



*Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem
Villamosmérnöki és Informatikai Kar*

Termikus-elektromos eszközök multi- domain modellezése

TDK Dolgozat

*Szerző: Ur Soma
Témavezetők: Dr. Pohl László
Dr. Mizsei János*

*Elektronikus Eszközök Tanszéke
Budapest, 2016*

Összefoglaló	3
Abstract	4
1. Elméleti áttekintés	5
1.1 Bevezetés	5
1.2 A vanádium-dioxid tulajdonságai	6
1.3 A fonzisztor	7
1.4 A termikus-elektromos áramkörök jellemzői	9
2. A SUNRED térszimulátor működése	11
2.1 A SUNRED szimulátorról	11
2.2 A SUNRED elektrotermikus modellje	11
2.3. Hiszterézis szimulációja	14
3. Kvantumfizikai jelenségek párszáz nanométeres tartományban	16
4. Vanádium-dioxid ellenállás-hőmérséklet karakterisztika modellek összehasonlítása	17
5. Laterális elrendezésű VO ₂ ellenállás szimulációja	21
5.1 A modellekben használt anyagok paraméterei és a szimuláció általános beállításai	21
5.2 A laboratóriumban mért áram-feszültség karakterisztika	23
5.3 A szimulált áram-feszültség karakterisztika	25
5.4 A termikus ellenállások összehasonlítása	27
5.5 Különböző részletességű ellenállás struktúrákon végzett szimulációk	29
6. Fonzisztor modellek összehasonlítása	33
7. Két bemenetű logikai kapuk szimulációja	36
7.1 NOR kapu	37
7.2 NAND kapu	39
8. Összefoglalás	41
Irodalomjegyzék	42

Összefoglaló

Az integrált áramköri technológia fejlődésének egyik meghatározó eleme a méretcsökkentés. Mára eljutottunk abba a mérettartományba, ahol a további méretcsökkentés elkerülhetetlen fizikai okokból (alagúthatás, p-n átmenet szivárgási árama stb.) egyre nehezebb, vagy nem is folytatható. Sok esetben jelentős problémát jelent az áramkörök működése során fellépő disszipáció. Építhetők azonban olyan, eszközök, ahol a hőhatást fel lehet használni információtárolásra, illetve -továbbításra, mert nanométeres tartományban a termikus folyamatok az elektromos folyamatokkal összemérhető sebességben zajlanak. Az olyan áramköröket, melyek a disszipációs hőjelenséget hasznosítják, hívjuk termikus-elektromos áramkörnek.(TELC)

A TELC ötletét a fém-félvezető fázisátalakulásra képes anyagok inspirálták. Ezek az anyagok szobahőmérsékleten félvezetők, egy adott hőmérséklet felett azonban az ellenállásuk három-négy nagyságrendet csökken, és fémes tulajdonságokat mutatnak. Kutatásunkban a vanádium-dioxidot (VO_2) használjuk, melynek fém-félvezető fázisátalakulása 67°C körül következik be. Ahhoz azonban, hogy a vanádium-dioxidot felhasználva termikus elven működő áramköröket lehessen készíteni, elengedhetetlen, hogy pontos eszközmodellt állítsunk fel a megvalósítani kívánt struktúrára, valamint, hogy pontos termikus-elektromos szimulációkat végezzünk rajta.

Dolgozatomban összefoglalom a vanádium-dioxid anyagtulajdonságait, fém-félvezető átalakulásának folyamatát, illetve, hogy hogyan lehet e tulajdonságát hasznosítani. Felvázolom a termikus-elektromos áramkörök alapelemének, a fonzisztornak a működési elvét, valamint a termikus-elektromos logikai áramkörök koncepcióját. Az elméleti részt követően bemutatok három különböző modellt a vanádium-dioxid ellenállás-hőmérséklet karakterisztikájára és összehasonlítom a különböző modellek használatával készített szimulációs eredményeket. Ezt követően ismertetek egy lehetséges VO_2 ellenállás struktúra modellt és egy fonzisztor struktúra modellt valamint az ezeken végzett szimulációkat, és elemzem a kapott karakterisztikákat. Összehasonlítom a különböző részletességű ellenállás struktúra modellek szimulációs eredményeit a laboratóriumban végzett mérési eredményekkel. Ezután összevetem a különböző méretű fonzisztor struktúrák szimulációs eredményeit, végül felvázolok VO_2 ellenállásokból álló logikai kapu struktúrákat, és megvizsgálom a működésüket.

Abstract

One of the most dominant aspect of the development of integrated circuit technology is size reduction. By now we have reached the size range, where the further size reduction is more and more difficult, or even impossible because of unavoidable physical effects such as tunneling effect and leakage currents through p-n junctions etc. Furthermore dissipation can cause significant problems, which is the generated heat-energy that the working device produces. However this effect can be used for information storage and transmission, because in nanometer sizes the thermal effects take comparable time to electrical effects. The circuits that use dissipation heat effect are called thermal-electric (logical) circuits (TELC).

The idea of TELC was inspired by materials that are capable of semiconductor-to-metal transition (SMT). These kind of materials are semiconductors at room-temperature, but their specific resistance drops three to four orders of magnitude above a given temperature, so their properties become metallic. The material we use in our research is vanadium-dioxide (VO_2), its semiconductor-to-metal transition occurs at about 67°C . In order to create thermal-electric circuits using the vanadium dioxide, it is inevitable to set up an accurate device model for the structure wished to be realized, and to perform precise thermal-electric simulations.

In my work I summarize the material properties of vanadium dioxide, the process of its semiconductor-to-metal transition and the possibilities of usage. I present the operating principle of phonsistor, the basic unit of the thermal-electric circuits and the concept of thermal-electric logical circuits. After the theoretical part I present three different models of VO_2 and I compare the result made with them. Then I introduce a possible VO_2 resistor structure model and a phonsistor structure model, and analyse the simulation results. I compare the simulation results of low and high resolution resistor structure models to the measurement results. After that I confer the simulation results of different sized phonsistor structures and at the end I present possible logical gate structures based on VO_2 resistors and the simulation results of their behaviour.

1. Elméleti áttekintés

1.1 Bevezetés

Az elmúlt évtizedig az elektronika fejlődése követte a Moore törvényben megjósoltakat, a tranzisztorok számának további növelése azonban fizikai korlátokba ütközik. Ma már léteznek 14 nm-es csíkszélességű tranzisztorok, ám a méretcsökkentés nem folytatható a végtelenségig, mert az atomi méretek közelében már kvantumfizikai törvények érvényesülnek, tehát az elektronikus eszközök, így a tranzisztorok is a klasszikustól eltérő viselkedést mutatnak. A nagy integráltságú logikai hálózatok CMOS elemeket (kapukat) tartalmaznak, melyek kétszer annyi tranzisztorból állnak, mint amennyi a logikai bemeneteik száma. Ez a tulajdonságuk lehetetlenné teszi, hogy méretüket egy bizonyos értéknél lejjebb csökkentsük, ugyanis a MOS tranzisztor határfelületei (fém-szigetelő határfelületek, pl.: vezérlő elektród-szigetelő, vagy fém-félvezető határfelületek, pl.: forrás-fém kontaktus, nyelő-fémkontaktus stb.) nem lehetnek egymáshoz közelebb, mint az a távolság, amin az elektron alagúthatással képes áthatolni. Súlyos problémákat okoz az áramkörök működése közben fellépő disszipáció is, ami a mai pár tíz nanométeres tartományban egyre nehezebben vezethető el, a hűtés megoldása egyre kritikusabb feladattá vált.

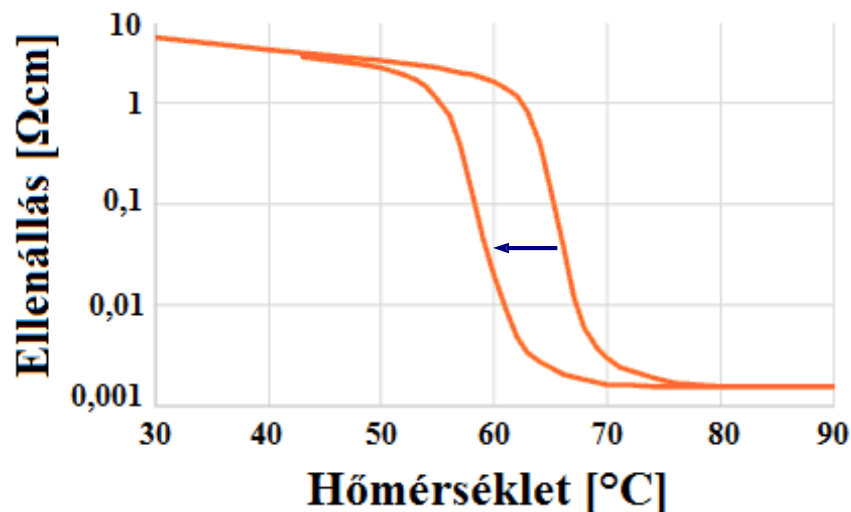
A dolgozatomban bemutatott eszközök azon a felismerésen alapulnak, hogy ha az alkatrészek működése közben elkerülhetetlenül hő keletkezik, akkor ezt fel lehet használni vezérlésre, illetve információtovábbításra. A méretek nanométeres tartományában a termikus időállandók nanoszekundum alá esnek, tehát a termikus folyamatok sebessége az elektromos jelterjedés sebességével összemérhetővé válik, így a termikus vezérléssel működő eszközök ebben a mérettartományban felvehetik a versenyt a CMOS áramkörökkel a termikus csatolás, illetve az adott elem hőmérséklete is felhasználható, például logikai állapot tárolására.

Ilyen termikus vezérléssel működő termikus-elektromos (logikai) áramkörök (TELC) kutatása zajlik az Elektronikus Eszközök Tanszéken, melynek alapja a fém-félvezető fázisátalakulásra képes vanádium-dioxid.

1.2 A vanádium-dioxid tulajdonságai

A vanádium-dioxid szobahőmérsékleten monoklin kristályrács-szerkezetű anyag, melynek „c” paramétere tipikusan 67°C-os hőmérséklet fölött megfelelődik, és a vanádium-dioxid rácsszerkezete tetragonális lesz. Az ezen a ponton létrejövő fázisátalakulás következtében félvezető tulajdonságait elveszti, fajlagos ellenállása három-négy nagyságrendet csökken, vezető anyaggá válik. A jelenség hivatalos megnevezése a fém-félvezető átmenet: semiconductor-to-metal transition (SMT) [2]

A vanádium-dioxid ellenállás-hőmérséklet karakterisztikája az 1.2.1. ábrán látható.



1.2.1. ábra: A VO₂ ellenállás-hőmérséklet karakterisztikája.

A karakterisztika hiszterézist tartalmaz, ami azt jelenti, hogy külső energia hatására (jelen esetben hő) az anyag szerkezete átalakul, emiatt megváltoznak a tulajdonságai. Az átalakulás az energiát reprezentáló intenzív mennyiség (jelen esetben a hőmérséklet) bizonyos szintje fölött történik meg, viszont a visszaalakulás nem ugyanezen a szinten, hanem ennél alacsonyabb szinten valósul meg. Ha a hőmérséklet növekedése megáll, miközben az átalakulás még nem zajlott le teljes mértékben, akkor nem „visszamegyünk” az eddigi karakterisztikán, hanem ezen, a részben átalakult szinten maradunk egészen addig, míg elérjük azt a hőmérsékletet, amikor az anyagszerkezet elkezd visszaalakulni. A 1.2.1. ábrán ezt a sötétkék nyíl mutatja.

A hiszterézis kezdő -és véghőmérséklete, szélessége és meredeksége függ a rétegleválasztási technológiától, a szubsztrát anyagától, esetleges V₆O₁₃ jelenlététől stb. [6]

A fázisátalakulás hőmérséklete kis mértékben szabályozható, ha fémekkel, például krómmal vagy wolframmal adalékoljuk a vanádium-dioxidot [2]

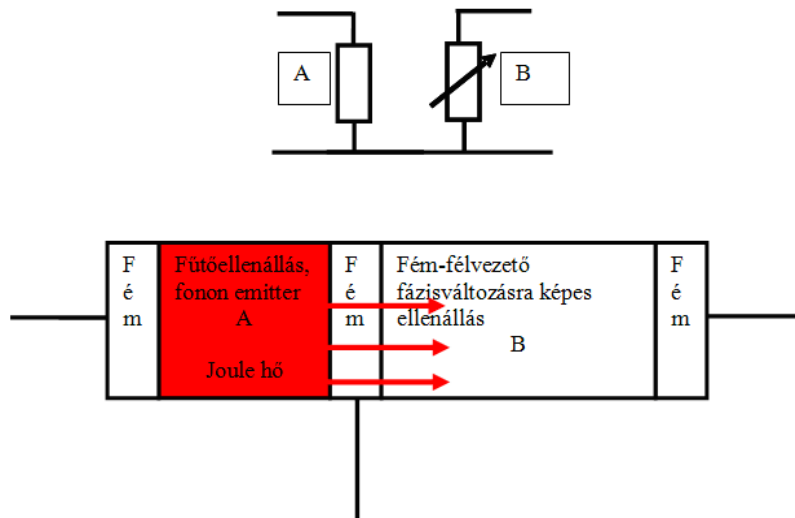
A TELC ötletét ezen anyag tulajdonságai inspirálták, ugyanis kristályszerkezete, vagyis a vezetőképessége a hőmérsékletével szabályozható. A 1.2.1. ábrán láthatjuk, hogy a három-négy nagyságrendnyi ellenállás-változás igen rövid, egy-két °C-os tartományban történik, mely tulajdonsága lehetővé teszi számos gyakorlati alkalmazás megvalósítását, akár ultragyors kapcsolók, tranzisztorok vagy elektromos memóriaeszközök formájában. [2]

A vanádium-dioxid, tulajdonságait tekintve tehát lehetővé teszi, hogy a továbbiakban ebből az anyagból készített ellenállásokból tervezzünk termikus-elektromos elven működő logikai áramkört (TELC-eszközt). Nagy előny, hogy az anyag leválasztható szilícium szeletre, így reményeink szerint az eddig tervezett CMOS logika szerint működő áramköröket nem kell újratervezni és a szilíciumhordozó felületén kialakítható a már termikus elven működő áramkör.

1.3 A fonzisztor

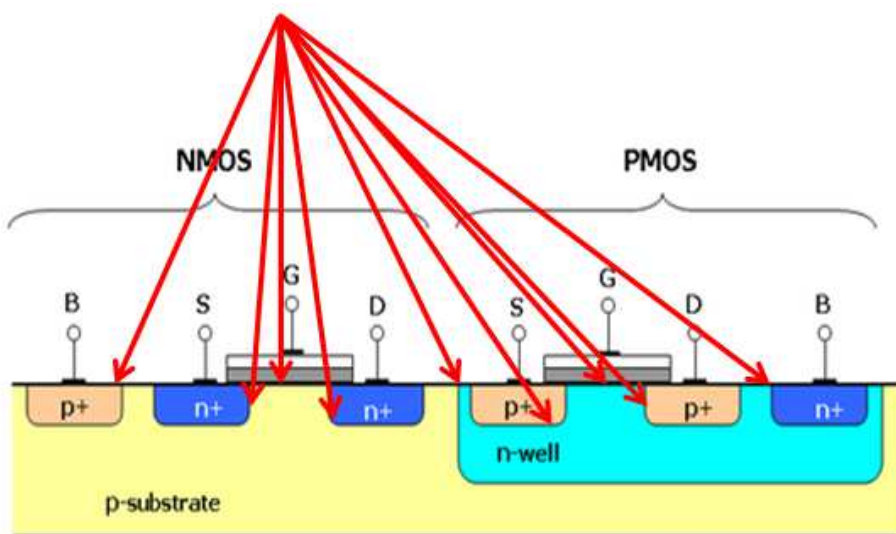
A TELC hálózatok alapegysége a termikus-elektromos tranzisztor: a fonzisztor. Ez az eszköz egy fűtőellenállásból és egy fém-félvezető fázisátalakulásra képes (VO_2) ellenállásból áll. A fonzisztor működését tekintve tulajdonképpen teljesen analóg a bipoláris tranzisztor működésével (1.3.1. ábra), ugyanis amint a fűtőellenállást bekapcsoljuk, az melegíteni kezdi a VO_2 ellenállást, és ha elegendő hő termelődik a fűtőellenálláson, akkor létrejön a bekapcsolási jelenség, vagyis a vanádium-dioxid fázisátalakulást szenved. Lényeges különbség azonban, hogy a „bekapcsolás” létrejöhet magára a VO_2 ellenállásra kapcsolt feszültség vagy áram okozta disszipáció következményeként is. A fűtőteljesítménnyel vezérelni lehet a fém-félvezető fázisváltozásra képes (SMT) ellenállás bekapcsolási küszöbfeszültségét és tartóáramát (amit a VO_2 ellenállásra kapcsolunk, hogy egy adott hőmérsékleten tartsa azt). [4] (Például: ha csak akkora teljesítményt adok a fűtőellenállásra, hogy még nem történik meg a fázisátalakulás a VO_2 ellenálláson, csak pár °C-ot nőtt a hőmérséklete, akkor már kisebb feszültséget kell rákapcsolnom a VO_2 ellenállásra ahhoz, hogy a disszipáció keltette hő következtében elérje a fázisátalakuláshoz szükséges hőmérsékletet.) Ez a tulajdonsága nagy hasonlóságot mutat a tirisztor viselkedésével, csak ott a rákapcsolt feszültséggel tudjuk szabályozni a bekapcsolási jelenség létrejöttét.

