

N* Моделирование и изучение резистивного переключателя на основе нанокристалла VO_2 с золотыми конусообразными контактами



Капогузов К.Е.^{1,2}, Мутилин С.В.¹, Принц В.Я.¹

¹ ИФП им. Ржанова, лаборатория физики и технологии трехмерных наноструктур, Новосибирск, Россия

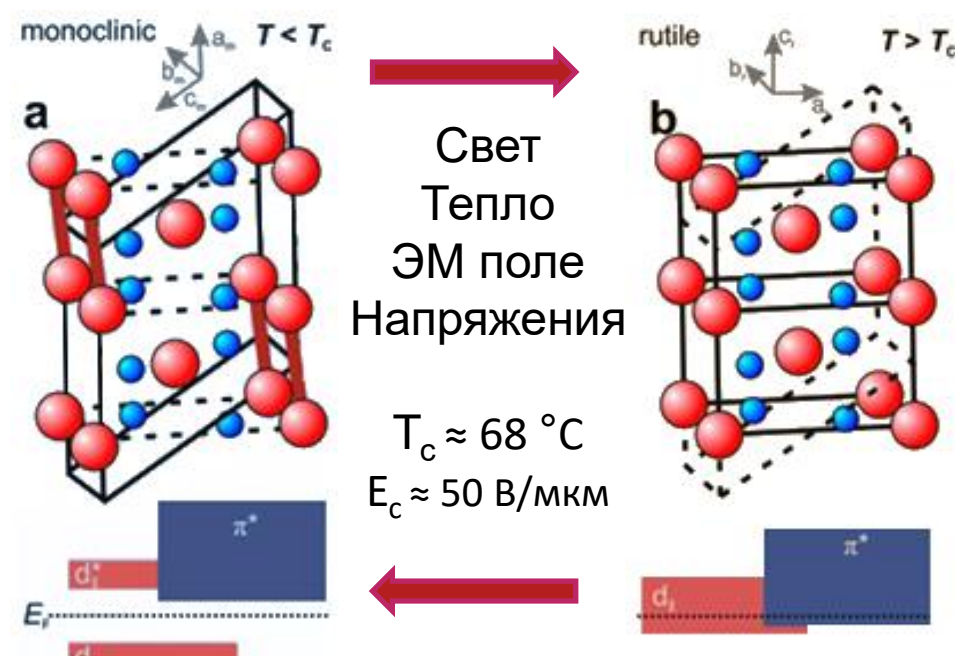
² НГУ ФФ, Новосибирск, Россия

Введение

VO_2 - интеллектуальный материал, в котором имеет место резкий обратимый фазовый и структурный переходом $\text{VO}_2(\text{M}) \leftrightarrow \text{VO}_2(\text{R})$ [1].

Области применения:

- Интеллектуальные и нейроморфные системы
- Сенсоры, оптические и электрические переключатели
- Мотт-транзисторы, мемристоры



Изменяются:

- Проводимость: до 5 порядков
- Показатель преломления: с 2,5 до 1,5 ($\lambda = 1000 \text{ nm}$)
- Постоянная решетки: на 1 %

