósítása. Felvázoltam az eszköz elektromos karakterisztikáit (áram-feszültség, ellenállás-feszültség), illetve, hogy miként változnak a kapcsolat jelenségét leíró paraméterek (feszültség, áram, teljesítmény) az alaphőmérséklet függvényében.

A valós eszköz működésének elemzéséhez felállítottam egy matematikai modellt. Ezen belül kettéválasztottam az IMT-t feltételezeten leíró termikus és elektromos esetet. Különbölkön levezettem a két esethez tartozó differenciálegyenletet és a problémát jellemző peremfeltételeket. A két extrém esetet egy elektrotermikus modellben kapcsoltam össze.

A matematikai modellben használt egyenleteket numerikusan, végeselem módszerrel oldottam meg. Ismertettem a felhasznált szoftvert és az azon belül alkalmazott modulokat. A szimuláció során az eszköz valós kialakításának megfelelő geometriát használtam és az anyagtulajdonságok jelentős részét a szakirodalom alapján választottam meg. Külön hangsúlyt fektettem a VO_2 fajlagos vezetőképességének meghatározására, mivel az kulcsszerepet játszik az eszköz működésében.

A szimuláció eredményeként ábrázoltam az eszközben kialakuló feszültség- és hőmérséklet-eloszlást, valamint a keresztmetszetben kapott áramsűrűséget. Összehasonlítottam a tisztán termikus, tisztán elektromos és az elektrotermikus esetek által eredményezett karakterisztikákat. Az áram-feszültség és ellenállás-feszültség görbék alapján arra következtettem, hogy az eszköz működését a magas ellenállású állapotban az elektrotermikus modell írja le legjobban. Megvizsgáltam a kapcsolat alaphőmérsékletfüggő paramétereit is, melyek esetén szintén az elektrotermikus szimuláció eredményei adták a legjobb közelítést a méréshez képest.

9. Felhasznált források

- [1] L. Pósa, *Resistive switching in ultrasmall nanogap devices*; PhD Thesis (2019)
- [2] L. Chua, *Memristor-The missing circuit element*; *IEEE Transactions on Circuit Theory*; **18**, 507-519 (1971)
- [3] D. B. Strukov et al., *The missing memristor found*; *Nature*, **453**, 80 (2008)
- [4] T. W. Hickmott, *Low-Frequency Negative Resistance in Thin Anodic Oxide Films*; *Journal of Applied Physics*, **33**, 2669-2682 (1962)
- [5] Y. Yang et al., *Observation of conducting filament growth in nanoscale resistive memories*; *Nature Communications*, **3**, 732 (2012)
- [6] A. Sawa, *Resistive switching in transition metal oxides*; *Materials Today*, **11**, 28-36 (2008)
- [7] W. Rainer et al., *Redox-Based Resistive Switching Memories - Nanoionic Mechanisms, Prospects, and Challenges*; *Advanced Materials*, **21**, 2632-2663 (2009)
- [8] S. Shin, K. Kim, and S. M. Kang, *Memristor Applications for Programmable Analog ICs*; *IEEE Transactions on Nanotechnology*, **10**, 266-274 (2011)
- [9] A. Talukdar, A. Radwan, and K. Salama, *Generalized model for Memristor-based Wien family oscillators*; *Microelectronics Journal*, **42**, 1032-1038 (2011)
- [10] F. Merrih-Bayat and S. Bagheri-Shouraki, *Mixed analog-digital crossbar-based hardware implementation of sign-sign LMS adaptive filter*; *Analog Integrated Circuits and Signal Processing*, **66**, 41-48 (2011)
- [11] K. Witrisal, *Memristor-based stored-reference receiver - the UWB solution?*; *Electronics Letters*, **45**, 713-714 (2009)
- [12] J. Borghetti et al., *'Memristive' switches enable 'stateful' logic operations via material implication*; *Nature*, **464**, 873 EP - (2010)
- [13] H. S. P. Wong et al., *Phase Change Memory*; *Proceedings of the IEEE*, **98**, 2201-2227 (2010)
- [14] M. N. Kozicki, M. Park, and M. Mitkova, *Nanoscale memory elements based on solid-state electrolytes*; *IEEE Transactions on Nanotechnology*, **4**, 331-338 (2005)