A fonzisztor felépítéséből látható (1.3.1. ábra), hogy a MOS eszközökhöz képest kevesebb határfelületet tartalmaz (CMOS inverter határfelületei: 1.3.2. ábra). A három kontaktusa közül pedig a két bemeneti kontaktus igen közel lehet egymáshoz, ebből adódóan ez az eszköz kisebb méretben is megvalósíthatónak tűnik, mint egy MOS tranzisztor, ezért lehetséges, hogy az integrált áramköri technológia egyre nehezebben kivitelezhető méretcsökkentésében szerepet kaphat. (A szakirodalom szerint 10 nm-es kristályon már sikerült kimutatni SMT hatást.) [17]



1.3.1. ábra: A termikus-elektromos elven működő tranzisztor (fonzisztor)

- a.) Egyszerű helyettesítőkép b.) Fizikai megvalósítás [4]

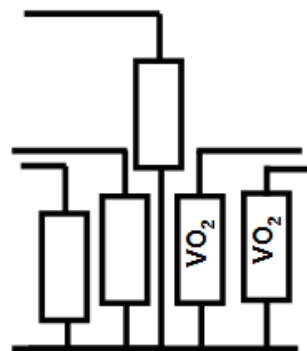


1.3.2. ábra: Egy tipikus CMOS inverter struktúra határfelületei [7]

Makroszkopikus méretekben az energiaátadás a felületek közötti hőátadással megy végbe. Az elektron szabad úthosszával összemérhető mérettartományok esetén a „fűtési” jelenség az előzőtől eltérően zajlik. Ha a rétegvastagságok a nanométeres tartományban vannak, akkor az „A” réteg árama (1.3.1. ábra) nem csak a réteget fűti, hanem azt a tartományt is, ahol az elektronok ütközésük során leadják energiájukat (tehát, ami a szabad úthosszukon belül van), vagyis a fém kontaktust és közvetlenül a fázisváltozásra képes ellenállást. (Részletesebben a 3. fejezetben) [4]

1.4 A termikus-elektromos áramkörök jellemzői

A fonzisztor elvét felhasználva bonyolultabb termikus vezérléssel működő áramkörök is elképzelhetőek. Ezek a termikus elektromos (logikai) áramkörök (TELC), amelyek egy vagy több VO₂ ellenállásból és fűtőellenállásokból állnak. A VO₂ ellenállások funkcionálhatnak kimenetként és bemenetként is, a fűtőellenállások csak bemenetként használhatóak. A termikus csatolás mértékétől függően egy vagy több fűtőellenállás („bemenet”) aktiválása szükséges, hogy a VO₂ ellenálláson létrejöjjön az SMT hatás, tehát bekapcsoljon. Ha a fűtőellenállások termikus csatolása kellően szoros, akkor elég csak az egyiket feszültség alá helyezni ahhoz, hogy elegendő hő fejlődjön az SMT hatás létrejöttéhez (logikai „vagy” kapcsolat). Ha a csatolás lazább, akkor mindegyik fűtőellenállásra feszültséget kell kapcsolni (logikai „és” kapcsolat). A termikus csatolást a fűtőellenállások távolságával és a hőszigetelés minőségével beállítva összetettebb logikai függvény is megvalósítható, ideértve azt az esetet is, amikor egy, vagy több fűtőellenállás („bemenet”) is fázisátalakulásra képes anyagból van kialakítva. Ebben az esetben a bemenet is képes termikus módon a logikai szint megőrzésére mindaddig, míg a kapu bekapcsolt állapota fennáll. [4]

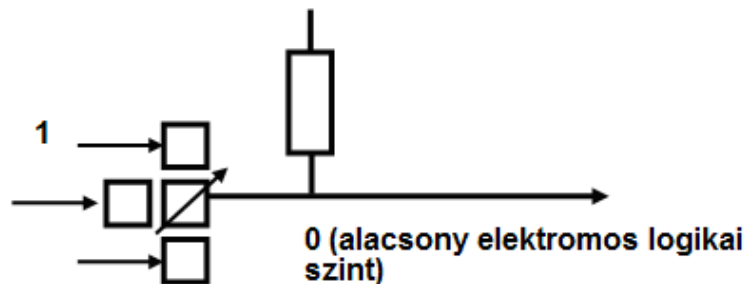


1.4.1. ábra: Egy egyszerű termikus-elektromos hálózat kapcsolási rajza [4]

A termikus csatolásokat egy adott rendszerhez, egy adott órajel frekvenciához kell tervezni. Előfordulhat ugyanis, hogy egy „bemenetet” túl rövid ideig fűtünk (túl nagy az órajel frekvencia), és nem melegszik fel eléggé ahhoz, hogy hatását érvényesítse, tehát egy eredetileg logikai „vagy” kapcsolatként definiált egység logikai „és” kapcsolatot fog megvalósítani. Ellenkező esetben, ha az órajel frekvencia túl kicsi, előfordulhat, hogy több hő fejlődik az egyik „bemeneten” mint kellene (túl sokáig fűtjük) és logikai „és” kapcsolat helyett logikai „vagy” kapcsolat fog megvalósulni.

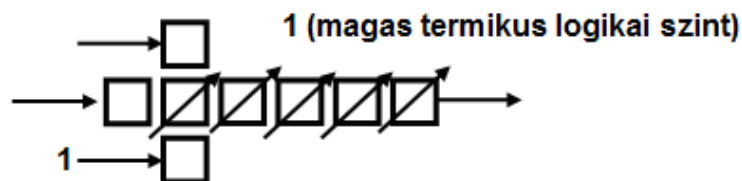
A termikus-elektromos logikai kapukat legegyszerűbb egy felhúzó ellenállással kiegészítve megvalósítani (1.4.2. ábra), kialakítva ezzel egy feszültségosztót. A kapuk elektromos kimenetén a bemenet bekapcsolt („logikai 1”) állapotához alacsony kimeneti szint („logikai 0”) tartozik, (hiszen a VO_2 ellenállás értéke lecsökkent), tehát elektromos szempontból a kapuk invertálnak. Termikus szempontból a kimeneten „meleg” állapot jelenik meg, azaz termikus „logikai 1” szint, tehát a kapuk nem invertálnak. Az így felépített logikai kapu termikus kimeneti jele a termikus diffúziós hossz nagyságrendjébe eső távolságokra kihatva vezérli a többi környező kaput, elektromos kimeneti jele pedig fémes vezetővel nagyobb távolságokra is elvezethető, csakúgy, mint a termikus „logikai 1” szint egymás mellé helyezett, és sorban bekapcsolódó ellenállásokkal (1.4.3. ábra).[4]

•Elektromos csatolás: „nem-vagy”



1.4.2. ábra: Elektromos kimeneti jel. (NOR kapcsolat). Fémes vezetővel elvezethető. [4]

•Termikus csatolás: „vagy”



1.4.3. ábra: Termikus kimeneti jel. Elvezethető egymás mellé helyezett ellenállásokkal. [4]

2. A SUNRED térszimulátor működése

2.1 A SUNRED szimulátorról

A mérnöki munka során a megtervezett eszköz helyes működésének első ellenőrzése általában szimulációval történik, mert ez jóval gyorsabb és olcsóbb, mint az eszköz tényleges megépítése és bemérése. Szimuláció segítségével olyan jelenségek is vizsgálhatók, melyek a létező eszközön csak fizikai roncsolással, vagy még azzal sem lennének megfigyelhetők, ezért elengedhetetlenül fontos a vizsgált jelenségek modellezésére alkalmas szimulátor megléte. Esetünkben ez a lehető legpontosabb elektrotermikus szimulációt jelenti, figyelembe véve a vanádium-dioxid fázisátalakulásának igen keskeny, egy-két °C-os tartományát.

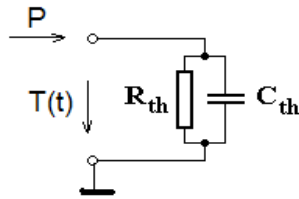
A szukcesszív hálózatredukciós (SUNRED – SUccessive Network REDuction) algoritmus a véges térfogatok módszerével létrehozott hálózatmodell megoldására kidolgozott hatékony számítási eljárás, melyet Dr. Székely Vladimir dolgozott ki. [8]

Az eredeti SUNRED szimulátor csak termikus szimulációra képes. Ha a hő keletkezésének helye és mértéke ismert, és termikus vizsgálat a cél, akkor elegendő a termikus szimuláció. Jelen esetben azonban az elektromos áramok útja, és így a disszipáció keletkezésének helye is csak elektromos szimulációval határozható meg kellő pontossággal. Az elektromos paraméterek hőmérsékletfüggése félvezető eszközöknél jelentős, így az elektromos és a termikus tér közötti csatolás kétirányú. Ez különösen igaz a VO₂-ra, így számunkra nélkülözhetetlen az elektrotermikus szimuláció. Erre a Dr. Pohl László által készített VSUN-3 szimulátort használtam, mely az eredeti SUNRED algoritmusra épülő új (folyamatos fejlesztés alatt álló) elektrotermikus szimulátor.

2.2 A SUNRED elektrotermikus modellje

Az elektromos és a termikus transzportfolyamatok hasonlóan írhatók le. Ez hasonló modellezést tesz lehetővé, így az elektronikában gyakran alkalmazott koncentráltparaméterű modellek mintájára a termikus jelenségek modellezésére is alkalmazhatók koncentráltparaméterű modellek, ún. hőáramhálózatok.

Megfelelően kis anyagrészt választva a hővezetést és a hőkapacitást állandónak tekinthetjük. Egy ilyen kis anyagrész legegyszerűbb dinamikus modelljét a 2.2.1. ábra mutatja.



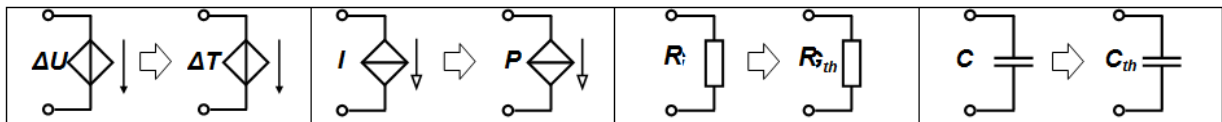
2.2.1. ábra: A legegyszerűbb termikus helyettesítőkép [8]

Ha az egy hőellenállásból és hőkapacitásból álló párhuzamos ágra „P” teljesítményt kapcsolunk, akkor a kapcsón a hőmérséklet a következőképpen változik:

$$T(t) = P \cdot R_{th} (1 - \exp(-t/\tau))$$

ahol $\tau = R_{th} C_{th}$ a rendszer termikus időállandója.

A rendszerbe belépő hőt az elektromos áramforrással ekvivalens hőáramforrással, a fix hőmérsékletű felületet elektromos feszültségforrással ekvivalens komponensként, a hővezetési képességet pedig hőellenállásként modellezzük. A hőáramhálózatok komponenseit a 2.2.2. ábra mutatja:



2.2.2. ábra: Az elektromos komponensek és a hőáramhálózatokat felépítő ekvivalenseik (feszültségforrás-állandó hőmérséklet különbség, áramforrás-hőáramforrás (teljesítmény), ellenállás-hőellenállás, kapacitás-hőkapacitás) [8]

A VSUN-3 szimulátor a szimulálni kívánt struktúrára egy elektromos és egy termikus modellt készít, melyek differenciálegyenleteit a véges térfogatok módszerével (FVM – Final Volumes Method) oldja meg. Mindkét modell figyelembe veszi az elektromos és termikus tér közötti kétirányú csatolást, vagyis első esetben a hőmérséklet hatását az elektromos térre, második esetben az áram hatását a termikus térre. A véges térfogatok módszere a divergenciát tartalmazó differenciálegyenletek megoldására használható. Először cellákra, ún. kontrolltérfogatokra osztja a szimulációs tartományt, majd a megoldandó differenciálegyenlet integrálját írja fel az összes ilyen térfogatra, amit Gauss integráltételével felületi integrállá alakít, ezáltal a vizsgált folyamatot jellemző intenzív mennyiség helyett annak extenzív áramát fejezi ki. Mivel az adott térfogat valamely oldalán befolyó áram megegyezik a

szomszédos cella vele érintkező oldalán kifolyó árammal, a módszer garantálja a megmaradási törvények betartását. [8]

A SUNRED által az elektromos tér szimulációjára használt egyenlet a következő:

$$\int_{V_{i,j,k}} \text{div}(\sigma \text{grad} U + S \sigma \text{grad} T) dV = 0$$

ahol σ az elektromos vezetőképesség, U az elektromos feszültség, T a hőmérséklet, S pedig a Seebeck együttható. Az egyenlet első tagja az elektromos vezetést, a második a Seebeck hatást reprezentálja, hiszen ez a két jelenség határozza meg az egyes cellákban az áramsűrűséget. Az áramsűrűség divergenciája pedig az energia-megmaradás és a részecske-megmaradás törvénye miatt nullával egyenlő.

(Seebeck effektus: Hőmérséklet-különbség hatására elektromos térerősség jelenik meg az anyagban.)

A termikus tér szimulációjára használt egyenlet:

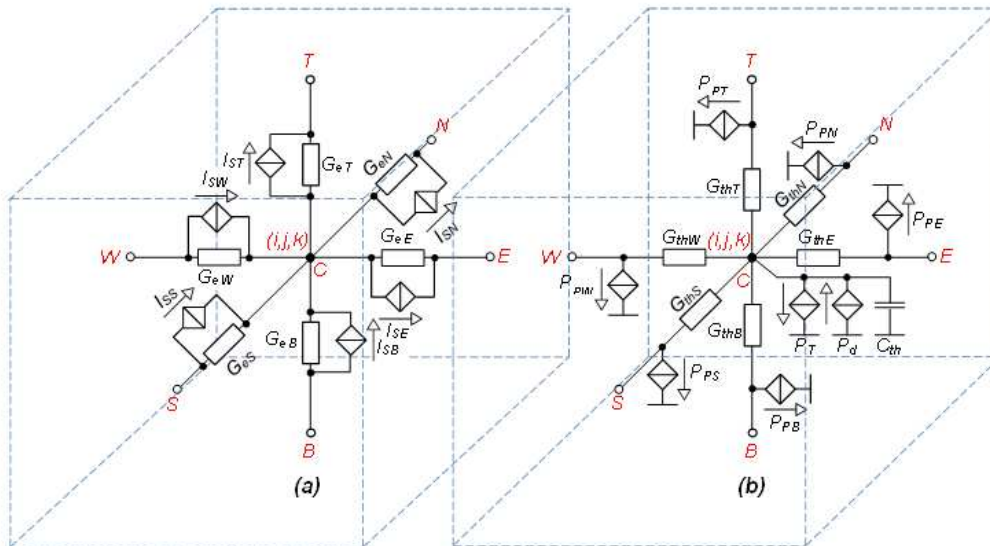
$$\int_{V_{i,j,k}} \text{div}(\lambda \text{grad} T) dV = \int_{V_{i,j,k}} \left(-\frac{j^2}{\sigma} + T \underline{j} \text{grad} S + c_{th} \frac{\partial T}{\partial t} \right) dV$$

ahol λ a fajlagos hővezetés, T a hőmérséklet, J az áramsűrűség, σ az elektromos vezetőképesség S a Seebeck együttható, C_{th} a hőkapacitás, t pedig az idő. Az egyenlet bal oldalán a hővezetés található, ez határozza meg a hőáramlást az anyagban. A hőáramlás divergenciáját (megváltozását) pedig az egyenlet jobb oldalán szereplő mennyiségek határozzák meg. Az első tag a Joule-hőt, a második tag a Peltier-Thomson hatást a harmadik pedig a hőkapacitást reprezentálja.

(Joule hő: Az elektromos ellenállással rendelkező anyagon átfolyó áram hőt kelt, mely fordítottan arányos a vezetőképességgel, és egyenesen arányos az áramerősség négyzetével.

Peltier-Thomson hatás: Ha áram folyik egy anyagban és a Seebeck együttható változik a hely függvényében, akkor hő keletkezik, vagy nyelődik el.)