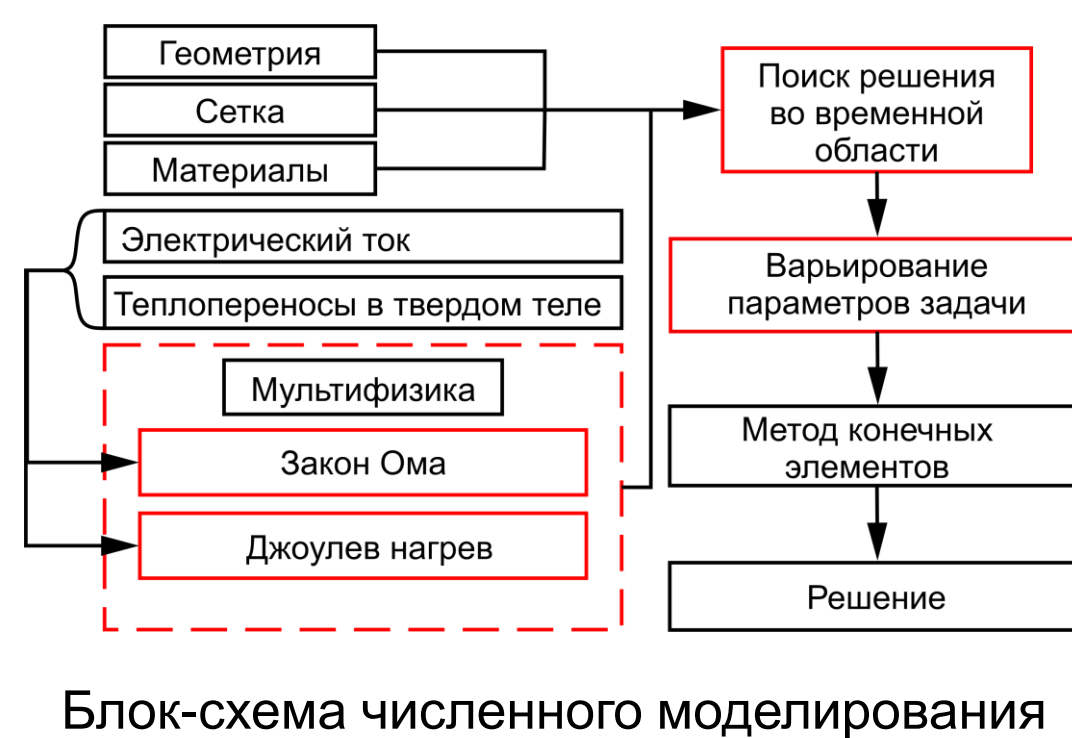
Нанокристалл VO_2 , селективно синтезированный на вершине острой проводящей конусообразной иглы является основной частью энергоэффективного двухконтактного переключающего элемента [2].

Для дальнейшего улучшения характеристик нанопереключателей на основе монокристаллов VO_2 необходимо определить оптимальную геометрию контактов, их размер, форму и расположение в нанокристалле.

В данной работе рассмотрена модель резистивного переключающего элемента, состоящего из наноразмерного кристалла VO_2 в форме куба и двух золотых контактов к нему

Методики экспериментов

Численным моделированием исследовано переключение сопротивления в кристалле VO_2 . Рассмотрены 3 разные геометрии: одна игла касается кристалла, одна игла погружена в кристалл и две иглы погружены в кристалл.



Параметры нанокристалла VO_2 приведены в таблице 1 и на рис. 1 (а) и (б). Переключение сопротивления происходило при повышении температуры кристалла выше пороговой за счет джоулевого нагрева.

Разность потенциалов между двумя контактами была постоянна и составляла 1 В. Во всех постановках задачи варьировался радиус кривизны иглы (5, 10, 15, 20, 25 и 50 нм.).

