Математическое моделирование и информатика

DOI 10.15507/2079-6900.23.202101.82–90 Оригинальная статья ISSN 2079-6900 (Print) ISSN 2587-7496 (Online)

УДК 519.633.6; 536.21; 538.945

Математическое моделирование переноса тепла в системе плёнка-подложка-термостат при нагреве электропроводящей плёнки импульсным током высокой плотности

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

ФГБОУ ВО «МГУ им. Н. П. Огарёва» (г. Саранск, Российская Федерация)

Аннотация. Выполнено математическое моделирование теплопереноса в системе плёнкаподложка-термостат при импульсном протекании через электропроводящую плёнку тока высокой плотности. На основе проведенного моделирования сделан анализ нагрева плёнки нитрида ниобия с высоким удельным сопротивлением вблизи критической температуры перехода в сверхпроводящее состояние. Численно решено неоднородное уравнение теплопроводности, которое моделирует теплоперенос в системе плёнка-подложка-термостат для третьей слева и первой справа начально-краевой задачи. С помощью симметрии задачи определен параметр H, равный отношению теплоотдачи поверхности плёнки к ее теплопроводности, необходимый для эффективного теплоотвода. Показано, что эффективный теплоотвод от плёнок могут обеспечить токоподводящие и потенциальные прижимные контакты, изготовленные, например, из бериллиевой бронзы. Это позволяет проводить исследование вольт-амперных характеристик сверхпроводников вблизи критической температуры перехода в сверхпроводящее состояние с токами высокой плотности ($10^4 - 10^5 A/cm^2$) без значительного нагрева образцов.

Ключевые слова: неоднородное уравнение теплопроводности, 1-я начально-краевая задача, 3-я начально-краевая задача, плёнка нитрида ниобия, импульсный нагрев током

Для цитирования: Кузьмичев Н. Д., Васютин М. А., Данилова Е. В., Лапшина Е. А. Математическое моделирование переноса тепла в системе плёнка-подложка-термостат при нагреве электропроводящей плёнки импульсным током высокой плотности // Журнал Средневолжского математического общества. 2021. Т. 23, № 1. С. 82–90. DOI: https://doi.org/10.15507/2079-6900.23.202101.82–90

1. Введение

Нитрид ниобия (NbN) является бинарным неорганическим соединением, представляющим собой серый/черный кристалл. Соединение NbN используется при производстве сверхпроводящих плёнок с критической температурой от 5 до 17 K с узким переходом, порядка 0,1 K. Нитрид ниобия используется для сверхпроводящих болометров в радиоастрономии и терагерцовой спектроскопии (hot-electron bolometer, HEB) [1]. Тонкие плёнки из NbN используются в качестве однофотонных детекторов (superconducting single-photon detectors, SSPDs) [2]. Широкие и относительно толстые плёнки используются в сверхпроводящих магнитах и накопителях энергии [3].

При проведении экспериментов по исследованию вольт-амперных характеристик (BAX) и других параметров образцов, связанных с пропусканием через них сильного



82

тока, необходимым является выполнение условия достаточного теплоотвода. Поэтому математическое моделирование процесса теплоотдачи плёнок NbN при пропускании через них тока является актуальной и практически важной задачей.

2. Постановка задачи

Поставлена и решена задача моделирования теплоотдачи плёнки NbN при низких температурах и импульсном нагреве током. В инженерном математическом программном обеспечении MathCad было решено одномерное неоднородное уравнение теплопроводности для определения распределения температуры u(x,t) в системе плёнкаподложка-термостат с использованием неявной разностной схемы (см., например, [4– 5]). Уравнение имеет вид:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = a^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + f(x,t), \qquad (2.1)$$

где $a^2 = \lambda/c_p \rho = 4, 3 \cdot 10^{-2} cm^2/s$ — коэффициент температуропроводности кварцевой подложки и плёнки NbN; $c_{\rho} = 17 J/(kg \cdot K)$ – удельная теплоёмкость подложки при 20 К [6]; $\rho = 2, 2 g/cm^3$ – плотность подложки; $\lambda = 0.16 W/(mK)$ – теплопроводность подложки при 20 К; u – температура плёнки; t – время; x – координата с началом на внешней от подложки плоскости плёнки, направленная перпендикулярно в сторону подложки (Рис. 2.1).