Az egyenletek felületi integrállá való alakítása után az egyes cellák középpontjából (kontrollpont) kifelé mutató vektorokra vonatkozó összefüggésekre jutunk. A cella kontrollpontját a szomszédos cella kontrollpontjával összekötő szakasz, és a cellafal metszéspontját az angol égtájaknak megfelelően W(est), E(ast), S(outh), N(orth) névvel jelöljük, a „z” irányú metszéspontok neve pedig B(ottom) és T(op). A VSUN-3 háromdimenziós cellamodelljét a 2.2.3. ábra mutatja. [8]



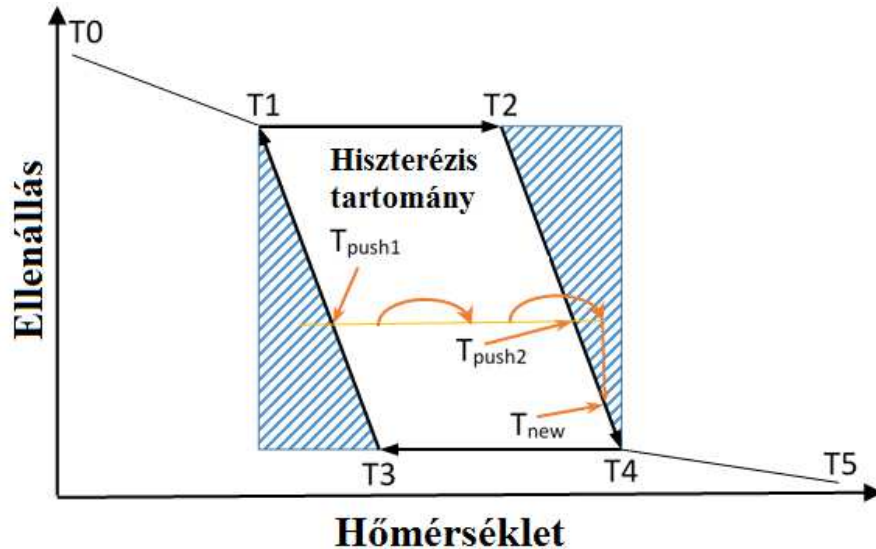
2.2.3. ábra: Az elektrotermikus tér 3D elemi SUNRED cellája

(a) elektromos tér (b) termikus tér [8]

2.3. Hiszterézis szimulációja

A vanádium-dioxid ellenállás-hőmérséklet karakterisztikája hiszterézist tartalmaz, tehát a szimulátornak tudnia kell ezt kezelni. Hiszterézises anyag szimulációja esetén ahhoz, hogy az anyagparamétereket meghatározzuk, a hőmérsékleten kívül még azt is tudnunk kell, hogy az anyag mekkora része alakult már át. Ezt a modell minden cellájára meg kell jegyezni, valamint az átalakuláskor felszabaduló illetve elnyelődő energiát is kezelni kell. Gondot okoz továbbá, hogy a diszkrét időpontokban történő szimuláció két időpontja között annyit változhatnak az anyagparaméterek, hogy az egész hiszterézises szakaszt átugorja, így a szimuláció nem veszi figyelembe a fázisátalakuláshoz szükséges energiát. A probléma sűrűbb időlépésekkel kiküszöbölhető, de ennek automatikusnak kell lennie, hogy ne a felhasználónak a feladata legyen kitalálni, hogy figyelembe vette-e a szimuláció a hiszterézist vagy sem. A gyakorlatban ez azt jelenti, hogy a szimulátornak minden lépés után ellenőriznie kell, hogy beleugrott-e egy hiszterézises tartományba, ill. átugrotta-e, és ha igen, akkor a szimulációs eredményt el kell dobni, és időben visszalépve kell új számítást végeznie. Azaz a szimulátornak meg kell jegyeznie az előző szimulációs lépés időpontját, összes paraméterét és eredményét, hogy ebből kiindulva tudjon új számítást végezni. A hiszterézises modell egy olyan algoritmust alkalmaz, ami mindezekről gondoskodik. [9]

A VO₂ R-T karakterisztikája esetén a SUNRED egy paralelogrammával modellezi a hiszterézis tartományt (2.3.1. ábra). A számítás egyszerűsége érdekében a fajlagos vezetőképességet hőmérséklet-függetlennek tekintjük a hiszterézis tartomány azon részein, ahol nem történik fázisátalakulás. [9]



2.3.1. ábra: A SUNRED hiszterézis modellje

Ha a hőmérséklet folyamatosan nő, akkor az anyag ellenállása a T0-T1-T2-T4-T5 görbe mentén változik, ha folyamatosan csökken, akkor a T5-T4-T3-T1-T0 mentén. (A fázisátalakulás a T2-T4, illetve a T3-T1 között következik be.) Ha hőmérséklet T0-ról T_{push2}-ig növekszik, utána pedig csökkenni kezd, az ellenállás állandó marad, amíg a hőmérséklet eléri T_{push1}-et (a fázisátalakulás mértéke nem változik), ez követően kezd el csökkenni T_{push1}-T1-T0 mentén. Ha a hőmérséklet T5-től T_{push1}-ig csökken utána újra nő, akkor az ellenállás a T5-T4-T3-T_{push1}-T_{push2}-T4-T5 görbe mentén változik. [9]

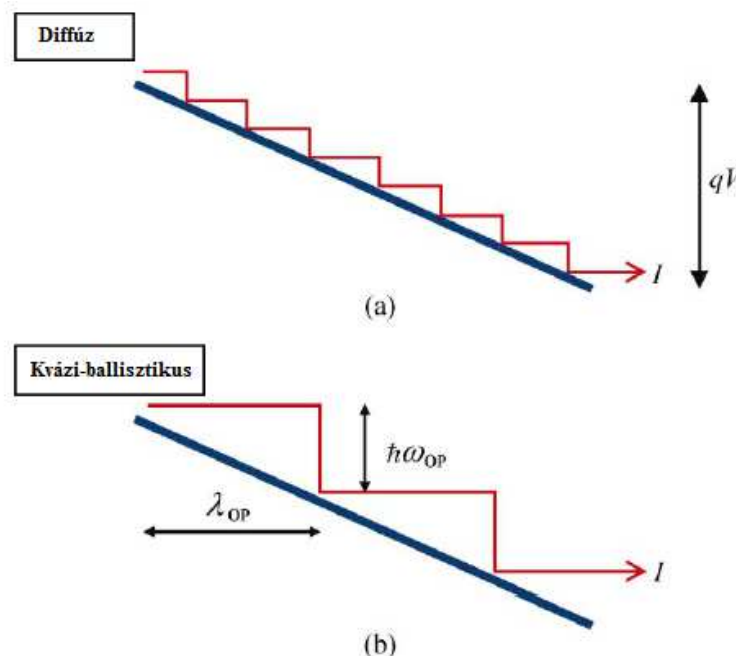
Annak érdekében, hogy a szimuláció ne ugorja át az egész hiszterézises szakaszt, minden cellára ellenőrizni kell, hogy történt-e fázisátalakulás, és ha annak értéke nagyobb, mint T4-T2 10%-a, akkor az algoritmus azt az eredményt eldobja, időben visszalép és kisebb lépésközzel új szimulációt végez. Ennek megvalósításához a SUNRED-ben minden elemi cellához egy segédcellát definiálunk, melyben eltároljuk az előző szimulációs lépéssel meghatározott hőmérsékletet, a fázisátalakulás mértékét illetve irányát.

A fázisátalakuláshoz szükséges energiát a modellben a hőkapacitáshoz adjuk hozzá. VO₂ esetén a térfogategységre jutó fajlagos hő $236,5 * 10^6 \text{ J/m}^3$. Ezt elosztjuk a T3-T1 tartomány szélességével, így megkapjuk azt a fajlagos térfogati hőkapacitást, ami a VO₂ normál hőkapacitásához adódik hozzá, ha a hiszterézis tartományban vagyunk.

3. Kvantumfizikai jelenségek párszáz nanométeres tartományban

Az előző fejezetben láthattuk, hogy a SUNRED az elektromos és termikus tér kiszámításához klasszikus fizikai összefüggéseket használ. Párszáz nanométeres tartományban azonban kvantumfizikai folyamatok zajlanak, melyek figyelembevétele szükséges a pontos modellezés érdekében.

Egy ellenálláson disszipálódó hőteljesítmény kifejezésének klasszikus összefüggése ($P = IU$) azon a jelenségen alapul, hogy az elektronok áramlásuk közben ütköznek az anyag atomjaival, melynek során mozgási energiájuk hővé alakul. Makroszkopikus méretekben ($L > 1 \mu\text{m}$) az összefüggés helyes eredményt ad, ez nevezik diffúz transzportnak (3.1. a) ábra). Az elektron szabad úthosszával összemérhető mérettartományban azonban ez az összefüggés az ellenálláson fejlődő tényleges hő értékénél nagyobb eredményt ad, mert az eszköz hossza nem elég nagy ahhoz, hogy elegendő ütközés végbemenjen, mielőtt az elektron kilép az ellenállásból, vagyis a disszipáció egy része nem az ellenálláson, hanem a környezetében lévő rétegeken fejlődik (pl. kontaktus). Ez a kvázi-ballisztikus transzport (3.1. b) ábra). [10]



3.1. ábra: Disszipáció diffúz és kvázi-ballisztikus transzport esetén

λ_{OP} az elektron szabad úthossza, $\hbar\omega_{OP}$ a leadott energiakvantum, qV az elektron teljes energiája

Ebben a mérettartományban nem csak a disszipáció mechanizmusa tér el a klasszikustól, hanem a hővezetés is. Egy elektron ütközése során egy fonon (az atomok rezgéseit leíró részecske) keletkezik, melynek szilárdtestben való terjedése határozza meg a hővezetést. Az irodalomban megtalálható leírások azonban nem szólnak az ütközések során keletkezett fononok frekvenciájáról és hullámvektoráról, ezért a hővezetéshez való hozzájárulásuk nem meghatározott. [11] Szintén számos modellt fejlesztettek ki a nanoméretű eszközök terjedési ellenállásának meghatározására, azonban mindegyik összefüggés különböző hossz-és szélességfüggést mutat. [12] [13]

Szilíciumban az elektronok szabad úthossza 10-50 nm [14], vanádium-dioxidon még nincs pontosan meghatározva. (Egyes kutatások szerint fémes állapotban 2,8 Å, félvezető állapotban egy-két nagyságrenddel nagyobb is lehet. [15]) Az általam használt legkisebb méret 200 nm, mely már a kvázi-ballisztikus mérettartományba esik, azonban a nanoméretű eszközök pontos, elektrotermikus modellezése még nem kivitelezhető, a megfelelő fizikai leírás hiányában. Az ebben a mérettartományban általam közölt eredmények, ezért nem számítanak egzaktoknak, csupán becslésnek tekinthetjük őket.

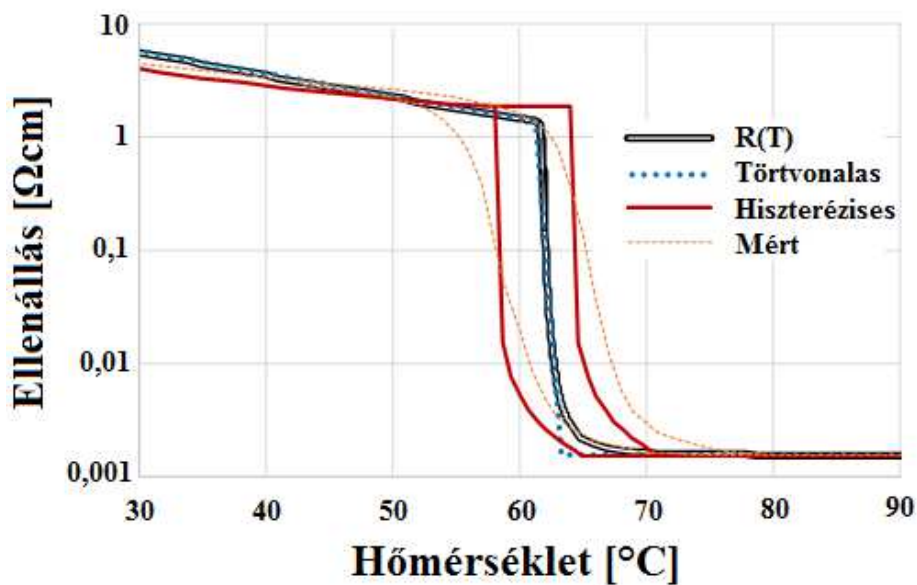
4. Vanádium-dioxid ellenállás-hőmérséklet karakterisztika modellek összehasonlítása

A VO₂ R-T függvényének modellezésére elsőként egy törtvonalas közelítésű hiszterézises modellt használtunk, melyet úgy állítottunk be, hogy a lehető legjobban illeszkedjen a mérési eredményekre. Ezt követte, egy folytonos tapasztalati függvény (a pontosabb modellezés érdekében), mely a paraméterek beállításával ráilleszthető a mérési eredményekre, viszont a hiszterézist nem veszi figyelembe.

$$R = \left(-a \frac{T-b}{\sqrt{(T-b)^2}} \frac{(T-b)^c}{(T-b)^c + d} + a \right) \exp \frac{e}{T} + g$$

Ebben az összefüggésben „*a*” a fázisváltozás során végbemenő ellenállás-változással arányos, melynek hőmérsékletét „*b*” szabja meg. A görbe meredekségét és az átalakulás hőmérséklet intervallumát „*c*” és „*d*” határozza meg. Félvezető állapotban a karakterisztika exponenciális, az „*e*” paraméter az anyag tiltott sáv szélességével áll kapcsolatban. Fém állapotban a függvény közel állandó, ezt a „*g*” paraméter határozza meg. [9]

A hiszterézises és a folytonos karakterisztikák összehasonlítása érdekében definiáltunk egy hiszterézis nélküli törtvonalas modellt is. A három függvény és a mérésekből származó karakterisztika látható a 4.1. ábrán.



4.1. ábra: Ellenállás-hőmérséklet karakterisztika modellek [9]

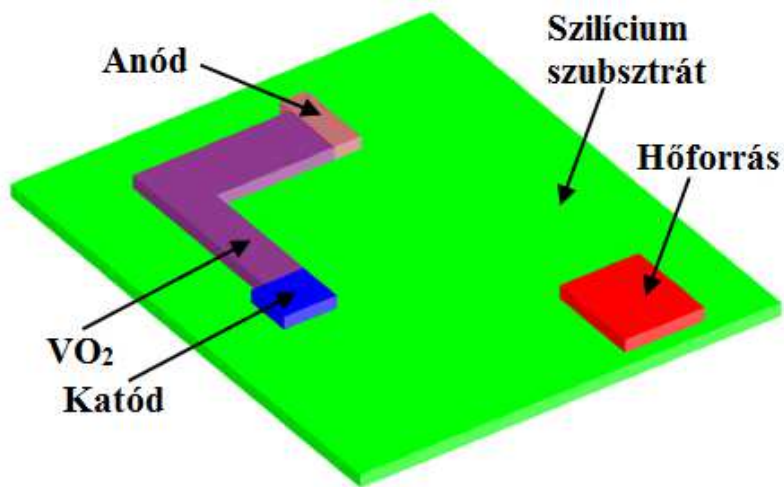
- A folytonos görbe paraméterei: $a = 10^{-6}$; $b = 335$ K; $c = 2$; $d = 0,01$; $e = 4500$ K; $g = 1,54$ mΩ
- A hiszterézis nélküli törtvonalas modellt négy ponttal definiáltuk:

T [°C]	27	61,35	63,35	95
R [Ωcm]	6,54	1,37	$1,54 \cdot 10^{-3}$	$1,54 \cdot 10^{-3}$

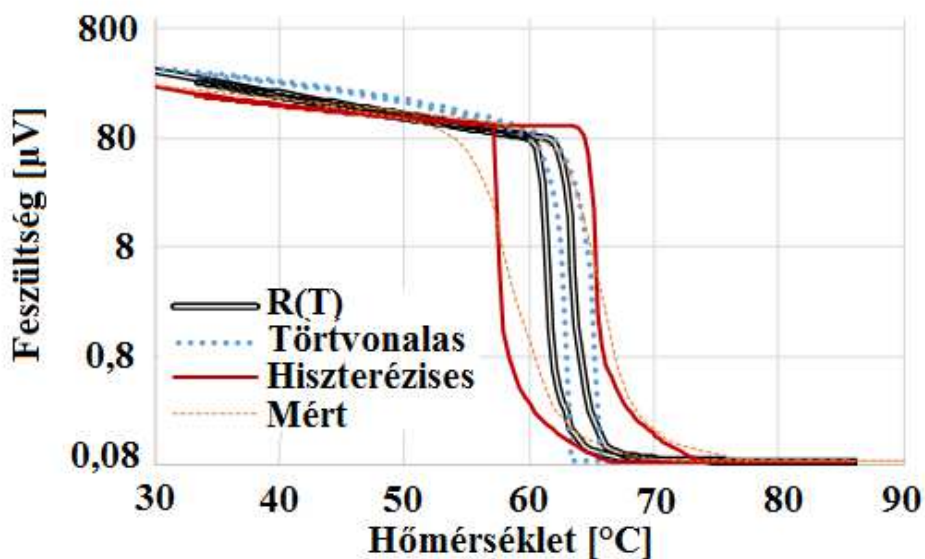
- A hiszterézises lineáris szakaszokból álló modell pontjai (2.3.1. ábra jelöléseivel):

T [°C]	T0 = 20	T1 = 58	T2 = 64	T3 = 63	T4 = 69	T5 = 95
R[Ωcm]	5	1,85	1,85	$1,54 \cdot 10^{-3}$	$1,54 \cdot 10^{-3}$	$1,54 \cdot 10^{-3}$

A modellek tesztelésére egy egyszerű struktúra modellt hoztunk létre. Egy $32 \times 32 \text{ mm}^2$ -es szilícium szeleten egy „L” alakú $12 \times 12 \text{ mm}^2$ méretű VO_2 ellenállásréteg található, melynek függőleges „lába” 5 mm, vízszintes „lába” 4 mm hosszú. Az ellenállással szemben egy $6 \times 6 \text{ mm}^2$ -es hőforrás található, a struktúrát pedig levegő veszi körül (4.2. ábra). A struktúrát mind a három ellenállásmodellel tranziens analízisnek vetettük alá. A szimulációt 3000 s-ig végeztük, melyből az első 1500 másodpercben a hőforrás 1,5 W teljesítményt adott le, mely melegítette a struktúrát, majd a forrás kikapcsolása után 1500 másodpercig hűlt a rendszer. Az ellenállást állandó $1 \mu\text{A}$ -es árammal hajtottuk, melynek disszipációja elhanyagolható. Az eredmények a 4.3. ábrán láthatóak. [9]



4.2. ábra: „L” alakú VO_2 struktúra modell [9]



4.3. ábra: Feszültség-hőmérséklet karakterisztikák a három ellenállásmodell használatával [9]

Megfigyelhető, hogy nem csak a hiszterézises R-T modellnél alakul ki hiszterézis, hanem a folytonos és a hiszterézis nélküli törtvonalas közelítés esetében is, melyek szélessége 2°C mindkét esetben. A hiszterézises modellnél ez 8°C , ami két fokkal szélesebb, mint az R-T függvényben beállított érték. A jelenség a melegedés és a hűlés közötti hőutak eltéréseivel magyarázható: Melegítéskor az ellenállásréteg egyik oldala felől érkezik a hő, ezért a hőmérséklet különböző mértékben nő a réteg egyes pontjain, míg hűléskor viszont minden irányban távozik. A feszültség „leesésekor” nem az egész réteg, csupán egy része alakult át fémes állapotba, míg visszafelé a feszültség emelkedésekor az egész réteg egyenletesen hűl ki. Azt is észrevehetjük, hogy a folytonos és a törtvonalas modellekkel kapott eredmények között alig van eltérés, tehát a törtvonalas közelítés nem okoz jelentős hibát az eredményekben, viszont a hiszterézises modellben a paralelogrammával modellezett szakasz (a 2.3.1. ábra jelöléseit használva) T1-től T2-ig tartó vízszintes része nem fedi a valóságot, az ellenállás csökkenése nem szűnik meg a fázisátalakulás előtt, mely hiba a szimulációs eredményekben is megmutatkozik.