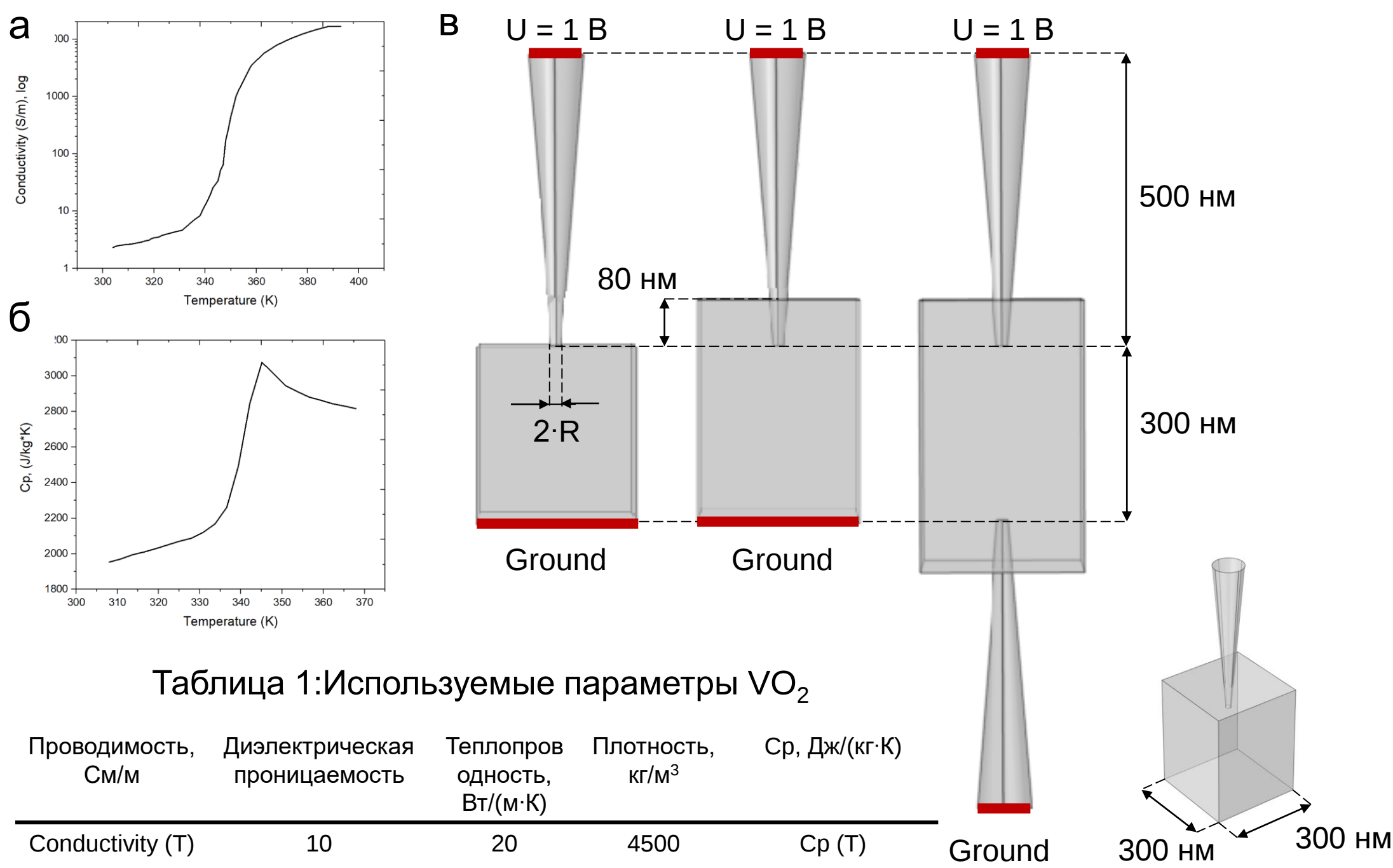


Рис. 1 Зависимость удельной проводимости (а) и теплоемкости при постоянном давлении (б) от температуры для кристалла VO_2 . Изображение кристалла и иглы в трех вариантах эксперимента (в)

Результаты

В результате моделирования для различных геометрий и радиусов были получены картины распределения температуры, напряженности электрического поля и плотности тока в кристалле VO_2 во временной окрестности фазового перехода, а также зависимость тока через кристалл от времени (рис. 2).