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

P(x,t) – объёмная плотность мощности источника тепла (плёнки); $c_{NbN} = 17 J/(kg \cdot K)$ — удельная теплоёмкость NbN плёнки при T = 14 K (сумма решёточной и электронной теплоёмкости); $\rho_{NbN} = 8.4 \ g/cm^3$ — плотность плёнки. Учитывая, что сила тока линейно возрастает за время t_0 от 0 до I_{max} , величина P(x,t) определяется законом Джоуля-Ленца:

$$P(x,t) = \begin{cases} \rho \cdot j_0^2 \cdot t^2, & \text{если } x \le d, \ t \le t_0; \\ 0, & \text{если } x > d, \ t > t_0. \end{cases}$$
(2.2)

Здесь $\rho \approx 440 \ \mu\Omega \cdot cm$ – удельное сопротивление плёнки в нормальном состоянии, $j_0 = I_{max}/(d \cdot b \cdot t_0); d$ – толщина и b – ширина плёнки. Начальным условием будет функция $\psi(x)$, которая определяет начальную температуру системы плёнка-подложка. Задаем краевую задачу третьего рода на левом конце в силу того, что левая граница плёнки находится в теплообмене со средой, имеющей температуру $\phi_1(t)$.



Рис. 2.1. Схематическое расположение плёнки и подложки Fig 2.1. Schematic arrangement of membrane and substrate

На правом конце будут граничные условия первого рода, т. к. подложка находится в контакте с термостатом имеющем температуру $\phi_2(t)$. Условия на границе плёнкаподложка не определяем, т. к. коэффициенты температуропроводности плёнки и подложки имеют приблизительно одинаковые значения. В итоге начально-краевые условия для уравнения (2.1) имеют вид:

$$\begin{cases}
 u(x,0) = \psi(x); \\
 \frac{\partial u(0,t)}{\partial x} = H[u(0,t) - \phi_1(t)]; \\
 u(L,t) = \phi_2(t).
 \end{cases}$$
(2.3)

В нашем конкретном случае эксперимента имеем: $\psi(x) = \phi_1(t) = \phi_2(t) = 14$ К.

3. Численное решение

Нанесем на пространственно-временную область 0 < x < L, $0 < t < T_0$ конечноразностную сетку $x_i = ih, t_j = j\tau$ с шагом по времени $\tau = T_0/M$ по x с шагом h = L/N. Здесь $0 \le i \le N$; $0 \le j \le M$; L – толщина системы плёнка-подложка, T_0 – временной интервал моделирования; N и M – количество шагов.

Воспользуемся неявной конечно-разностной аппроксимацией начально-краевой задачи (2.1) и (2.3), поскольку она обладает устойчивостью при любом соотношении шагов h и τ [4–5].

Аппроксимация краевой задачи (2.3) на левом конце в нашем приближении будет записана как $\frac{\partial u}{\partial x}\Big|_{0,t} \approx \frac{u_1^{j+1} - u_0^{j+1}}{h} = H(u_0^{j+1} - \phi_1^{j+1})$ и в окончательном виде будет выглядеть следующим образом:

$$u_0^{j+1} = \frac{u_1^{j+1} + \delta\phi_1^{j+1}}{1+\delta},\tag{3.1}$$

где $\delta = hH$; H – отношение коэффициента теплообмена к коэффициенту теплопроводности материала нитрида ниобия. На правом конце имеем: $u_N^j = \phi_2(j\tau) = \phi_2^j$. В итоге запишем M систем линейных алгебраических уравнений (СЛАУ) с трехдиагональной матрицей:

$$\begin{cases} (1+\sigma\lambda)u_1^{j+1} - \lambda u_2^{j+1} = u_1^j + \tau f_1^j + (\sigma-1)\lambda\phi_1^{j+1};\\ -\lambda u_{i-1}^{j+1} + (1+2\lambda)u_i^{j+1} - \lambda u_{i+1}^{j+1} = u_i^j + \tau f_i^j;\\ -\lambda u_{N-1}^{j+1} + (1+2\lambda)u_{N-1}^{j+1} = u_{N-1}^j + \tau f_{N-1}^j + \lambda\phi_2^{j+1}. \end{cases}$$
(3.2)
Здесь $\lambda = a^2 \tau / h^2; 2 \le i \le N-2; 0 \le j \le M-1; \sigma = 1 + \frac{\delta}{1+\delta}.$

Сеточную функцию (температуру) u_i^j на первом и последующих временных слоях получим из решения СЛАУ (3.2) методом прогонки. Следует отметить, что при отсутствии теплообмена $\delta = 0$ ($\sigma = 1$) получим 2-ю краевую задачу, а при $\delta = \infty$ ($\sigma = 2$) – 1-ю краевую задачу (при бесконечно большом теплообмене температура на левом конце поддерживается постоянной).

Решение поставленной задачи было получено в среде MathCad [7]. Результаты численных расчетов температуры u(x,t) для $H = 10 \ \mu m^{-1}$, $L = 40 \ \mu m$, $t_0 = 250 \ \mu s$ и остальными вышеприведенными параметрами в разделе «2. Постановка задачи» отражены на Рис. 3.1 - 3.3.

N.D. Kuzmichev, M.A. Vasyutin, E.V. Danilova, E.A. Lapshina . Mathematical modeling of heat...



Рис. 3.1. Распределение температуры по толщине системы плёнка-подложка в разные моменты времени после начала импульса. Цифрами обозначены моменты времени: $1 - 200 \ \mu s$, $2 - 250 \ \mu s$, $3 - 275 \ \mu s$, $4 - 300 \ \mu s$, $5 - 375 \ \mu s$ **Fig 3.1.** Temperature distribution over the thickness of the membrane-substrate system at different times after the start of the pulse. The numbers indicate moments of time: $1 - 200 \ \mu s$, $2 - 250 \ \mu s$, $3 - 275 \ \mu s$, $4 - 300 \ \mu s$, $5 - 375 \ \mu s$



Рис. 3.2. Начальная область распределения температуры по толщине системы плёнка-подложка в разные моменты времени после начала импульса. Область плёнки выделена серым цветом. Цифрами обозначены моменты времени: 1 – 200 µs, 2 – 250 µs, 3 – 275 µs, 4 – 300 µs

Fig 3.2. Initial region of temperature distribution over the thickness of the system membrane-substrate at different times after the onset of the pulse. Region the film is highlighted in gray. The numbers indicate the moments in time: $1 - 200\mu s$, $2 - 250\mu s$, $3 - 275\mu s$, $4 - 300\mu s$



Рис. 3.3. Изменение температуры с течением времени в системе плёнка-подложка в разных точках системы. Цифрами обозначены координаты x точек: 1 – 0 μm , 2 – 0,2 μm , 3 - 5 μm , 4 – 20 μm , 5 – 30 μm Fig 3.3. Temperature change over time in the system membrane-substrate at different points of the system. The numbers indicate the coordinates x points: $1 - 0\mu m$, 2 – 0.2 μm , 3 – 5 μm , 4 – 20 μm , 5 – 30 μm

4. Обсуждение полученных результатов

При экспериментальном исследовании ВАХ плёнки необходимо обеспечить хороший теплоотвод, чтобы её нагрев не превышал нескольких десятых градуса. Поэтому результаты численного моделирования процесса теплоотдачи плёнки, приведенные в настоящей работе актуальны, в частности, для вышеотмеченной цели.