Ha olyan árammal hajtottuk meg az ellenállást, hogy a saját magán keletkező disszipáció váltotta ki a fázisátalakulást, akkor a hiszterézis nélküli törtvonalas és a folytonos ellenállásmodell esetén a meredek karakterisztika miatt a tranziens analízis eredményei oszcillációt mutattak, mert az algoritmus mindig az előző szimulációs eredményekből számol tovább. Ha az ellenállás a fémes szakaszba került, akkor hirtelen lecsökken a rajta fejlődő hő is, ezért a következő lépésben a hőmérséklete kisebb lesz és ismét félvezető állapotba kerül, majd a megnövekedett disszipáció miatt ismét fémesbe stb. A probléma a szimulációs lépésköz csökkentésével kiküszöbölhető, azonban ez túl hosszú szimulációs időt eredményezett, ezért ezek a modellek csak akkor alkalmazhatók, ha a szimulátor képes automatikus lépésköz beállításra. (Ennek fejlesztése folyamatban van.)

A SUNRED hiszterézis kezelésére szolgáló algoritmus azonban képes megoldani ezt a problémát, hiszen a hiszterézises szakasz átugrásának esetén csökkenti a szimulációs lépésközt (lásd. 2.3. fejezet), megvalósítva ezzel a dinamikus lépésköz beállítást. Ebből adódóan dolgozatban szereplő összes többi szimulációt a hiszterézises törtvonalas közelítésű modellel végeztem. Csak tranziens analízist használhattam, hiszen a szimulátornak szüksége van az előző időpontban végzett szimuláció eredményire (lásd. 2.3. fejezet), a vanádium-dioxid ellenállás gerjesztése pedig csak áramgenerátoros meghajtással történhet, mert a feszültséggel történő meghajtás a fázisátalakulás után irreálisan nagy áramokat eredményezne, valamint a struktúrát körülvevő levegő áramlását elhanyagoltam

5. Laterális elrendezésű VO₂ ellenállás szimulációja

5.1 A modellekben használt anyagok paraméterei és a szimuláció általános beállításai

A következőkben bemutatott vanádium-dioxid ellenállás struktúra modell mindegyike szilícium hordozón kialakított struktúra. Szigetelőanyagként szilícium-dioxidot használtam, a vezető kontaktusokat platinából alakítottam ki, valamint a struktúrákat oldalról és felülről levegővel burkoltam. A felhasznált anyagok paramétereit az alábbi táblázatban foglaltam össze:

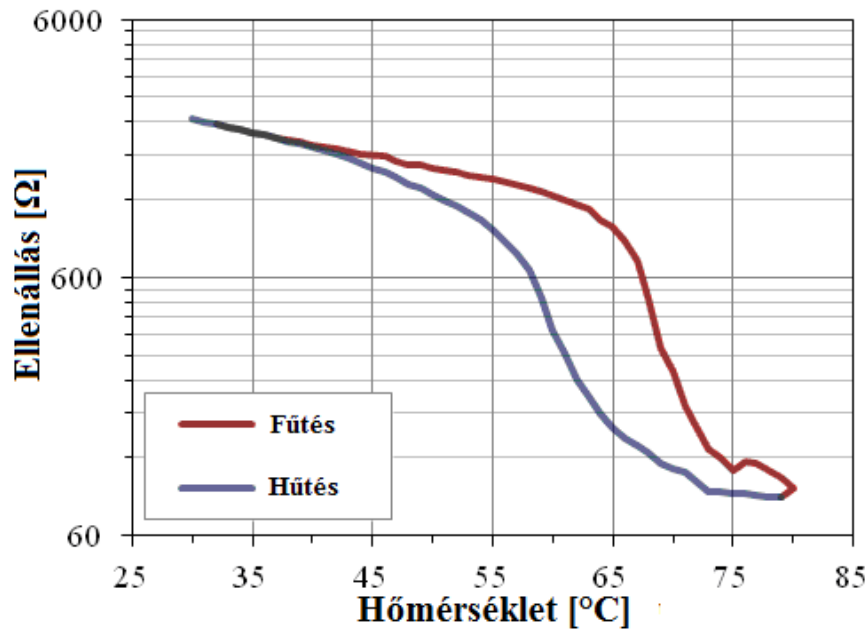
	Hővezetés [W/mK]	Hőkapacitás [J/m ³ K]	Fajlagos elektromos vezetőképesség [S/m]
Szilícium	156,3	$1,6 * 10^6$	$4,35 * 10^{-4}$
Szilícium-dioxid	1,342	$1,6 * 10^6$	10^{-16}
Platina	79,91	$2,8 * 10^6$	$9,26 * 10^6$
Levegő	0,026	1170	10^{-7}

A VO₂ ellenállás-hőmérséklet karakterisztikája a modellben négy szakaszból áll:

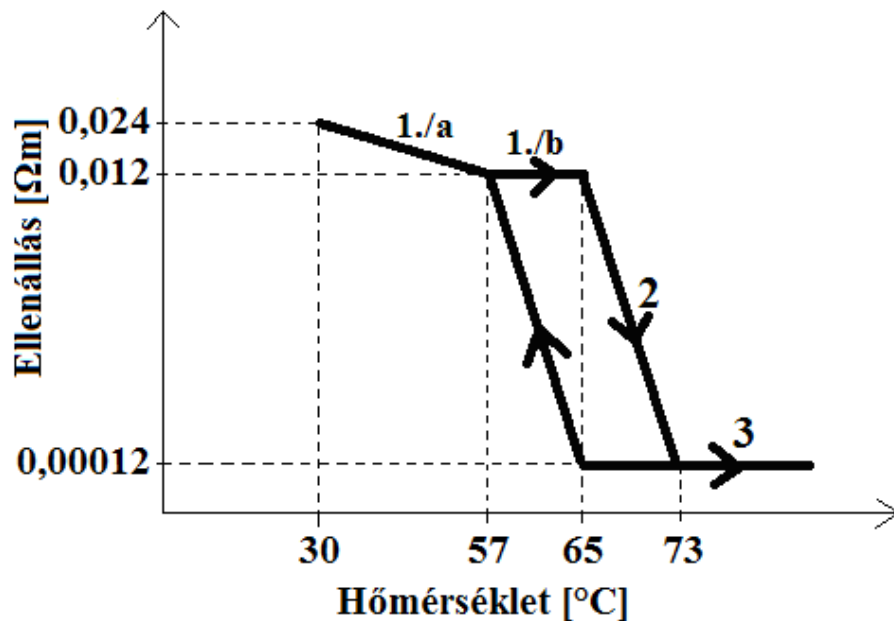
- 1./a Félvezető állapot: 30°C - 57 °C. Ezen a szakaszon az anyag hőkapacitása állandó: $1,82 * 10^6$ J/m³K. A fajlagos vezetőképessége: 30°C-on 41,66 S/m, 57°C-on 83,33 S/m, közöttük lineárisan változik (5.1.2. ábra 1./a).
- 1./b Hiszterézises tartomány vízszintes szakasza: 57°C – 65°C. Ezen a részen a vezetőképesség és a hőkapacitás is állandó. $C_{th}=1,82 * 10^6$ J/m³K, $\sigma=83,33$ S/m (5.1.2. ábra 1./b).
2. Hiszterézises tartomány: 65°C – 73°C. Ebben a tartományban VO₂ hőkapacitása lineárisan változik: 65°C-on $1,82 * 10^6$ J/m³K, 73°C-on $3,54 * 10^6$ J/m³K valamint ehhez hozzáadódik a fázisváltáshoz szükséges energia. A fajlagos vezetőképesség 65°C-on 83,33 S/m, 73°C-on 8333,33 S/m, közöttük a feltöltöttségtől függően változik (5.1.2. ábra 2.).
3. Vezető állapot: 73°C-tól. Ezen a szakaszon mind a hőkapacitás mind a fajlagos vezetőképesség állandó: $C_{th}=3,54 * 10^6$ J/m³K, $\sigma=8333,33$ S/m (5.1.2. ábra 3.).

Az anyag hővezetése mind a négy szakaszon állandó: 3,5 W/mK.

A modellparaméterek beállítása eltér az előző fejezetben használtaktól. Ennek célja az volt, hogy a SUNRED modellben használt ellenállás-hőmérséklet függvény a lehető legjobban illeszkedjen a laboratóriumban, egy adott ellenállás struktúrán mért karakterisztikára (mely eltér a 4. fejezetben használttól), a pontosabb összehasonlíthatóság érdekében. A méretek és a mérési eredmények alapján kiszámíthatóak a fajlagos ellenállás értékek, melyek alapján beállíthatók a modellparaméterek.



5.1.1. ábra: A laboratóriumban mért R-T karakterisztika [16]

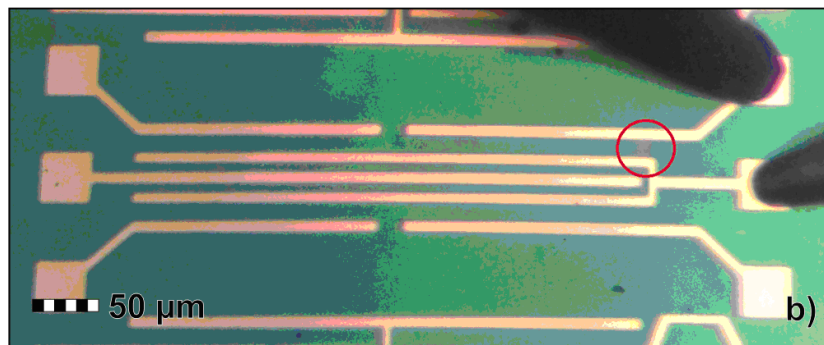


5.2.1. ábra: A SUNRED modellben használt ρ -T karakterisztika (nem méretarányos)

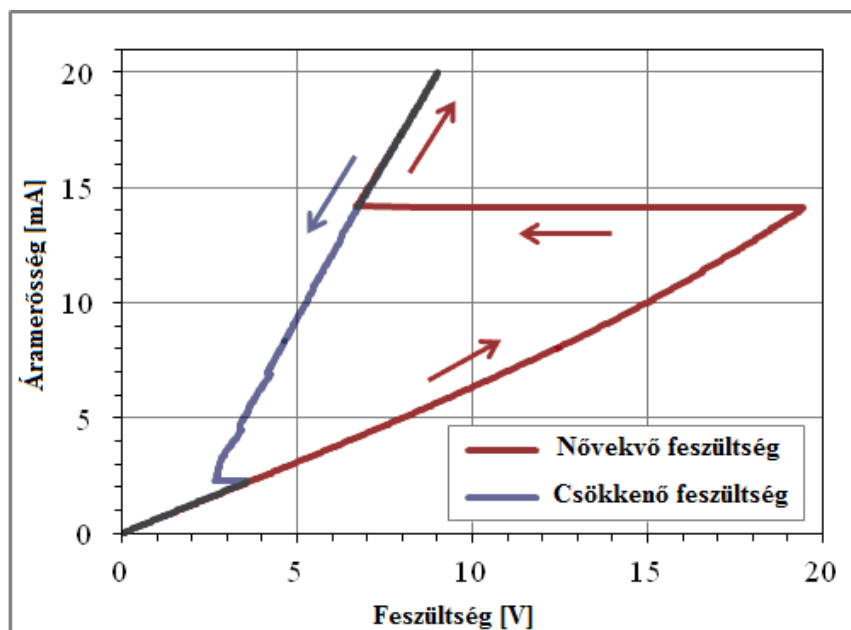
5.2 A laboratóriumban mért áram-feszültség karakterisztika

A méréseket egy $20\ \mu\text{m} \times 200\ \mu\text{m}$ területű $500\ \text{nm}$ vastag ellenálláson végezték, ami egy $300\ \mu\text{m}$ vastag szilícium szubsztráton helyezkedett el. Vizsgálták a különböző meghajtó-áramoknál állandósult állapotban kialakuló feszültségeket, melyek alapján áram-feszültség karakterisztikát állítottak fel. Az ellenállást egy fűtőlapra helyezték, ami 50°C -os hőmérsékletre melegítette fel a rendszert, ezután kapcsolták rá a gerjesztést. [16]

A mérési elrendezésről készült fénykép az 5.2.1. ábrán látható, a mért I-U karakterisztikát az 5.2.2. ábra mutatja.



5.2.1. ábra: A mért struktúra. (zöld a VO_2 , szürke a platina) [16]



5.2.1. ábra: A mért áram-feszültség karakterisztika [16]

Az áram-feszültség karakterisztika a következőképpen értelmezhető:

A karakterisztika első szakaszán az egyre növekvő áram hatására a feszültség is folyamatosan növekszik. A feszültség megváltozásának mértékét a VO_2 ellenállás-hőmérséklet karakterisztika első szakaszának meredeksége és a termikus ellenállás határozza meg, mivel a kialakuló feszültség egyenesen arányos az áramerősséggel és az ellenállással (Ohm törvénye alapján), aminek a megváltozása viszont az áramerősség négyzetétől, az R-T karakterisztika meredekségétől és a termikus ellenállástól függ.

$$\begin{aligned}P &= I^2 R(T) \\ \Delta T &= R_{\text{th}} P \\ \Delta R &= \Delta T m \\ \Delta R &= I^2 R(T) R_{\text{th}} m\end{aligned}$$

Az egyenletekben R_{th} a termikus ellenállás „m” pedig az R-T karakterisztika meredeksége, ami jelen esetben negatív. A VO_2 termikus ellenállása állandó, az R-T függvény meredeksége viszont mind a négy szakaszon más. Az első részen a meredekség olyan kicsi, hogy egy adott áramnöveléshez tartozó ellenállás-csökkenés arányában kisebb, mint az azt kiváltó áramváltozás, így a feszültség az áram növelésével egyre nagyobb lesz.

$$\begin{aligned}\Delta R_1 &= (I_1)^2 R(T) R_{\text{th}} m \\ \Delta R_2 &= (I_2)^2 R(T) R_{\text{th}} m\end{aligned}$$

Ha:

$$\Delta R_2 / \Delta R_1 < I_2 / I_1$$

Akkor:

$$\Delta U = \Delta I * \Delta(\Delta R) > 0$$

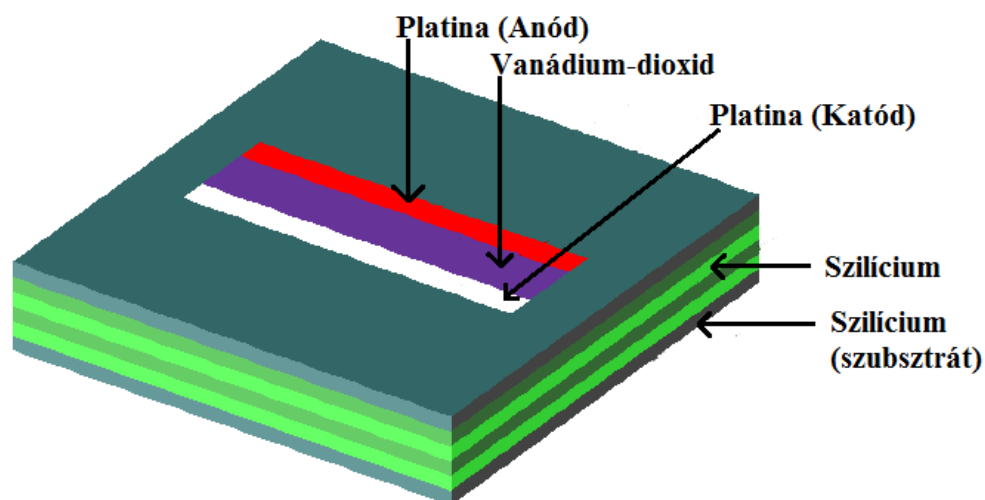
14 mA-nél kisebb gerjesztések esetén a hőmérséklet még nem éri el a fázisátalakuláshoz szükséges értéket. Ezen érték felett létrejön a fázisátalakulás a vanádium-dioxidban, az ellenállás lecsökken, ezért a feszültség is „leesik”. Ezt hívjuk bekapcsolási jelenségnek. Ekkor azonban nem az egész ellenállásréteg alakul át fémes állapotba. Amint a réteg egy pontja eléri a megfelelő hőmérsékletet, a meredek ellenállás-csökkenés miatt az áram meghatározó része arra az adott részre koncentrálódik, tovább melegítve azt, viszont a réteg többi részén lecsökken az áramsűrűség, így úgynevezett vezetési sávok, csatornák alakulnak ki a VO_2 -ben (5.2.1. ábrán a piros körrel jelölt rész). Ennél nagyobb gerjesztések esetén az ellenállás nem változik, ezért nagyobb meghajtással nagyobb feszültség alakul ki. (Az állítás nem teljesen igaz, a csatorna szélesedhet, mely mérsékli a feszültség növekedését. Ennek mértéke a struktúra termikus paramétereitől függ.)

Ha a gerjesztést csökkenteni kezdjük a feszültség is csökken, viszont az anyag félvezető állapotba történő visszaalakulása alacsonyabb meghajtásnál következik be. Ennek oka, hogy a vezető csatorna kisebb méretű, mint az egész ellenállás, ezért a fémes szerkezethez szükséges hőmérsékletet kisebb teljesítménnyel (disszipációval) is fenn lehet tartani benne, mint ami ahhoz kellett, hogy az egész réteget felfűtsük a fázisátalakuláshoz szükséges hőmérsékletre.

A karakterisztika triac jellegű a különbség csak annyi, hogy a bekapcsolást hővel szabályozzuk feszültség helyett.