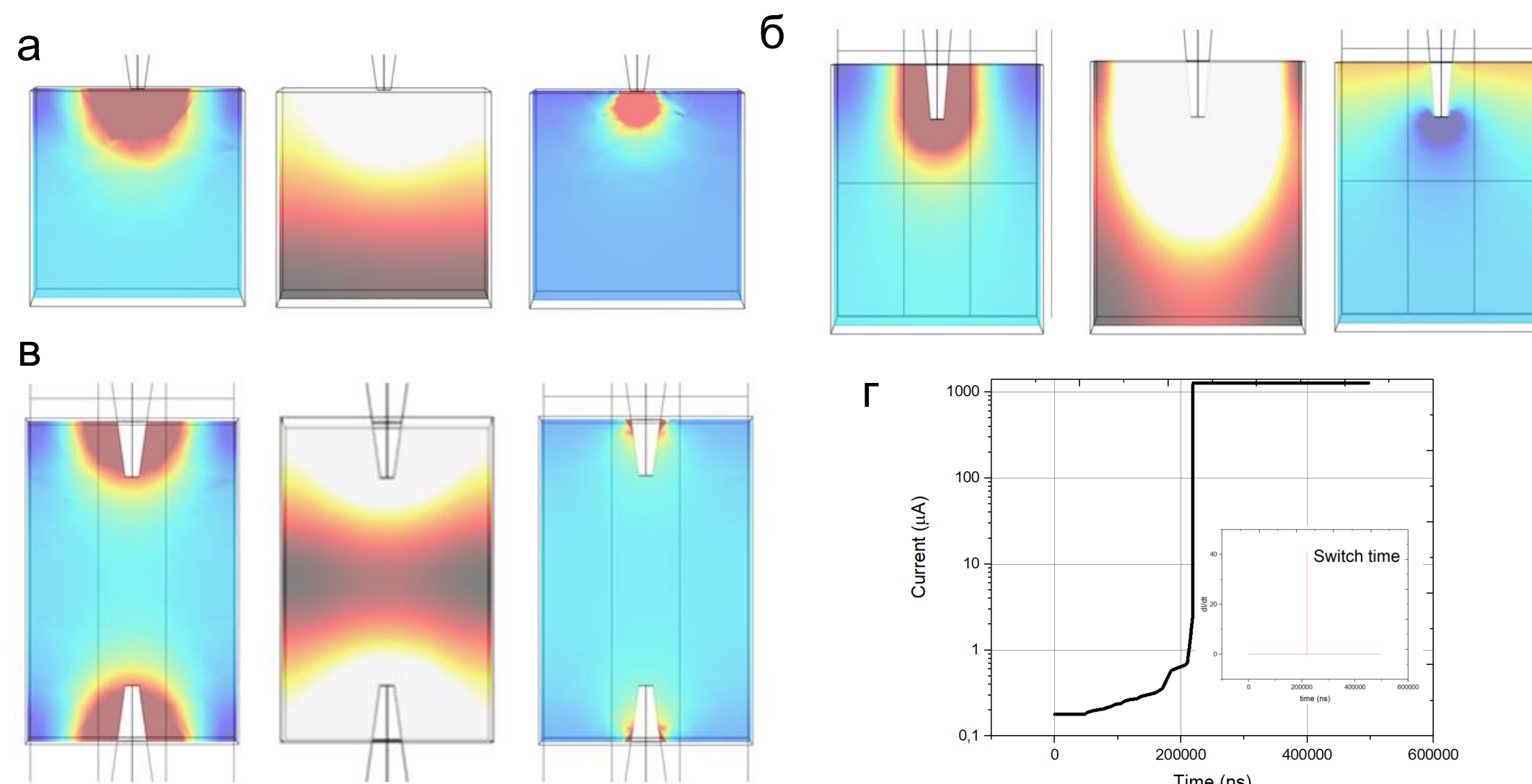


Рис.2 Характерный вид распределения плотности тока, температуры и напряженности поля вблизи фазового перехода для одной иглы (а), одной погруженной иглы (б) и двух игл (в), а также зависимость логарифма тока через кристалл VO_2 от времени (г) (вставка – производная от тока по времени).

Используя результаты моделирования получены значения тока перехода для разных радиусов кривизны иглы (рис. 3). Получено, что в геометрии двух погруженных в кристалл игл ток перехода минимальный.