Из полученных результатов, приведенных на Рис. 3.1 – 3.3, видно, что максимальная температура нагрева находитсядостигается внутри плёнки и наибольшее ее значение – в конце импульса. Внешняя (x = 0 nm) и внутренняя (x = 400 nm) границы плёнки имеют разные температуры. Максимальная разность температур поверхностей плёнки достигается также в конце импульса и равна в нашем случае: $\Delta u_s = u(400$ нм, $250 \, \mu s) - u(0, 250 \, \mu s) \approx 0, 12 \ K$. Значение максимума температуры нагрева плёнки зависит от параметра H (равного отношению теплоотдачи к теплопроводности материала) т. е. $u_{max} = 14$ K+ $\Delta u_{max}(H)$. Данная зависимость приведена на Рис. 4.1. Как видно из данного рисунка, Δu_{max} при малых H с возрастанием данного параметра резко падает, а при H больше $20 \mu m^{-1}$ уменьшается медленно.

В нашем случае величина H неизвестна, но её можно оценить с помощью симметрии задачи. Для этого сначала необходимо найти такое значение H, при котором максимум нагрева плёнки приходится на её середину ($x = 0, 2 \mu m$). В этом случае теплоотдача верхней и нижней поверхностей плёнки будет одинаковой. Т. к. теплопроводности подложки и контактов известны, можно оценить требуемую H, учитывая, что площадь



Рис. 4.1. Зависимость температуры максимального локального нагрева плёнки NbN от параметра HFig 4.1. Dependence of the temperature of the maximum local heating of the membrane NbN on H

контактов составляет около 20 % площади плёнки. Было получено $H = 50 \ \mu m^{-1}$. Такое высокое значение параметра H могут обеспечить прижимные контакты с высокой теплопроводностью. В качестве материала контактов целесообразно использовать бериллиевую бронзу (BeCu). Большая теплопроводность ($\lambda_{BeCu} = 754 \ W/(m \cdot K)$) и упругие свойства BeCu, в частности предел усталости, вместе с высокой коррозийной стойкостью делают этот материал чрезвычайно подходящим для изготовления прижимных контактов.

5. Заключение

В работе показано, что при хорошем теплоотводе поверхностями плёнки можно достичь нагрева плёнки всего лишь на 0,2–0,3 К. Это может быть достигнуто, например, применением прижимных контактов из бериллиевой бронзы, что позволяет проводить исследование ВАХ сверхпроводников вблизи критической температуры перехода в сверхпроводящее состояние с токами высокой плотности ($10^4 - 10^5 A/cm^2$) без значительного нагрева образцов. Полученный результат работы показывает, что небольшой рост температуры, вызванный импульсом тока, вносит незначительные искажения в реальные ВАХ.

Список литературы

- Shurakov A., Lobanov Y., Goltsman G. Superconducting hot-electron bolometer: from the discovery of hot-electron phenomena to practical applications // Superconductor Science and Technology. 2016. Vol. 29, No. 2.
- Н. Д. Кузьмичев, М. А. Васютин, Е. В. Данилова, Е. А. Лапшина. Математическое моделирование...

- Carter F. W., Khaire T., Chang C., Novosad V. Low-loss single-photon NbN microwave resonators on Si // Appl. Phys. Lett. 2019. Vol. 115, No. 9.
- 3. Suzuki Y., Iguchi N., Adachi K., Ichiki A., Hioki T., Hsu C.-W., Sato R., Kumagai S., Sasaki M., Noh J.-H., Sakurahara Y., Okabe K., Takai O., Honma H., Watanabe H., Sakoda H., Sasagawa H., Doy H., Zhou S., Hori H., Nishikawa S., Nozaki T., Sugimoto N., Motohiro T. Complete fabrication of a traversable 3 μ m thick NbN film superconducting coil with Cu plated layer of 42 m in length in a spiral three-storied trench engraved in a Si wafer of 76.2 mm in diameter formed by MEMS technology for a compact SMES with high energy storage volume density // J. Phys.: Conf. Series. 2017. Vol. 897, No. 1. 012045.
- Турчак Л. И., Плотников П. В. Основы численных методов. М.: Физматлит, 2005. 304 с.
- 5. Формалев В. Ф., Ревизников Д. Л. Численные методы. М.: Физматлит, 2006. 406 с.
- Таблицы физических величин: справочник / под ред. И. К. Кикоина. М.: Атомиздат, 1976. 1008 с.
- Охорзин В. А. Компьютерное моделирование в системе Mathcad: учеб. пособие. М.: Финансы и статистика, 2006. 144 с.