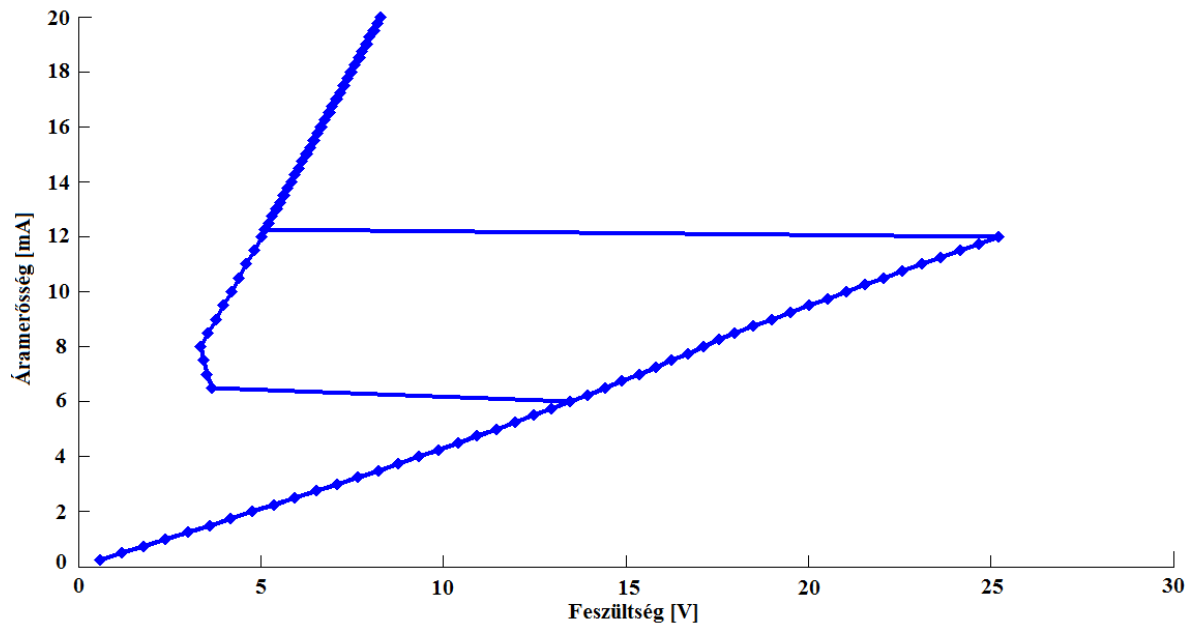
5.3 A szimulált áram-feszültség karakterisztika

A struktúramodell (5.3.1. ábra) készítésekor arra törekedtem, hogy az a lehető legjobban hasonlítson a laboratóriumban mér ellenállás struktúrához (melynek leírása a [16] hivatkozásban található). A vanádium-dioxid réteg 500 nm vastag és $20\ \mu\text{m} \times 200\ \mu\text{m}$ felületű, a platina elektródák $10\ \mu\text{m} \times 200\ \mu\text{m}$ -esek és szintén 500 nm vastagok, a szilícium rétegek pedig összesen $300\ \mu\text{m}$ -t tesznek ki vertikálisan, laterálisan pedig $700\ \mu\text{m} \times 1200\ \mu\text{m}$ felületűek. Az ellenállás nem pont a réteg közepén helyezkedik el. A bal oldalán lévő szilícium réteg $250\ \mu\text{m}$ széles, míg a túloldali $750\ \mu\text{m}$. Ezzel az elrendezéssel a laborban mért struktúra lehető legpontosabb reprodukálására törekedtem. A modellt levegő burkolja felülről és oldalról is. Ez a beállítás és a levegő kis hővezetési tényezője tette lehetővé izotermikus peremfeltétel alkalmazását, mely alul és oldat 50°C , míg felül 25°C , reprezentálva ezzel a mérés során használt fűtőlapot. A modell felbontása $32 \times 32 \times 8$ pixel, melyek által reprezentált méret külön-külön állítható. Az ellenállás 24×4 pixel.



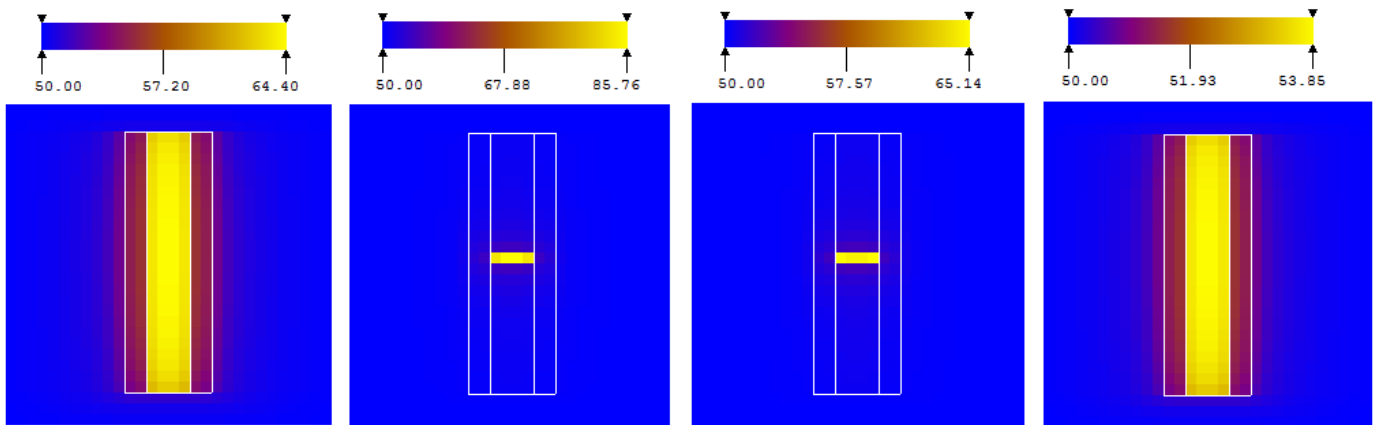
5.3.1. ábra: Az ellenállás struktúra modellje (nem méretarányos)

A szimulált áram-feszültség karakterisztika az 5.3.2. ábrán látható. Az áramerősséget 10 milliszekundumonként 0,25 mA-rel növeltem. Ennyi idő alatt minden meghajtó áramnál kialakult az állandósult állapot, a feszültség stabil értéket vett fel.



5.3.2. ábra: A szimulált áram-feszültség karakterisztika

Megfigyelhetjük, hogy a mért (5.2.1. ábra) és a szimulált karakterisztika jellege megegyezik. A letörési feszültségek (az eszköz bekapcsolás előtti feszültsége) és az ehhez tartozó meghajtó-áramok közötti eltérést okozhatják a nem teljesen egyező geometriai méretek, a VO_2 ellenállásmodelljének valóstól való eltérése, vagy a struktúra és a környezet közötti termikus csatolás pontatlan modellezése (pl levegő áramlásának elhanyagolása, izotermikus peremfeltétel stb.). A bekapcsolás után kialakuló vezető csatorna a szimulációs eredményekben is megjelenik (5.3.3. ábra). Látható hogy az ellenállás félvezetővé történő visszaalakulása nagyobb gerjesztésnél történik meg, mint a mérés esetén. Ez azzal magyarázható, hogy a modell geometriai felbontása nem volt elég részletes. A valóságban a gerjesztés csökkentésekor a fémes állapotú csatorna mérete egyre kisebb lesz, vékonyodik. A modellben a kialakult csatorna egy pixel szélességű volt (5.3.3. ábra), ezért ezt az elvékonyodást a modell nem reprezentálja, a feszültség csupán a hőmérséklet csökkenése miatt lesz egyre kisebb. Ha ez a „pixelsor” eléri az 65°C -os hőmérsékletet, akkor a csatorna elkezd megszűnni, és az ellenállásréteg újra félvezető állapotba kerül. A valóságban a csatorna vékonyabb lett, mint a modell egy pixelének szélessége, ezért a kikapcsolás kisebb áramerősség esetén következett be. A modell felbontásának növelésétől, reprezentatívabb eredményeket várunk.



5.3.3. ábra: Az áram-feszültség karakterisztika „töréspontjaiban” kialakuló hőmérséklet-eloszlások (nem méretarányos)

1. A bekapcsolás előtt 2. A bekapcsolás után 3. A kikapcsolás előtt 4. A kikapcsolás után

5.4 A termikus ellenállások összehasonlítása

A mérési és szimulációs eredményekből kiszámolható az ellenállás és a környezet közötti termikus ellenállás, melyek összehasonlítása és becslése alapján megítélhető a mérés illetve a szimuláció relevanciája. A kikapcsolt és a bekapcsolt eszközben az VO₂ réteg és a környezet között lévő termikus ellenállás jelentősen eltér, hiszen mindkét állapotban az ellenállás vonalszerűnek tekinthető, a méretei viszont eltérnek. Ebben a fejezetben összevetem a becsült, a mérésekből számolt és a szimulációs eredményekből számolt termikus ellenállásokat.

A becsült termikus ellenállások az eszköz méreteiből és a szilícium fajlagos termikus ellenállásából számíthatók az alábbi összefüggés alapján:

$$R_{th} = \int dR_{th} = \int \rho_{th} \frac{dl}{A}$$

Mivel kikapcsolt állapotban az ellenállásréteg, mint hőforrás vonalszerűnek tekinthető, a hőterjedés hengerszimmetrikus:

$$R_{th} = \int dR_{th} = \rho_{th} \int \frac{dr}{\pi l} = \frac{\rho_{th}}{\pi l} \ln(r)$$

Az ellenállásréteg 200 μm x 20 μm-es, tehát l = 200 μm, r = 10 μm. A szilícium fajlagos termikus ellenállás: ρ_{th} = 6,4 · 10⁻³ mK/W. Az integrálási határok 10 μm és 300 μm, mivel 300 μm a szilícium szubsztrát vastagsága. Ezek alapján:

$$R_{th} = \frac{0,0064}{\pi \cdot 0,0002} [\ln(0,0003) - \ln(0,00001)] = 34,64 \frac{K}{W}$$

Bekapcsolt állapotban az ellenállás szintén vonalszerűnek tekinthető, a vezető csatorna kialakulása után azonban a méreتي változnak: A csatorna 20 μm hosszú és 1 μm széles (ez felel meg egy pixel méretének a modellben) tehát $l = 20 \mu\text{m}$, $r = 500 \text{ nm}$, így:

$$R_{th} = \frac{0,0064}{\pi \cdot 0,00002} [\ln(0,0003) - \ln(0,0000005)] = 651,59 \frac{K}{W}$$

A termikus ellenállás kiszámítására vonatkozó másik összefüggés:

$$R_{th} = \frac{\Delta T}{P}$$

A mérési eredményekből számított értékek:

A kikapcsolt állapot végén $R_{th} = 65 \text{ K/W}$. A bekapcsolt állapot végén $R_{th} = 1818 \text{ K/W}$. [16]

A kikapcsolt állapotbeli termikus ellenállásértékek különbsége a hengerrel való közelítéssel valamint a nem teljesen egyező méretekkel magyarázható. A bekapcsolt állapotbeli eredmények közötti különbség abból adódhat, hogy valószínűleg a valóságban a réteg jobban elvékonyodik a határhelyzetben, mint 1 μm, ám ezt nem volt lehetőség megmérni. Összességében látható hogy a becsült és a mért eredmények egy nagyságrendbe esnek, tehát a mérési eredmény releváns.

A szimulációs eredményekben a kikapcsolt állapot végén az eszköz hőmérséklete: $T = 64,4^\circ\text{C}$. Az ehhez tartozó gerjesztés: $I = 12 \text{ mA}$, a szimulátor által számított feszültség: $U = 25,2 \text{ V}$. (A környezeti hőmérséklet 50°C .) Ezek alapján:

$$R_{th} = \frac{14,4}{0,012 \cdot 25,2} = 47,62 \frac{K}{W}$$

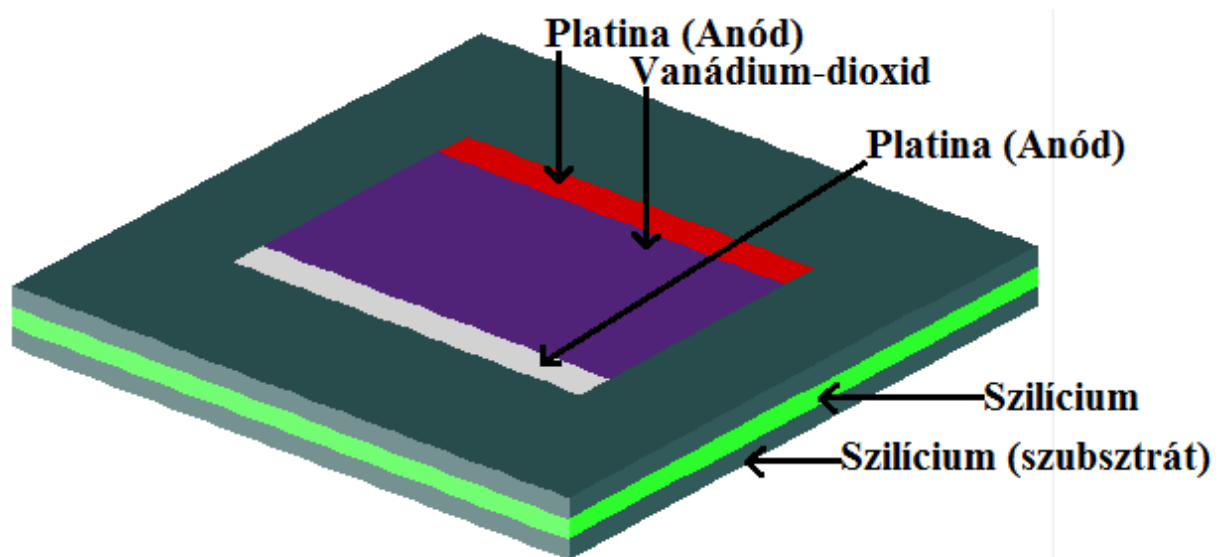
A bekapcsolt állapot végén az eszköz hőmérséklete: $T = 65,1^\circ\text{C}$. Az gerjesztés: $I = 6,5 \text{ mA}$, a feszültség: $U = 1,84 \text{ V}$. Ezek alapján:

$$R_{th} = \frac{15,1}{0,0065 \cdot 1,84} = 1262,54 \frac{K}{W}$$

A szimulációból számolt eredmények közelebb állnak a mérésből számoltakhoz, az eltérés az okozhatja, hogy a bekapcsolás és a kikapcsolás is különböző gerjesztéseknél történt. A számolás alapján a szimulációs eredményeket is relevánsnak tekinthetjük.

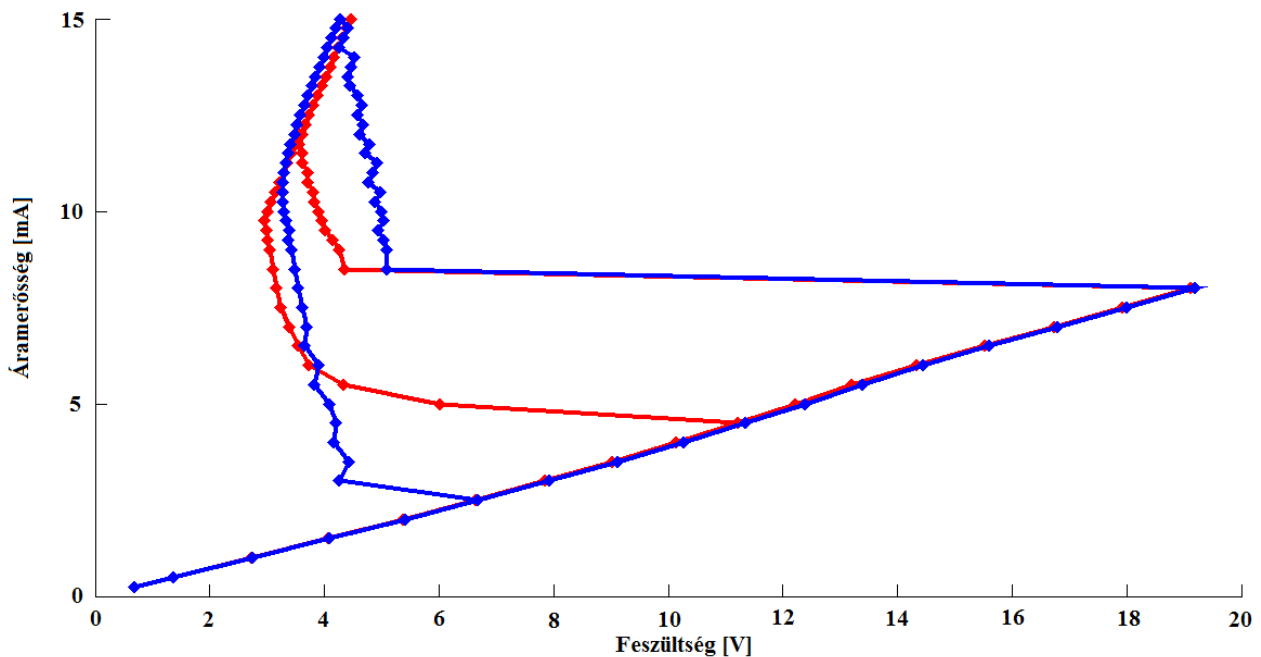
5.5 Különböző részletességű ellenállás struktúrákon végzett szimulációk

A mérési és szimulációs eredmények közötti eltérést okozhatja az, hogy a struktúra modell nem elég részletes. Ennek vizsgálata érdekében létrehoztam egy 32 x 32 x 4 felbontású nem részletes, valamint egy 256 x 256 x 4 felbontású részletes modellt, melyek felépítése hasonlít az 5.3.1. ábrán látható struktúráéra, néhány különbséggel. Vertikálisan csupán négy réteg alkotja a modellt, a szubsztrát vastagsága 500 μm , az ellenállásréteg a struktúra közepén helyezkedik el és 20 x 12 pixel felbontású a nem részletes és 224 x 96 pixel felbontású a részletes modell esetében. A többi méret megegyezik az 5.3. fejezetben leírtakkal.