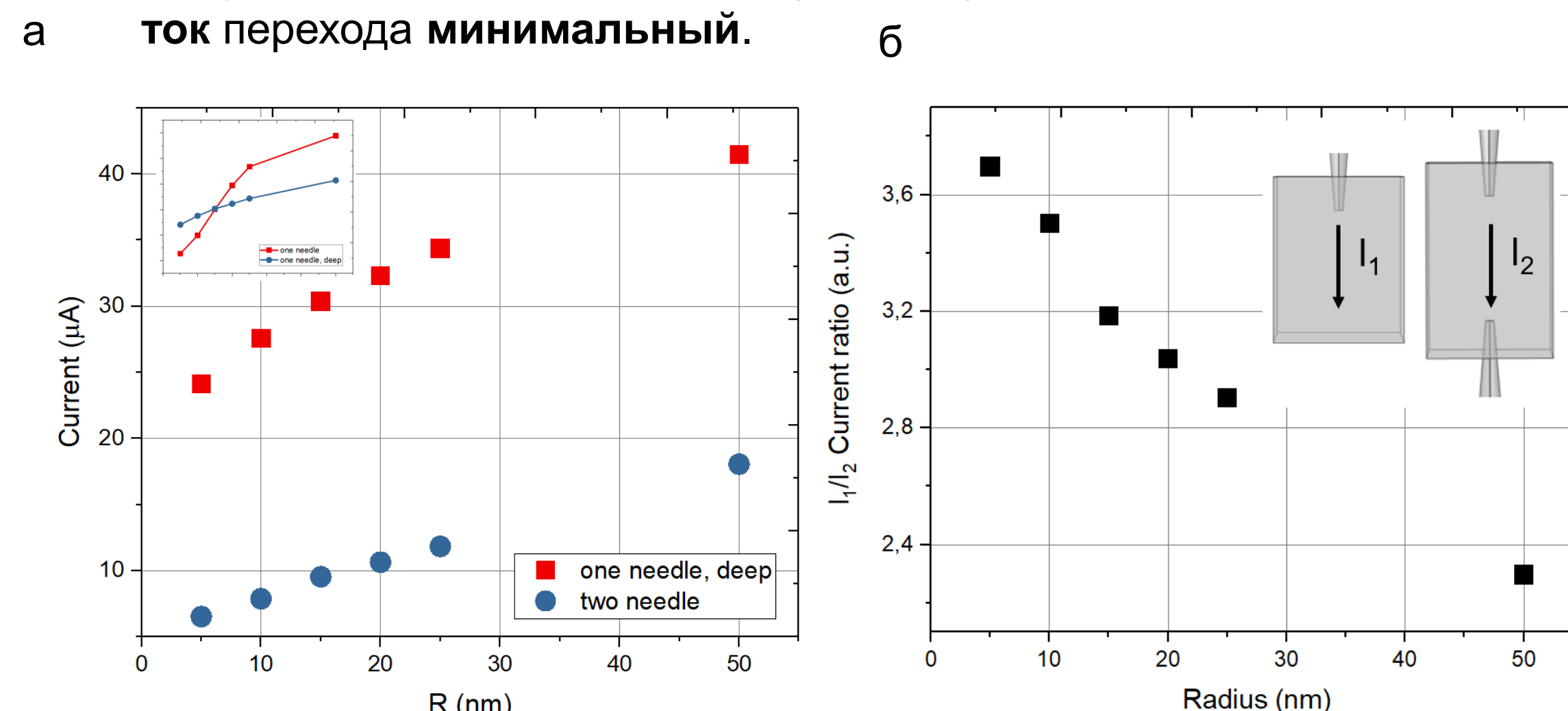


Рис. 3 Ток перехода от радиуса кривизны иглы для трех разных геометрий контактов (а). Вставка сверху слева – результат для одной иглы и одной иглы погруженной. Отношение тока переключения для одной погруженной иглы к току переключения для двух игл (б).

Значения рассчитанной мощности перехода приведены в таблице 2. Видно, что используя геометрию двух контактов, возможно добиться наименьшей мощности перехода, а значит наилучшей энергоэффективности.

Таблица 2: Теплота на переход для разных геометрий

	Одна игла	Одна игла погружена	Две иглы
Радиус иглы, нм	От 5 до 50	От 5 до 50	От 5 до 50
Мощность перехода, мкВт	От 13 до 59	От 24 до 42	От 7 до 18

В работе [2] были синтезированы структуры, аналогичные рассматриваемым (рис. 4). Полученные в работе [2] значения токов перехода ($\approx 10 \text{ мкА}$) по порядку величины совпадают с результатами численного моделирования в данной работе.