Поступила 10.01.2021; доработана после рецензирования 15.02.2021; принята к публикации 20.02.2021

Информация об авторах:

Кузьмичев Николай Дмитриевич, профессор кафедры конструкторскотехнологической информатики, ФГБОУ ВО «МГУ им. Н. П. Огарёва» (430005, Россия, г. Саранск, ул. Большевистская, д. 68/1), доктор физико-математических наук, ORCID: http://orcid.org/0000-0001-6707-4950, kuzmichevnd@yandex.ru

Васютин Михаил Александрович, доцент кафедры конструкторско-технологической информатики, ФГБОУ ВО «МГУ им. Н. П. Огарёва» (430005, Россия, г. Саранск, ул. Большевистская, д. 68/1), кандидат физико-математических наук, ORCID: http://orcid.org/0000-0002-4856-7407, vasyutinm@mail.ru

Данилова Екатерина Витальевна, аспирант кафедры прикладной математики, дифференциальных уравнений и теоретической механики, ФГБОУ ВПО «МГУ им. Н. П. Огарёва» (430005, Россия, г. Саранск, ул. Большевистская, д. 68/1), ORCID: https://orcid.org/0000-0003-0554-3795, danilova29-94@mail.ru

Лапшина Елена Анатольевна, доцент кафедры конструкторско-технологической информатики, ФГБОУ ВО «МГУ им. Н. П. Огарёва» (430005, Россия, г. Саранск, ул. Большевистская, д. 68/1), кандидат педагогических наук, ORCID: http://orcid.org/0000-0002-8828-273X, e.lapshina2010@yandex.ru

Все авторы прочитали и одобрили окончательный вариант рукописи. Конфликт интересов: авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

Original article

MSC2020 35K200

Mathematical modeling of heat transfer in the film-substrate-thermostat system during heating of an electrically conductive film by a high-density pulse current

N.D. Kuzmichev, M.A. Vasyutin, E.V. Danilova, E.A. Lapshina

National Research Mordovia State University (Saransk, Russian Federation)

Abstract. Mathematical modeling of heat transfer in the film-substrate-thermostat system with a pulsed flow of high-density current through an electrically conductive film has been carried out. On the basis of the simulation, the analysis of the heating of a niobium nitride film with a high resistivity near the critical temperature of the transition to the superconducting state is made. The inhomogeneous heat conduction equation which is solved numerically, simulates heat transfer in the film-substrate-thermostat system for the third on the left and the first on the right initial boundary value problem. Using the symmetry of the problem, the parameter H is determined, which is equal to the ratio of the heat transfer of the film surface to its thermal conductivity; this parameter is necessary for effective heat removal. It is shown that effective heat removal from films can be provided by current-carrying and potential clamping contacts made, for example, of beryllium bronze. This makes possible to study the current-voltage characteristics of superconductors near the critical transition temperature to the superconducting state with high-density currents $(10^4 - 10^5 A/cm^2)$ without significant heating of the samples.