5.5.1. ábra: A négyrétegű struktúra modellje (nem méretarányos)

A modelleken tranziens szimulációt futtattam, melynek paraméterei, és a határfeltételek szintén megegyeznek az 5.3. fejezetben leírtakkal. A végzett szimulációk eredményeit megvizsgálva következtethetünk arra, hogy a felbontás mennyiben befolyásolja a kapott eredményeket. Mivel az ellenállás méretei is megegyeznek az 5.3. fejezetben bemutatott modellben használtakkal, ezért hasonló eredményeket várunk. A kapott eredmények azonban eltérést mutatnak mind egymástól (vagyis a részletes modell eredményei eltérnek a nem részletesétől), mind az előző struktúrájánál kapottaktól. Az áram feszültség karakterisztikák az 5.5.2. ábrán láthatóak.



5.5.2. ábra: A szimulált áram-feszültség karakterisztikák. Kék: Részletes, Piros: Nem részletes

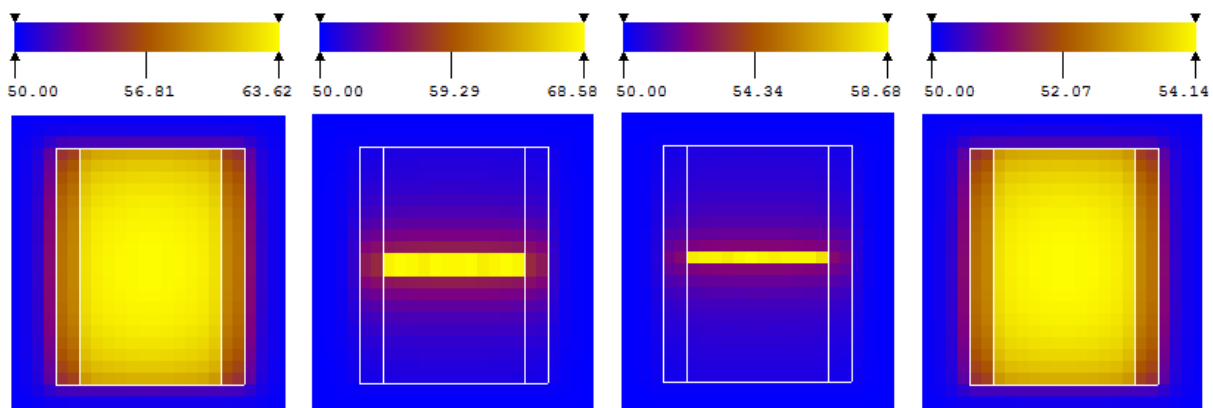
A karakterisztikák különbözőségét a kialakult vezető csatorna felbontásának eltérése okozza. A nem részletes modell esetén bekapcsoláskor egy két pixel szélességű csatorna alakult ki, melynek hőmérséklete a VO_2 R-T karakterisztikájának meredek szakaszára állt be, ezért a feszültség a „bekapcsolás” után is tovább csökken mindaddig, amíg az anyag fémes állapotba kerül (az ábrán: 8 mA – 12 mA). Amint kialakult a fémes csatorna a feszültség emelkedni kezd, a csatorna szélessége ekkor nem változik (12 mA-tól). Csökkenő gerjesztés esetén a feszültség akkor kezd el növekedni, amikor a csatorna hőmérséklete ismét elérte az R-T karakterisztika meredek szakaszát (10 mA-nél), majd szűkülni kezd (6 mA-nél), míg végül teljesen megszűnik (5 mA-nél). A részletes modell esetén a csatorna bekapcsolás után rögtön fémes állapotba kerül és folyamatosan szélesedik, ezért a feszültség is csökken (8 mA – 15 mA). Ha a meghajtó áramot csökkentjük, a csatorna szélessége egy darabig változatlan (10 mA-ig), (a feszültség tovább csökken), ezután egyre szűkebb lesz, (a feszültség növekszik) és 3 mA-nél teljesen megszűnik. A hőmérséklet-eloszlás képeket az 5.5.3. és az 5.3.4. ábra mutatja.

Látható, hogy a modell diszkrét felbontása nem elhanyagolható mértékű hibát okoz az eredményekben. A VO_2 R-T függvénye a fázisátalakuláskor olyan meredek, hogy az egyes pixelek „átalakulása” jelentősen megváltoztatja a feszültségviszonyokat. A nem részletes modell I-U karakterisztikájának jellege a gerjesztés növelése esetén jobban hasonlít a mérési eredményekhez, azonban a csatorna szélesedése, azaz az egyes pixelek fémes állapotba ugrása töréseket okoz, melyet csak a felbontás növelésével lehet kiküszöbölni. A részletes modell az

eszköz fémesből félvezetőbe történő visszaalakulását jobban modellezi (a csatorna jobban el tud „vékonyodni”), fémes állapotban azonban a gerjesztés növelése esetén csökken a feszültsége a csatorna folyamatos szélesedése miatt, ami nem egyezik meg a mérési eredményekkel. Az eltérés oka valószínűleg az, hogy a mérés során több hő távozott a rendszerből a környezet felé, mint a modellben, (pl. légáramlás elhanyagolása miatt) ezért ott a csatorna nem szélesedett. Ez az oka annak is, hogy az előző modell (ahol csak egy pixeles csatorna alakult ki és az nem szélesedett tovább) eredményei jobban illeszkednek a mérési eredményekre. A pontosításhoz szükség lenne az eszköz és a környezet közötti hőcsatolás pontos ismeretére, melyhez véleményem szerint egy zárt rendszer laborban történő vizsgálata lenne szükséges, ahol ezek a paraméterek jobban kézben tarthatóak. A diszkrét felbontás még ilyen (256 x 256 x 4) részletességű modell esetében is töréseket okoz a szimulált karakterisztikában.

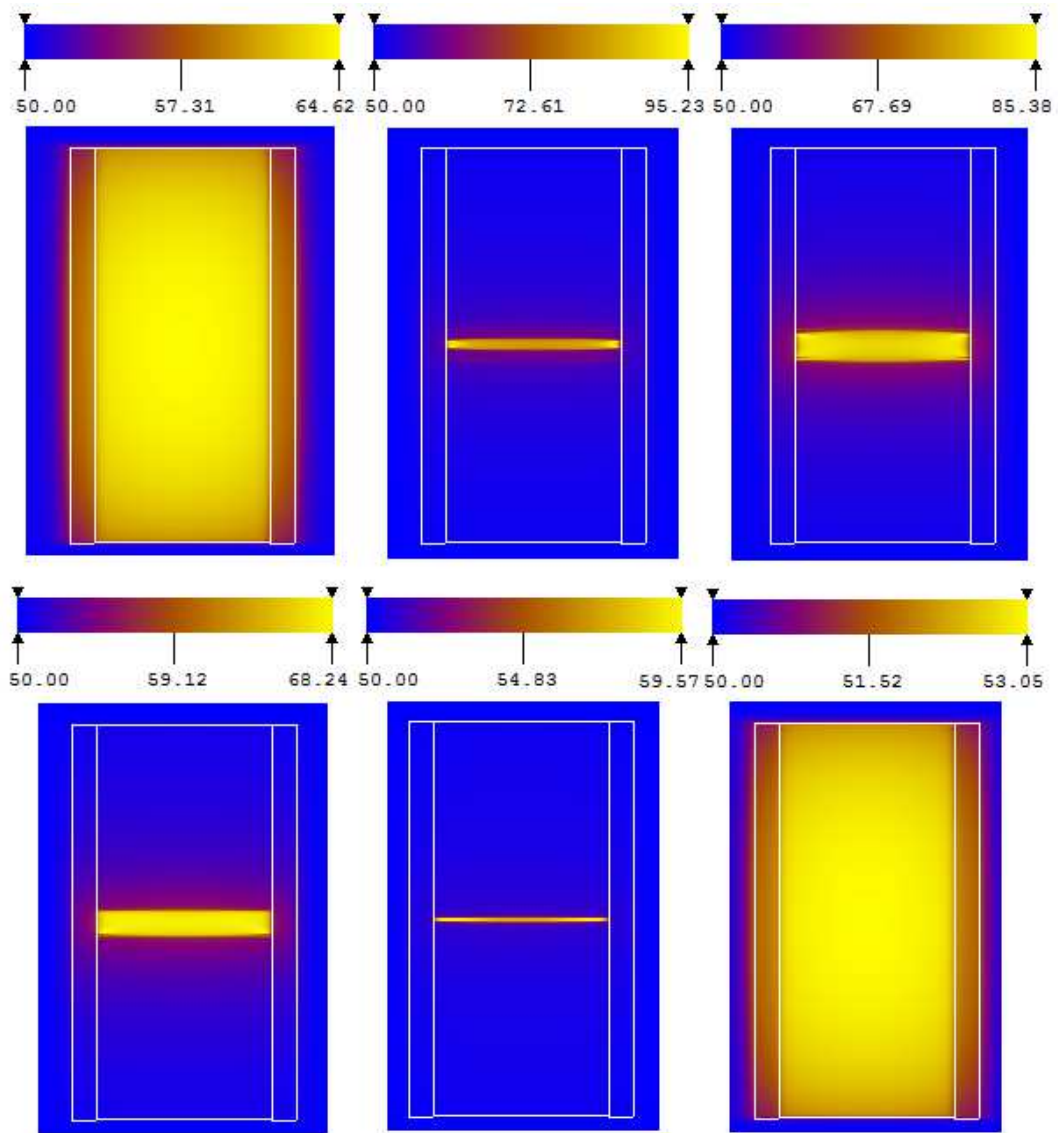
A szimulációs eredmények az előző fejezetben vizsgált struktúra eredményeitől is kis mértékben eltérnek, a görbék az első (bekapcsolás előtti) szakaszon fedik egymást, azonban a bekapcsolás kisebb gerjesztésnél következik be, melyből látható, hogy a modell csekély mértékű változtatása is számottevő eltérést okozhat az eredményekben.

Úgy gondolom, a fenti problémák kiküszöbölésére csak egy nagyon részletes modell felállításával van lehetőség, melynek felbontása akkora, hogy a szimulált karakterisztikában már nem keletkeznek törések, a szimulációs paramétereket pedig egy olyan mérés alapján állítjuk be, ahol az ismeretlen faktorok száma minimális. Egy ilyen modellen végzett tranzienst szimuláció azonban egy hétköznapi személyi számítógépen már elfogadhatatlanul sok időt venne igénybe (esetemben a részletes modell szimulációja 15 óráig tartott), ezért szuperszámítógépet kellene alkalmazni.



5.5.3. ábra: A nem részletes modell hőmérséklet-eloszlás képei (nem méretarányos)

- 1. A bekapcsolás előtt 2. A bekapcsolás után 3. A kikapcsolás előtt 4. A kikapcsolás után**

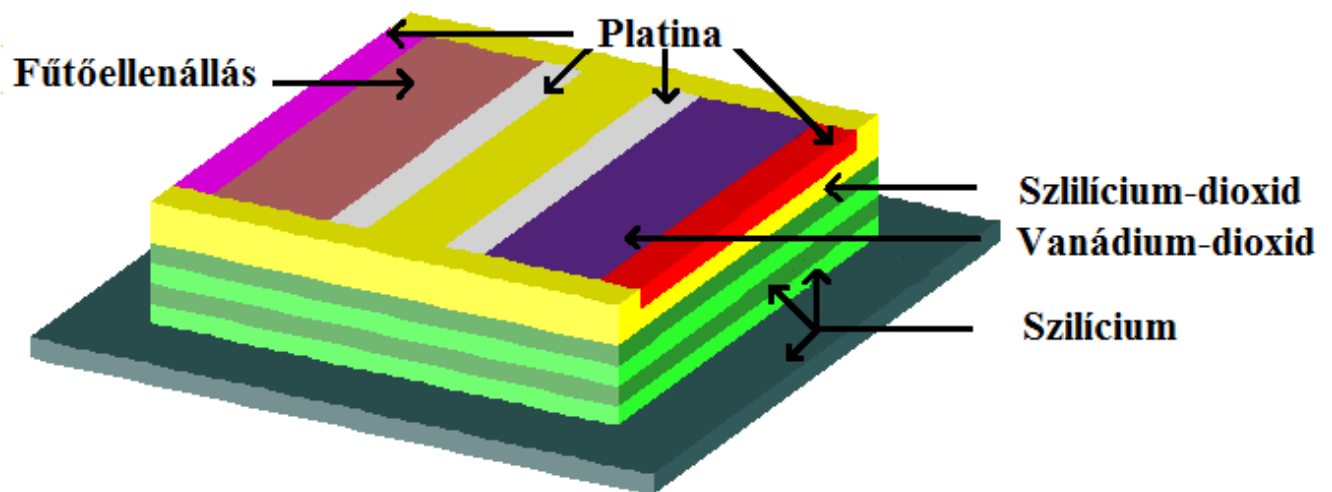


5.5.4. ábra: A részletes modell hőmérséklet-eloszlás képei (nem méretarányos)

1. A bekapcsolás előtt
2. A bekapcsolás után
3. Maximális gerjesztésnél
4. A csatorna szűkülésének kezdetén
5. A kikapcsolás előtt
6. A kikapcsolás után

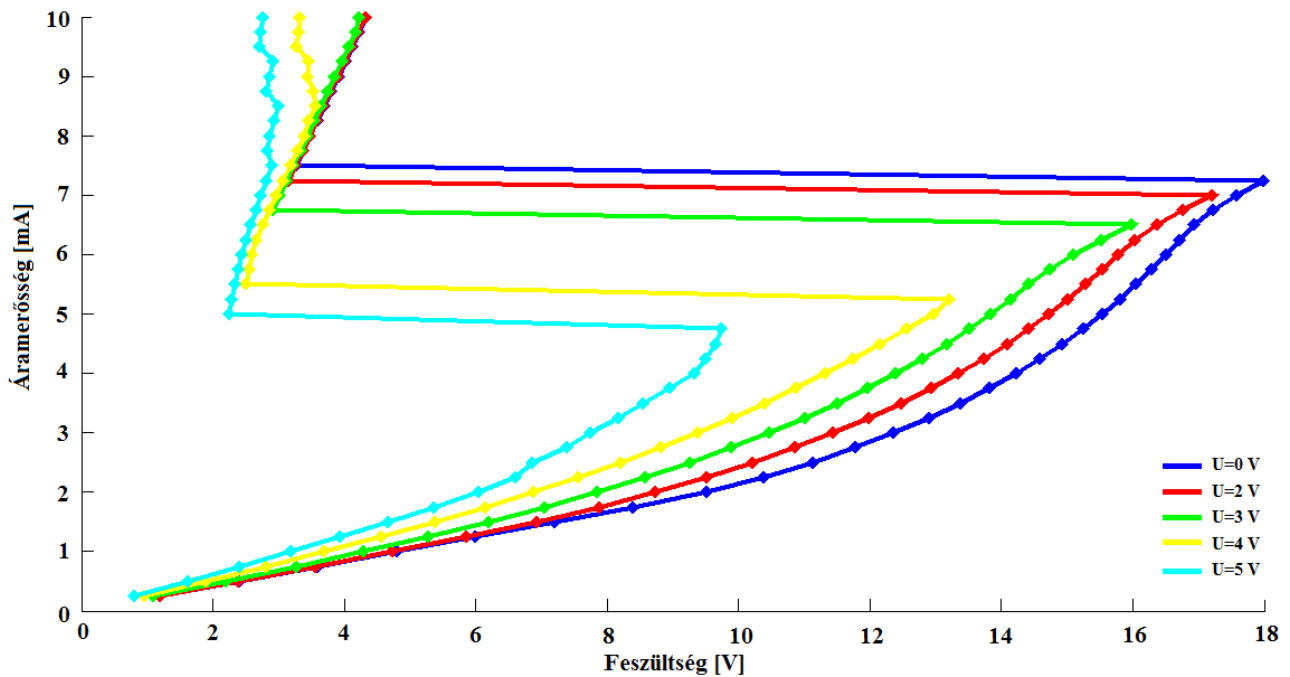
6. Fonzisztor modellek összehasonlítása

A fonzisztor a termikus-elektromos áramkörök alapegysége, mely egy hagyományos és egy fázisátalakulásra képes ellenállásból áll (1.3. fejezet). Az általam készített fonzisztor struktúra modell a 6.1. ábra mutatja.



6.1. ábra: A fonzisztor struktúra modellje (nem méretarányos) [18]

Az első modellben mindkét ellenállás $20\ \mu\text{m} \times 200\ \mu\text{m} \times 500\ \text{nm}$ méretű, köztük egy $200\ \text{nm}$ széles szilícium-dioxid réteg található, a szilícium szubsztrát $500\ \mu\text{m}$ vastag, a struktúrát felülről és oldalról is $500\ \mu\text{m}$ vastag levegőréteg borítja. Az elektródák $10\ \mu\text{m} \times 200\ \mu\text{m} \times 500\ \text{nm}$ méretűek. A VO_2 R-T karakterisztikája az 5.2.1. ábrának megfelelő, a fűtőellenállás fajlagos vezetőképessége a VO_2 fémes állapotú vezetőképességével egyezik meg. A modell felbontása $32 \times 32 \times 8$ pixel. Az ellenállásokat elválasztó SiO_2 réteg szélességével állítható a termikus csatolás a két ellenállás között. A modellen tranziens analíziseket futtattam, melyekben a VO_2 ellenállásra kapcsolt meghajtó áramot minden 10 milliszekundum elteltével $0,25\ \text{mA}$ -rel növeltem $10\ \text{mA}$ -ig, a fűtőellenállásra kapcsolt feszültséget pedig minden szimulációban egyre növeltem. A szimuláció a vártnak megfelelő eredményeket hozott. Minél nagyobb a fűtőfeszültség annál kisebb gerjesztésre van szükség a vanádium-dioxid ellenálláson ahhoz, hogy az eszköz bekapcsoljon, így az eszköz valóban a tirisztorhoz hasonlít, de itt a vezérlés a termikus csatolásoktól függ. Az eredmények a 6.2. ábrán láthatóak, ahol a görbék a fűtőellenállásra kapcsolt feszültséggel vannak paraméterezve.