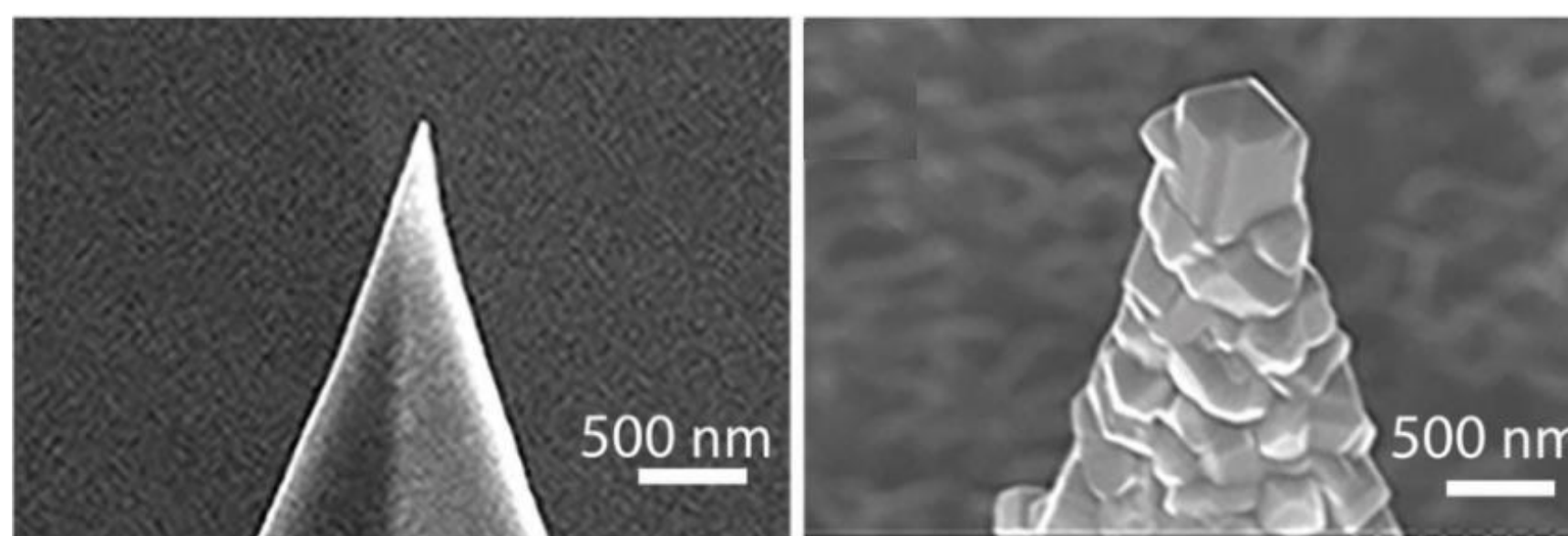


Рис. 4 СЭМ изображения иглы ACSM до (а) и после (б) роста кристалла VO_2

Обсуждение результатов

В полученных зависимостях тока перехода от радиуса кривизны иглы для разных геометрий задачи прослеживается тенденция: чем больше радиус кривизны, тем больше ток перехода. При этом в случае двух контактов ток перехода меньше, чем в остальных случаях. Интерес представляет сравнение значений тока перехода для одной касающейся и погруженной иглы. В случае маленького радиуса кривизны иглы (5 – 20 нм), тенденция нарушается и ток меньше для случая касающейся иглы. Этот факт объясняется большим значением падения потенциала около контакта для касающейся иглы (рис. 5) и, следовательно, маленьким током через кристалл VO_2 .