- [15] D. Ielmini, *Reliability issues and modeling of Flash and post-Flash memory*; Microelectronic Engineering - MICROELECTRON ENG, **86**, 1870-1875 (2009)
- [16] I. G. Baek et al., *Multi-layer cross-point binary oxide resistive memory (OxRRAM) for post-NAND storage application*; In: IEEE International Electron Devices Meeting, 750-753 (2005)
- [17] Z. Wang et al., *Fully memristive neural networks for pattern classification with unsupervised learning*; Nature Electronics, **1**, 137–145 (2018)
- [18] W. Yi et al., *Biological plausibility and stochasticity in scalable VO₂ active memristor neurons*; Nature Communications, **9**, 4661 (2018)
- [19] N. Manca et al., *Planar nanoactuators based on VO₂ phase transition*; Nano Letters, **20**, 7251–7256 (2020)
- [20] T. Wang et al., *Maximizing the performance of photothermal actuators by combining smart materials with supplementary advantages*; Science Advances, **3**, e1602697 (2017)
- [21] X. Zhou et al., *A high performance electroformed single-crystallite VO₂ threshold switch*; Nanoscale, **11**, 22070–22078 (2019)
- [22] Y. Kalcheim et al., *Non-thermal resistive switching in mott insulator nanowires*; Nature Communications, **11**, 2985 (2020)
- [23] J. del Valle et al., *Dynamics of the electrically induced insulator-to-metal transition in rare-earth nickelates*; Phys. Rev. B **104**, 165141 (2021)
- [24] J. Lee, M. Asheghi, and K. E. Goodson, *Impact of thermoelectric phenomena on phase-change memory performance metrics and scaling*; Nanotechnology, **23**, 205201 (2012)
- [25] B. Simon Mun et al., *Role of joule heating effect and bulk-surface phases in voltage-driven metal-insulator transition in VO₂ crystal*; Applied Physics Letters, **103**, 061902 (2013)
- [26] J. S. Brockman et al., *Subnanosecond incubation times for electric-field-induced metallization of a correlated electron oxide*; Nature Nanotechnology, **9**, 453–458 (2014)
- [27] A. Joushaghani et al., *Electronic and thermal effects in the insulator-metal phase transition in VO₂ nano-gap junctions*; Applied Physics Letters, **105**, 231904 (2014)
- [28] Pávó J., Badics Zs., Bilicz S., Gyimóthy Sz., *Elektromágneses terek modellezése*; elektronikus egyetemi jegyzet, BME Villamosmérnöki és Informatikai Kar, edu.vik.bme.hu (2021) (átdolgozás és kiegészítés alatt)

- [29] COMSOL, *Heat Transfer Module, User's guide* (2018)
<https://doc.comsol.com/5.4/doc/com.comsol.help.heat/HeatTransferModuleUsersGuide.pdf>
- [30] Q. Wang et al., *Thermal conductivity of V_2O_5 nanowires and their contact thermal conductance*; *Nanoscale*, **12**, 1138–1143 (2020)
- [31] M. Kang et al., *Optical and thermal properties of V_2O_5 thin films with crystallization*; *Journal of the Korean Physical Society*, **62**, 1134–1138 (2013)
- [32] D.-W. Oh et al., *Thermal conductivity and dynamic heat capacity across the metal-insulator transition in thin film VO_2* ; *Applied Physics Letters*, **96**, 151906 (2010)
- [33] X. Sheng, Z. Li, Y. Cheng, *Electronic and Thermoelectric Properties of V_2O_5 , MgV_2O_5 , and CaV_2O_5* ; *Coatings*, **5**, 453 (2020)
- [34] H. Schroeder, *Poole-Frenkel-effect as dominating current mechanism in thin oxide films-an illusion?!*; *Journal of Applied Physics*, **117**, 215103 (2015)
- [35] M. Eckstein, T. Oka, and P. Werner, *Dielectric breakdown of mott insulators in dynamical mean-field theory*; *Phys. Rev. Lett.*, **105**, 146404 (2010)
- [36] S. M. Bohaichuk et al., *Localized triggering of the insulator-metal transition in VO_2 using a single carbon nanotube*; *ACS Nano*, **13**, 11070–11077 (2019)
- [37] Y. Zhang and S. Ramanathan, *Analysis of “on” and “off” times for thermally driven VO_2 metal-insulator transition nanoscale switching devices*; *Solid-State Electronics*, **62**, 161–164 (2011)
- [38] G. Hamaoui et al., *Thermophysical characterisation of VO_2 thin films hysteresis and its application in thermal rectification*; *Scientific Reports*, **9**, 8728 (2019)

10. Summary

The aim of my study was to present a VO₂ based memristor and to reproduce its operation by finite element simulation. For this purpose, I first described the construction and operation of resistive switches based on the literature. I demonstrated the relevance of their research, owing to their wide range of applications.

Afterwards, I first briefly presented VO₂-based memristors, followed by a longer description of a real device. In that part I introduced the device fabrication process and highlighted the specialty of the asymmetric device geometry. I described the electrical characteristics of the device (current-voltage, resistance-voltage) and how the parameters, describing the switching phenomenon (voltage, current, power), are varied as a function of the base temperature.

A mathematical model was set up to analyze the operation of the real device. Within this model, I distinguished a thermal and an electrical case, which supposedly describe the IMT. I derived separately the differential equation and the boundary conditions for the two cases. I coupled the two extreme cases in an electrothermal model.

The equations used in the mathematical model were solved numerically using the finite element method. I have described the software and the modules used within it. In the simulation, I used a geometry corresponding to the real design of the device. A significant part of the material properties was chosen based on the literature. Particular emphasis was given to the determination of the conductivity of VO₂ as it plays a key role in the operation of the device.

As a result of the simulation, I have plotted the spatial distribution of the electrical potential and temperature in the device and the current density obtained in the cross section. I compared the characteristics obtained for the purely thermal, purely electrical and electrothermal cases. Based on the current-voltage and resistance-voltage curves, I concluded that the electrothermal model perfectly describes the operation of the device in the high resistance state. I also investigated the base temperature dependent switching parameters, where the results of the electrothermal simulation also gave the best approximation to the measurement.