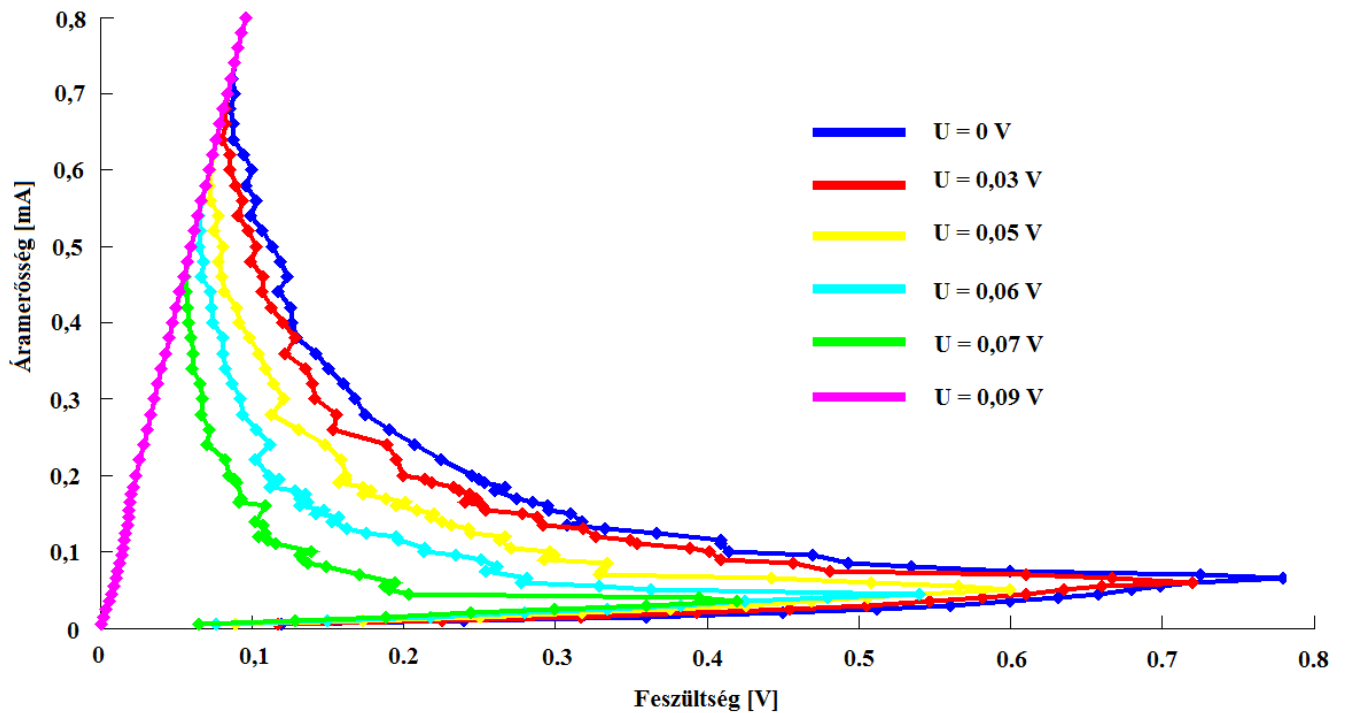


6.2. ábra: A fonzisztor áram-feszültség karakterisztikája a fűtőfeszültséggel paraméterezve

A karakterisztika alapján megállapíthatjuk, hogy az eszköz tényleg vezérelhető a fűtőfeszültséggel. Az eredményeket az 5.3. fejezetben tárgyalt ellenállásmodell eredményeivel összehasonlítva azok jellegre megegyeznek, a szilícium-dioxid jelenléte miatt azonban itt kevesebb hő távozik a környezet felé a SiO_2 kis hővezetésének köszönhetően (5.1. fejezet), ezért a bekapcsolás 0 V vezérlőfeszültség esetén is hamarabb történik meg, mint a sima ellenállásnál. A 4 és 5 V-hoz tartozó görbéknél a kialakult csatorna már több pixel szélességű, ezért mutat töréseket a bekapcsolás utáni szakaszban is.

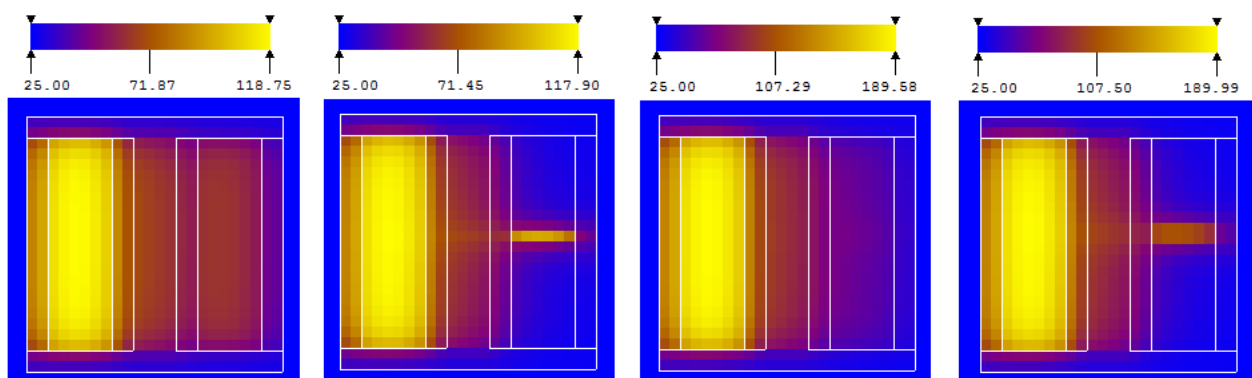
Az elméleti részben már említettem, hogy ezek az eszközök csak nanométeres tartományban vehetik fel a versenyt a CMOS eszközökkel. Ezért készítettem egy olyan modellt, melynek felépítése teljesen megegyezik az előzővel, csak az ellenállások mérete $200 \text{ nm} \times 2 \text{ } \mu\text{m} \times 100 \text{ nm}$. A tranziens szimulációban a meghajtó áramot 10 milliszekundumonként $10 \text{ } \mu\text{A}$ -rel növeltem $200 \text{ } \mu\text{A}$ -ig, utána $20 \text{ } \mu\text{A}$ -rel $800 \text{ } \mu\text{A}$ -ig.

Az eredmények a 6.3 ábrán láthatóak. Észrevehetjük, hogy az eszköz bekapcsolásakor nincs olyan meredek feszültségesés, mint az előző esetben. Ennek oka, hogy a VO_2 ellenállás olyan kicsi, hogy nem tud kialakulni benne vezető csatorna, hiszen ha a réteg egyik része jobban felmelegedne, akkor a keletkezett hő szinte azonnal szétterjed, és a hőmérséklet kiegyenlítődik az egész rétegben. Ebből kifolyólag az ellenállás egyenletesen melegszik még az R-T karakterisztika meredek szakaszára eső hőmérséklet-tartományon is. (Ez látszik a 6.5. ábrán is: Az egész réteg azonos hőmérsékleten van, a képek között különbség csak hőmérséklet skáláján található.)



6.3. ábra: A nanoméretű fonzisztor áram-feszültség karakterisztikája a fűtőfeszültséggel paraméterezve

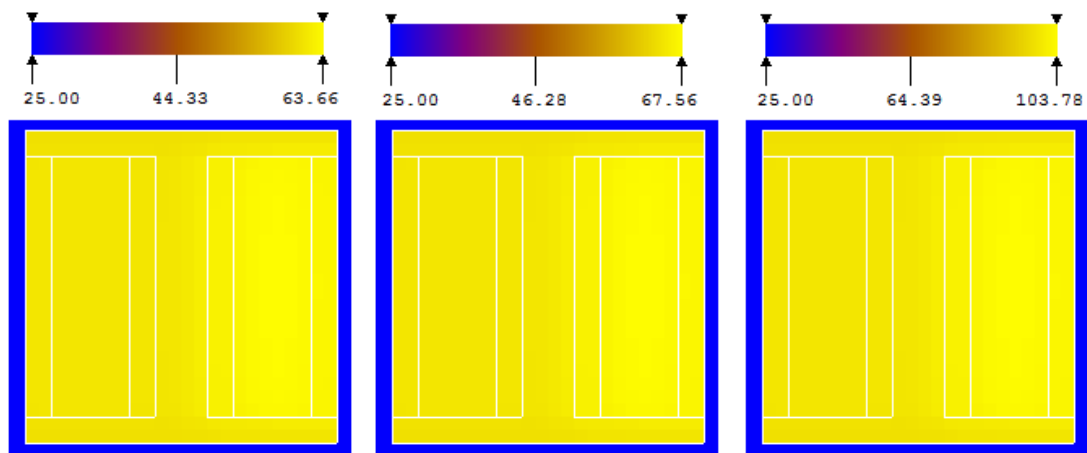
A görbék töréseit itt is a diszkrét felbontásnak tudhatjuk be. A rózsaszín görbe esetén a fűtőfeszültség már akkora, hogy az VO_2 ellenállás meghajtás nélkül is már felmelegedett annyira, hogy fémes állapotba kerüljön, ezért ebben az esetben az eszköz egy hagyományos ellenállásként viselkedik. Ebbe a görbébe csatlakozik bele az összes többi is egy bizonyos gerjesztés felett, akkor, amikor a teljes réteg átalakult. Meg kell jegyezni azonban, hogy ezek az eredmények csupán becslésnek tekinthetők a méretek nanométeres tartománya miatt (3. fejezet).



6.4. ábra: A $20 \mu\text{m} \times 200 \mu\text{m} \times 500 \text{nm}$ -es fonzisztor hőmérséklet-eloszlás képei (nem méretarányos)

1. és 2. Bekapcsolás előtt és után ($U = 3 \text{ V}$)

3. és 4. Bekapcsolás előtt és után ($U = 4 \text{ V}$)



6.5. ábra: A 200 nm x 2 μm x 100 nm-es fonzisztor hőmérséklet-eloszlás képei (nem méretarányos)

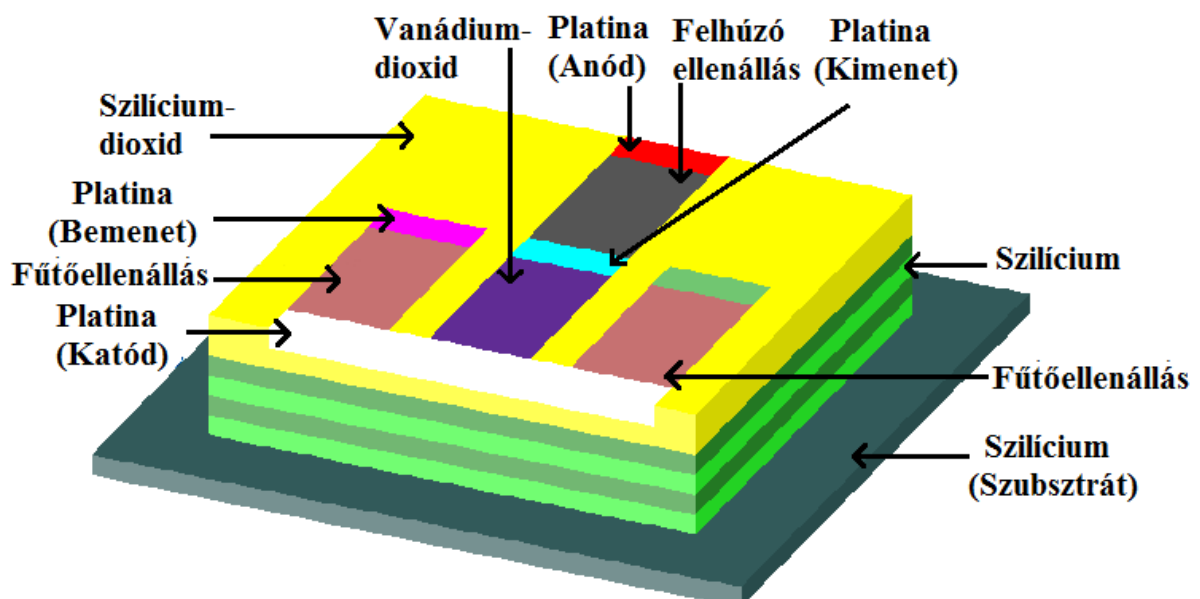
1. Bekapcsolás előtt

2. Bekapcsolás után

3. Maximális gerjesztésnél

7. Két bemenetű logikai kapuk szimulációja

A két bemenetű kapuk vizsgálatánál csak a logikai működést szimuláltam, ezért definiáltam a „logikai 1” és a „logikai 0” szintekhez tartozó feszültségértékeket, amelyek 3,3 V és 0 V lettek. A logikai szintekhez tartozó feszültség létrehozásához a VO₂ ellenállást sorba kapcsoltam egy felhúzó ellenállással, kialakítva így egy feszültségosztót. A modell felépítése a 3.1. ábrán látható.



7.1. ábra: A két bemenetű logikai kapu modellje (nem méretarányos)

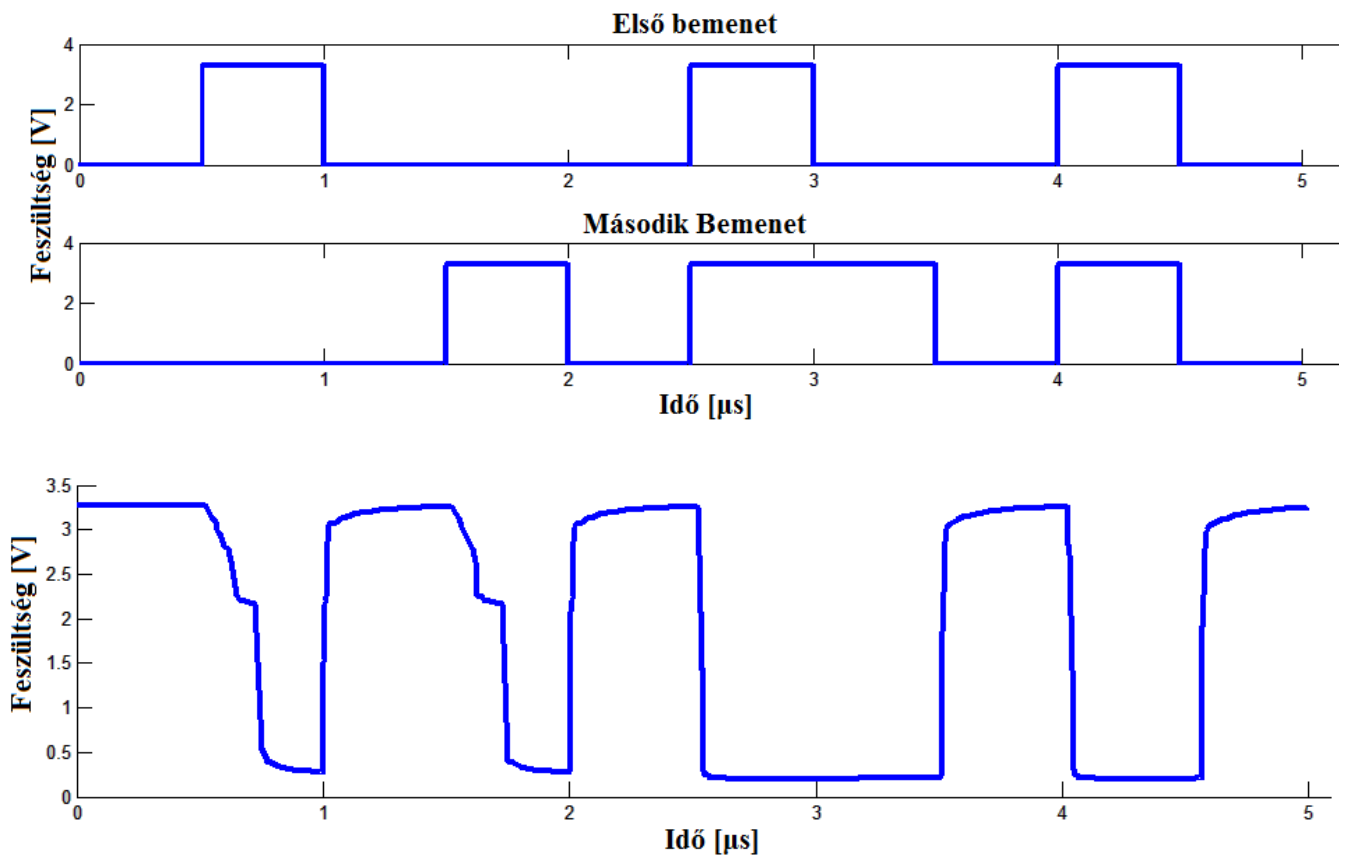
A modellben a VO₂ ellenállás 1 µm x 10 µm felületű, ami mellett két ugyanekkora méretű hagyományos ellenállás található SiO₂ sávokkal elválasztva. Az egyes rétegek 100 nm vastagok a szubsztrátot kivéve, ami 300 µm, a struktúrát felülről és oldalról pedig levegő fedi. A fűtőellenállás fajlagos ellenállása megegyezik a VO₂ 73°C feletti fajlagos ellenállásával a felhúzó ellenállás pedig tízed akkora, mint VO₂ 30°C-on mért értéke.

Minden szimulációt úgy végeztem, hogy a feszültségosztóra (az 7.1. ábra „Anód” rétegére) rákapcsoltam a tápfeszültséget, a bemenetekre (az 7.1. ábra „Bemenetek” részére) „logikai 1-et”, vagy „logikai 0-t” kapcsoltam, a feszültséget pedig a feszültségosztó két ellenállása közötti platina rétegen mértem („Kimenet” réteg).