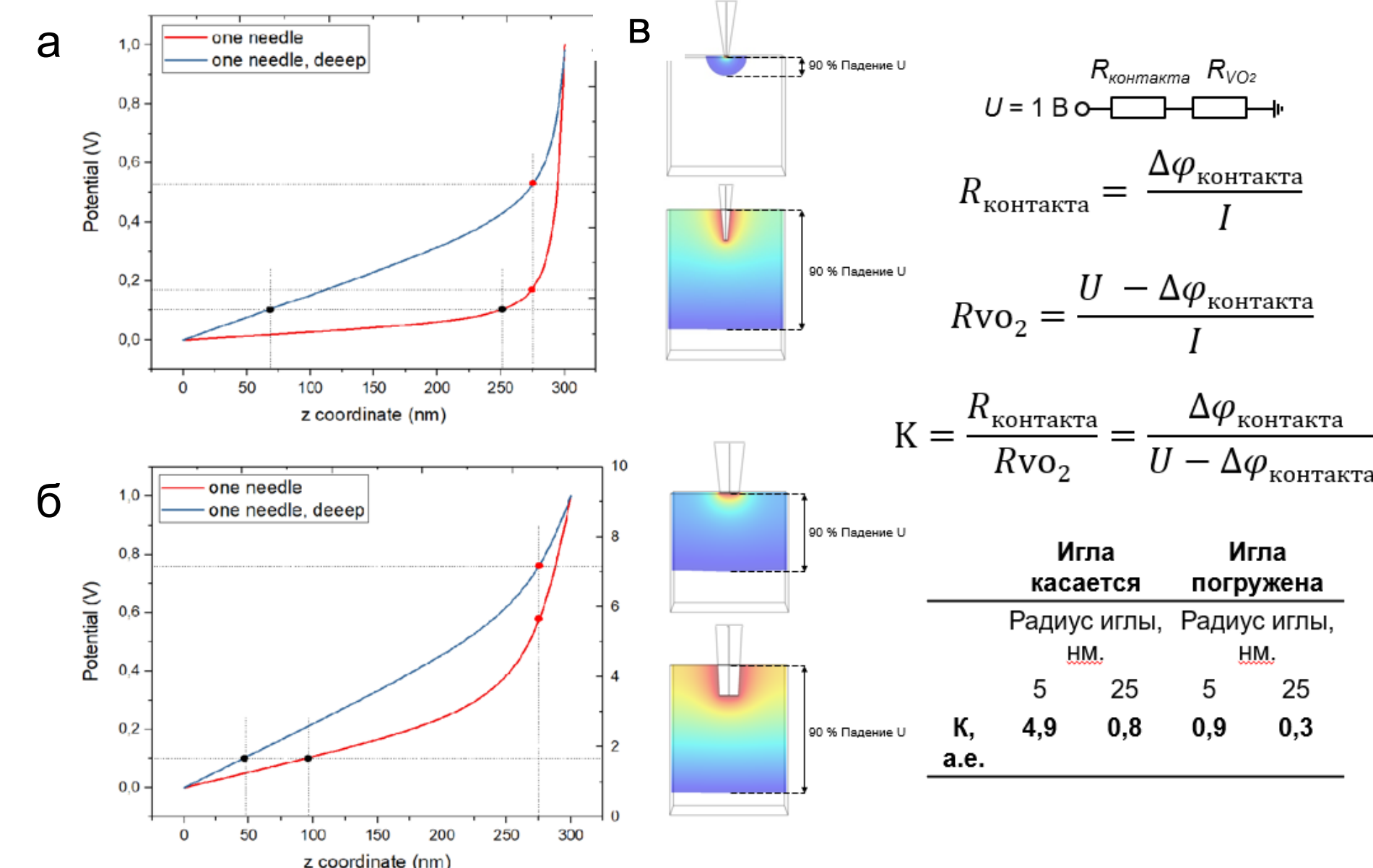


Рис.5 Зависимость потенциала от высоты для $R = 5$ (а) и 25 nm (б). Иллюстрация падения потенциала в кристалле VO_2 (в).

Рассчитанный параметр K показывает влияние контакта: чем K больше, тем влияние контакта больше. Видно, что в геометрии касающейся иглы влияние контакта велико. В геометрии одной погруженной иглы влияние контакта минимально. Рассчитанная мощность перехода минимальна для одной касающейся иглы, однако, из за большого контактного сопротивления, теплота на переход в такой геометрии максимальна

Закключение

- Численным моделированием методом конечных элементов был рассчитан нанокристалл VO_2 с золотыми конусообразными контактами в трех разных геометриях контактов
- Были получены значения тока переключения сопротивления, а также необходимой мощности на переход и установлено, что для переключения требуется минимальный ток и минимальная мощность при использовании двух погруженных в кристалл игл с радиусом кривизны 5 нм.
- Исследовано влияние контакта на свойства нанокристалла VO_2 и выяснено, что в геометрии касающейся иглы влияние контакта наибольшее, что приводит к уменьшению эффективности такого переключателя
- В геометрии одной и двух погруженных игл влияние контактов сопоставимо и мало. Минимально это влияние при использовании одной погруженной иглы с радиусом кривизны 50 нм.

В результате работы была найдена наиболее энергоэффективная геометрия резистивного переключателя на основе нанокристалла VO_2 – кубик с двумя погруженными иглами с минимальным радиусом кривизны.

Результаты данной работы потенциально перспективны в дальнейших исследованиях VO_2 и создании на его основе различного рода энергоэффективных электрических и оптических переключателей, сенсоров и нейроморфных систем.

[1] Y. Ke, et.al., Small. 2018. №1802025.

[2] V.Ya. Prinz, et.al., Nanoscale, 12, 3443-3454, (2020)