Key Words: inhomogeneous heat conduction equation, 1st initial-boundary value problem, 3rd initial-boundary value problem, niobium nitride membrane, pulsed heating by current

For citation: N.D. Kuzmichev, M.A. Vasyutin, E.V. Danilova, E.A. Lapshina. Mathematical modeling of heat transfer in the film-substrate-thermostat system during heating of an electrically conductive film by a high-density pulse current. *Zhurnal Srednevolzhskogo matematicheskogo obshchestva*. 23:1(2021), 82–90. DOI: https://doi.org/10.15507/2079-6900.23.202101.82–90

References

- A. Shurakov, Y. Lobanov, G. Goltsman, "Superconducting hot-electron bolometer: from the discovery of hot-electron phenomena to practical applications", *Superconduc*tor Science and Technology, 29:2 (2016).
- F. W. Carter, T. Khaire, C. Chang, V. Novosad, "Low-loss single-photon NbN microwave resonators on Si", Appl. Phys. Lett., 115:9 (2019).
- 3. Y. Suzuki, N. Iguchi, K. Adachi, A. Ichiki, T. Hioki, C.-W. Hsu, R. Sato, S. Kumagai, M. Sasaki, J.-H. Noh, Y. Sakurahara, K. Okabe, O. Takai, H. Honma, H. Watanabe, H. Sakoda, H. Sasagawa, H. Doy, S. Zhou, H. Hori, S. Nishikawa, T. Nozaki, N. Sug-imoto, T. Motohiro, "Complete fabrication of a traversable 3 μ m thick NbN film superconducting coil with Cu plated layer of 42 m in length in a spiral three-storied trench engraved in a Si wafer of 76.2 mm in diameter formed by MEMS technology for a compact SMES with high energy storage volume density", J. Phys.: Conf. Series, 897:1 (2017).

Н. Д. Кузьмичев, М. А. Васютин, Е. В. Данилова, Е. А. Лапшина. Математическое моделирование...

- L. I. Tyrchak, P. V. Plotnikov, Osnovy chislennyh metodov [Numerical Basics], Fizmatlit Publ., Moscow, 2005 (In Russ.), 304 p.
- V. F. Formalev, D. L. Reviznikov, *CHislennye metody [Numerical methods]*, Fizmatlit Publ., Moscow, 2006 (In Russ.), 406 p.
- ed. I. K. Kikoin, Tablicy fizicheskih velichin. Spravochnik [Tables of physical quantities. Directory], Atomizdat Publ., Moscow, 1976 (In Russ.), 1008 p.
- V. A. Ohorzin, Komp'yuternoe modelirovanie v sisteme Mathcad: ucheb. posobie [Computer modeling in the Mathcad system: textbook. allowance], Finansy i statistika Publ., Moscow, 2006 (In Russ.), 144 p.

Submitted 10.01.2021; Revised 15.02.2021; Accepted 20.02.2021

Information about the authors:

Nikolay D. Kuzmichev, Professor of Department of Computer Science and CAD-Technology, National Research Mordovia State University (68/1 Bolshevistskaya St., Saransk 430005, Russia), Dr. Sci. (Phys.-Math.), ORCID: http://orcid.org/0000-0001-6707-4950, kuzmichevnd@yandex.ru

Mikhael A. Vasyutin, Associate Professor of Department of Computer Science and CAD-Technology, National Research Mordovia State University (68/1 Bolshevistskaya St., Saransk 430005, Russia), Ph. D. (Phys.-Math.), ORCID: http://orcid.org/0000-0002-4856-7407, vasyutinm@mail.ru

Ekaterina V. Danilova, Post-Graduate Student of the Department of Applied Mathematics, Differential Equations and Theoretical Mechanics, National Research Mordovia State University (68/1 Bolshevistskaya St., Saransk 430005, Russia), ORCID: https://orcid.org/0000-0003-0554-3795, danilova29-94@mail.ru

Elena A. Lapshina, Associate Professor of Department of Computer Science and CAD-Technology, National Research Mordovia State University (68/1 Bolshevistskaya St., Saransk 430005, Russia), Ph. D. (Pedagogy), ORCID: http://orcid.org/0000-0002-8828-273X, e.lapshina2010@yandex.ru

All authors have read and approved the final manuscript. Conflict of interest: The authors declare no conflict of interest.