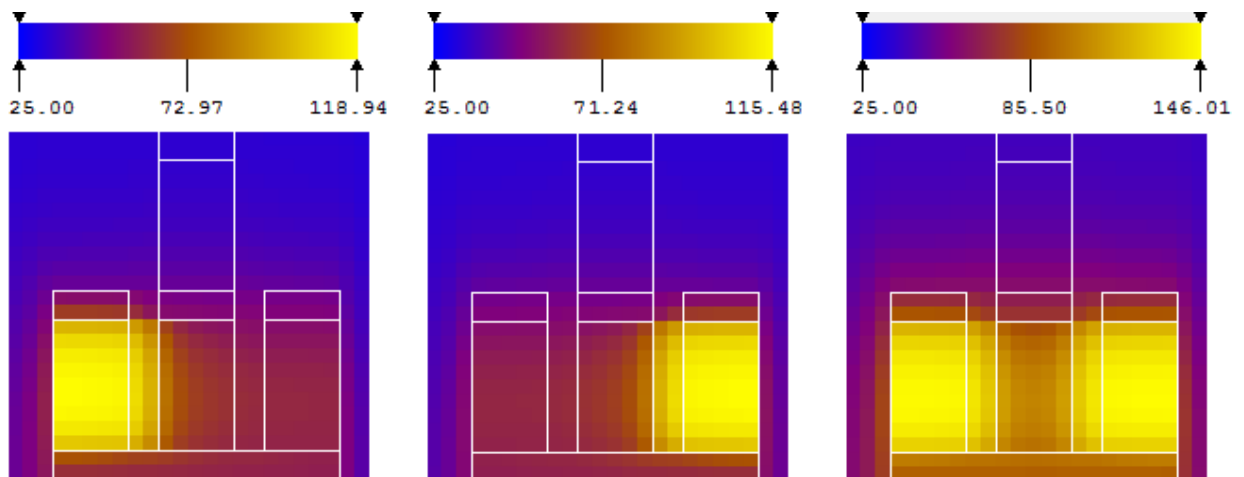
A feszültségosztóra rákapcsolt tápfeszültség hatására kialakuló áram elhanyagolható mértékben, kevesebb, mint 0,01°C-kal növelte csak meg a VO₂ ellenállás hőmérsékletét, tehát a kimeneten „logikai 1” szint jelenik meg (mivel a felhúzó ellenállás tízed akkora, mint a VO₂ ellenállás). A kapu viselkedését az ellenállásokat elválasztó SiO₂ réteg szélessége szabja meg. Ha csak pár 100 nm széles, akkor a termikus csatolás kellően szoros ahhoz, hogy csak az egyik bemenetet meghajtva a fázisátalakulásra képes ellenállás hőmérséklete 73°C fölé emelkedjen, így a VO₂ ellenállás értéke lényegesen kisebb lesz, mint a felhúzó ellenállásé, tehát a kimeneten „logikai 0” szint jelenik meg, vagyis az eszköz NOR kapuként viselkedik. Ha azonban a szigetelőréteg szélessége pár µm-es, akkor a lazább csatolás miatt mindkét bemenet „megfűtése” szükséges ahhoz, hogy a kimenet „logikai 0”-ba váltson, tehát az eszköz NAND kapuként funkcionál.

7.1 NOR kapu

A struktúra NOR kapuként való viselkedéséhez a SiO₂ szélességét 100 nm-re állítottam. A 7.1.1. ábrán láthatóak a bemeneti jelek valamint az eszköz válasza. Megfigyelhető, hogy bármelyik bemenetet meghajtva a kimenet „logikai 0” értéket vesz fel, tehát a VO₂ ellenálláson létrejött a fázisátalakulás. A különböző bemeneti kombinációk által kialakított hőmérséklet-eloszlás képei a 7.1.2. ábrán láthatók. Észrevehető, hogy már az egyik bemenetet megfűtve a VO₂ ellenállás hőmérséklete 65°C fölé emelkedik, viszont még nem a teljes ellenállás alakult át. Ha mindkét bemenetnek „logikai 1” értéket adunk, akkor már az egész VO₂ réteg átalakul. Ez a különbség a feszültség szinteken is látható: különböző bemeneteknél a kimeneti feszültség értéke 0,28 V, míg mindkét bemenetet meghajtva 0,2 V, ám ez nem jelent problémát, mert mindegyik érték „logikai 0”-nak felel meg.



3.1.1. ábra: A logikai NOR kapu válaszele adott gerjesztésre

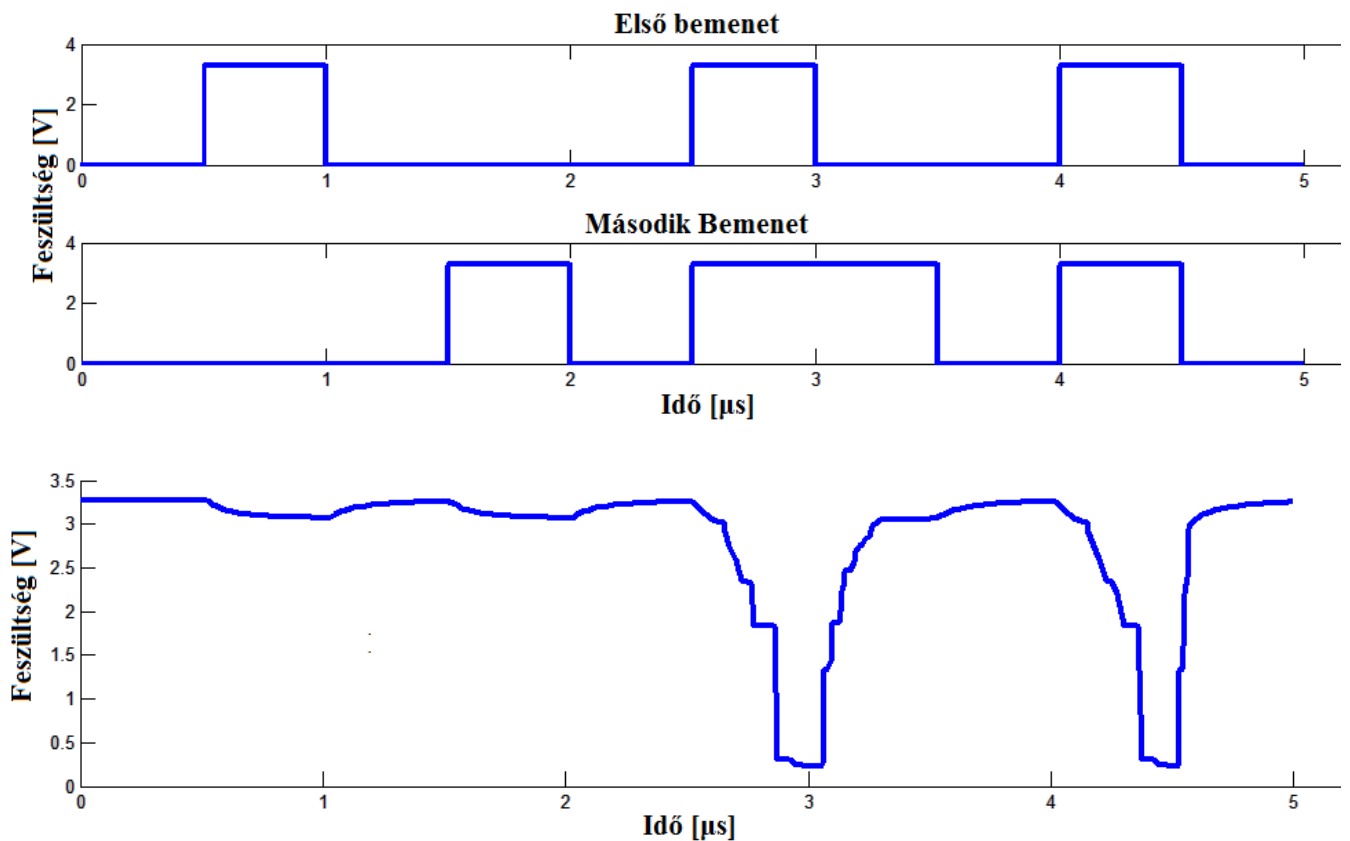


3.1.2. ábra: A logikai NOR kapu hőmérséklet-eloszlás képei. (nem méretarányos)

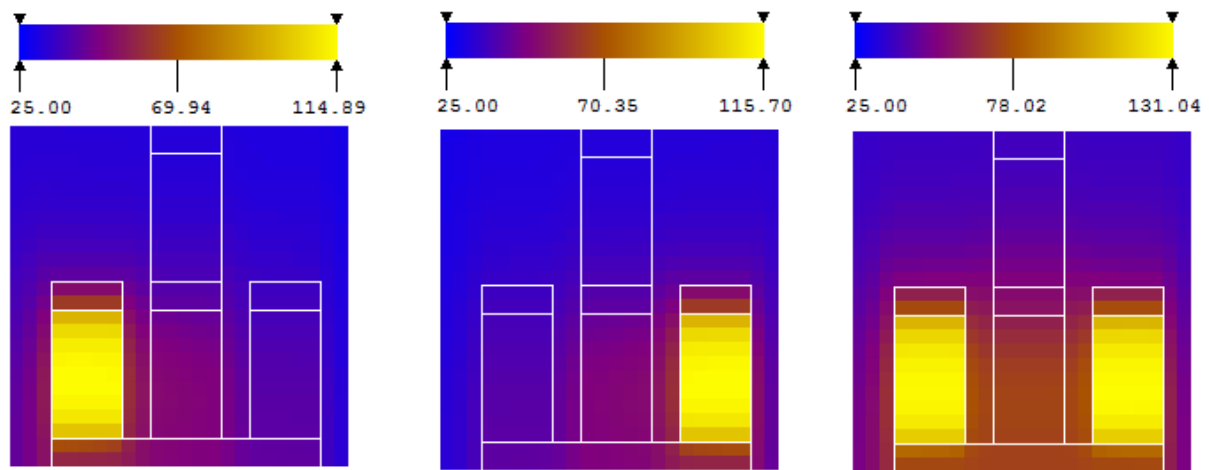
1. és 2. Csak az egyik bemenetet fűtjük. 3. Mindkét bemenetet fűtjük.

7.2 NAND kapu

Ebben az esetben az ellenállások közötti SiO₂ réteg szélességét 3 μm-re állítottam. Az eredményekből látható, hogy mindkét bemenet meghajtása szükséges a kimenet változásához, mert az egyik bemenetet megfűtve még nem jön létre a fázisátalakulás. (A feszültség valamelyest csökken ilyenkor is, ám az még „logikai 1”-nek felel meg.) Az eszköz válasza a megadott gerjesztésre a 7.2.1. ábrán látható, hőmérséklet-eloszlás képei pedig a 7.2.2. ábrán. (A szigetelőréteg méretváltozása nem látszik rajtuk, csak az egyes pixelek által reprezentált méreteket állítottam át.)



3.2.1. ábra: A logikai NAND kapu válaszjele adott gerjesztésre



3.2.2. ábra: A logikai NAND kapu hőmérséklet-eloszlás képei (nem méretarányos)

1. és 2. Csak az egyik bemenetet fűtjük. 3. Mindkét bemenetet fűtjük.

A bemeneti jelek periódusidejének beállítása sarkalatos kérdés. Ahhoz hogy az eszköz NAND kapuként viselkedjen nem elég a szigetelőréteg szélességének beállítása, mert a viselkedés a bemeneti jelek frekvenciájától is függ (1.4. fejezet). Létezik olyan eset, amikor a szigetelőréteg szélessége akkora, hogy túl rövid gerjesztés hatására semmilyen bemeneti kombináció esetén sem kapcsol az eszköz, vagy túl hosszú gerjesztésnél akkora hő keletkezik, hogy NAND kapu helyett NOR kapuként viselkedik, így a bemenet frekvenciájának van egy alsó és egy felső határa.

Ha NOR kapu a cél, ott könnyebb a helyzet, a frekvenciának csak felső határa van, hiszen ha az eszköz egy bizonyos frekvenciánál már bekapcsol, akkor annál kisebb esetén is be fog, viszont nagyobb frekvenciák használatakor már lehetséges, hogy NAND kapuként viselkedik, vagy egyáltalán nem kapcsol be.

8. Összefoglalás

Dolgozatomban röviden bemutattam a termikus-elektromos áramkörök elképzelését és a vanádium-dioxid tulajdonságait. Ismertettem a SUNRED térszimulátor működésének alapjait valamint hiszterézises modellek kezelésének algoritmusát. Összehasonlítottam három VO₂ ellenállásmodellt és az azokkal számolt U-T karakterisztikákat. Az kapott görbéken nem láthatóak nagy különbségek, de a hiszterézis nélküli modellek gyakran oszcilláló eredményeket produkáltak, mely probléma kiküszöbölése folyamatban van. Láthattuk, hogy hiszterézis abban az esetben is megfigyelhető, ha az R-T karakterisztika nem mutat hiszterézist. Az ellenállás struktúra modellen végzett szimulációkból kiderült, hogy a mért és a szimulált eredmények megegyező jellegűek, a diszkrét felbontás azonban az általam vizsgált legrészletesebb modellben is hibát okozott. Az eredmények pontosításához véleményem szerint egy még részletesebb modell használata szükséges, valamint a mérési körülmények lehető legpontosabb ismerete.

A termikus ellenállások becslése és összehasonlítása a mért és a szimulált eredményekből számoltakkal jó módszer kapott értékek relevanciájának ellenőrzésére. A jövőben tervezett részletes modell felbontására is jó becslést tehetünk, ha a mért termikus ellenállás értékekből, a közelítő integrál segítségével visszaszámítjuk, hogy mennyire vékonyodik el a csatorna. A modell egy pixelének körülbelül ilyen nagyságúnak kell lennie.

A fonzisztor vizsgálatával megállapítottuk, hogy a szimuláció szerint valóban elképzelhető egy termikus vezérléssel működő kapcsoló eszköz, melynek karakterisztikája triac jellegű. A nanoméretű struktúra szimulációja során a csatorna kialakulása a kis méretek miatt nem figyelhető meg. A szimulációs eredmények azonban csupán becslésnek tekinthetők az esetlegesen fellépő kvantumfizikai jelenségek miatt, melyeket a modell nem vesz figyelembe. Modelljeinket akkor tudjuk ellenőrizni illetve pontosítani, ha ilyen struktúra a valóságban is rendelkezésünkre áll majd, és ezeken el tudjuk végezni a megfelelő méréseket.

A logikai kapuk szimulációja bebizonyította, hogy valóban elképzelhetők vanádium-dioxid alapú TELC eszközök, a megfelelő termikus csatolások kialakítása azonban nem egyszerű feladat.

Irodalomjegyzék

- [1] János Mizsei Márton C. Bein. Contracting Current Paths in Vanadium Dioxide Thin Films. September 2011. Proceedings of the 17th International Workshop on THERMAL INvestigation of ICs and Systems (THERMINIC'11). pp. 66-69.
- [2] John Rozen. Properties of Nanocrystalline Vanadium Dioxide. Master's Thesis. August 2005. Vanderbilt University.
- [3] B. Sigalov B. Gorenstein G. Golan, A. Axelevitch. Metal–insulator phase transition in vanadium oxides films. November 2002. *Microelectronics Journal* 34. pp. 255-258.
- [4] Dr. Mizsei János. Termikus-elektromos integrált áramkör nagy integráltságú logikai hálózatok megvalósítására, a termikus-elektromos tranzisztor: fonzisztor (phonsistor).
- [5] János Mizsei. Márton C. Bein. László Juhász. Éva Jelinek. Thermal-Electronic Devices and Thermal-Electronic Logic Circuits (TELC). April 2015. 38th International Spring Seminar on Electronics Technology (ISSE). IEEE, 2015. pp. 61-65.
- [6] J. Lappalainen, S. Heinilehto, H. Jantunen, V. Lantto, “Electrical and optical properties of metal-insulator-transition VO₂ thin films”, *Journal of Electroceramics*, vol. 22, no. 1, pp. 73–77, Feb. 2009.
- [7] 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). 1st International Conference Functional Integrated nano Systems Conference Documentation. p. 1.
- [8] Pohl László. Speciális félvezetőeszközök szimulációja szukcesszív hálózatredukciós módszerrel. PhD értekezés. 2013.
- [9] Soma Ur, János Mizsei, László Pohl. Modelling of the Thermoelectrical Performance of Devices Based on VO₂. Therminic. 2016. Proceedings of the 22nd International Workshop on THERMAL INvestigation of ICs and Systems (THERMINIC'16). 349 p. pp. 307-310.
- [10] D'Agosta, R.; Sai, N.; Di Ventra, M. Local electron heating in nanoscale conductors. *Nano Lett.* 2006, 6, 2935–2938.
- [11] Henry, A. S.; Chen, G. Spectral phonon transport properties of silicon based on molecular dynamics simulations and lattice dynamics. *J. Comput. Theor. Nanos.* 2008, 5, 141–152.
- [12] Darwish, A. M.; Bayba, A. J.; Hung, H. A. Accurate determination of thermal resistance of FETs. *IEEE Trans. Microw. Theory* 2005, 53, 306–313.
- [13] Rinaldi, N. On the modeling of the transient thermal behavior of semiconductor

- devices. *IEEE Trans. Electron Dev.* 2001, 48, 2796–2802.
- [14] Liao, A.; Zhao, Y.; Pop, E. Avalanche-induced current enhancement in semiconducting carbon nanotubes. *Phys. Rev. Lett.* 2008, 101, 256804.
- [15] M. M. Qazilbash, K. S. Burch, D. Whisler, D. Shrekenhamer, B. G. Chae, H. T. Kim, D. N. Basov: Correlated metallic state of vanadium dioxide. *Phys. Rev. B* 74, 205118. 2006.
- [16] János Mizsei, Márton C Bein, Jyrki Lappalainen, László Juhász. Thermal-Electronic Circuits: Basics, Simulations, Experiments. Proceedings of the 21st International Workshop on THERMal INvestigation of ICs and Systems (THERMINIC'15). Paper 2_4_id146. 6 p. 2015.
- [17] Kazuki Nagashima, Takeshi Yanagida, Hidekazu Tanaka, Tomoji Kawai. Influence of ambient atmosphere on metal-insulator transition of strained vanadium dioxide ultrathin films. *Journal of Applied Physics* 100, 063714. 2006.
- [18] János Mizsei, Jyrki Lappalainen, Soma Ur, Márk Németh, Lajos Gaál. Thermal-electronic device and integrated circuit. Proceedings of the 16th International Conference of Nanotechnology. pp 966-969. 2016.