

## МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ И ИНФОРМАТИКА

DOI 10.15507/2079-6900.23.202104.424-432

Оригинальная статья

ISSN 2079-6900 (Print)

ISSN 2587-7496 (Online)

УДК 519.633.6;536.21;538.945

## Численный анализ нагрева токовым импульсом плёнки нитрида ниобия в её продольном сечении

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

*ФГБОУ ВО «Национальный исследовательский Мордовский государственный университет им. Н. П. Огарёва» (г. Саранск, Российская Федерация)*

**Аннотация.** Выполнен численный расчет эволюции распределения температуры в продольном сечении плёнки нитрида ниобия при её нагреве импульсом электрического тока. Математическое моделирование осуществлялось на основе двумерной начально-краевой задачи для неоднородного уравнения теплопроводности. В начально-краевой задаче учитывалось, что токовые и потенциальные контакты к плёнке служат одновременно и контактами для теплоотвода. Рассматривался случай для третьей слева и первой справа начально-краевой задачи. Анализ численного решения показал, что эффективный теплоотвод от плёнки могут обеспечить токоподводящие и потенциальные прижимные контакты, изготовленные, например, из бериллиевой бронзы. Это позволяет проводить исследование вольт-амперных характеристик сверхпроводящих плёнок вблизи критической температуры перехода в сверхпроводящее состояние токами, плотностью близкими к критическим значениям, без значительного её нагрева.

**Ключевые слова:** неоднородное двумерное уравнение теплопроводности, численный анализ, эволюция распределения температуры, 1-я начально-краевая задача, 3-я начально-краевая задача, плёнка нитрида ниобия, токовый контакт, потенциальный контакт, импульсный нагрев током

**Для цитирования:** Кузьмичев Н. Д., Данилова Е. В., Васютин М. А. Численный анализ нагрева токовым импульсом плёнки нитрида ниобия в её продольном сечении // Журнал Средневожского математического общества. 2021. Т. 23, № 4. С. 424–432. DOI: <https://doi.org/10.15507/2079-6900.23.202104.424-432>

### 1. Введение

Нитрид ниобия — бинарное неорганическое соединение металла ниобия и азота с формулой NbN, серые или чёрные кристаллы, не растворимые в воде. Обычно производится и хранится в виде порошка. Устойчив при нагреве в концентрированных соляной, серной кислотах. Окисление нитрида ниобия на воздухе происходит при 500–800 °С с образованием Nb<sub>2</sub>O<sub>5</sub>. Температура плавления – 2 300 °С. На сегодняшний день наиболее широкое применение получили нитриды переходных металлов, нанесенные в виде тонких плёнок. Они используются в качестве твердых покрытий, коррозионно-абразивно- и износостойких слоёв, декоративных покрытий. Плёнки нитридов переходных металлов активно применяются в микроэлектронике, поскольку обладают изоляционными, полупроводниковыми, сверхпроводящими, оптическими и рядом других важных свойств.

Нитрид ниобия используется для изготовления сверхпроводниковых болометров, т. к. характерная для него температура перехода к сверхпроводимости достаточно велика



(14–17 К), чтобы можно было использовать для охлаждения жидкий водород. Такие приборы являются особо чувствительными по сравнению с другими известными тепловыми приемниками, а также обладают большей устойчивостью при работе с низкими температурами за счет свойств сверхпроводниковых материалов, таких как нитрид ниобия. Современный класс приборов hot-electron bolometer (НЕБ) реализует эффект электронного разогрева в сверхпроводниковой плёнке нитрида ниобия, находящейся в резистивном состоянии под воздействием электромагнитного излучения [1].

При исследовании вольт-амперных характеристик (ВАХ) плёнок NbN с целью определения её сверхпроводящих характеристик необходимо пропускать через плёнку токи, близкие к критическим. В результате этого исследуемая плёнка переходит в резистивное состояние, и выделяется значительное количество теплоты. В связи с этим требуется достаточный теплоотвод, который обеспечит чистоту эксперимента. Поэтому математическое моделирование теплоотдачи плёнок нитрида ниобия при пропускании через них тока высокой плотности является актуальной и практически важной задачей. В нашем более раннем исследовании была решена одномерная задача теплопроводности [2].

В настоящей работе выполнено математическое моделирование эволюции распределения температуры внутри плёнки нитрида ниобия на основе двумерного уравнения теплопроводности с учетом расположения теплоотводящих контактов на поверхности плёнки.

## 2. Математическая постановка задачи эволюции распределения температуры в продольном сечении плёнки

Математическое моделирование задачи эволюции распределения температуры в сечении плёнки осуществлялось на основе двумерного неоднородного уравнения теплопроводности:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = a^2 \left( \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right) + f(x, y, t), \quad (2.1)$$

где  $a^2 = \lambda / c_p \rho = 4.3 \cdot 10^{-2} \text{ cm}^2 / \text{ s}$  – коэффициент температуропроводности кварцевой подложки и плёнки NbN (величины  $a^2$  для кварца и NbN приблизительно равны);  $c_p = 17 \text{ J} / (\text{ kg} \cdot \text{ K})$  удельная теплоёмкость подложки при 20K [4];  $\rho = 2.2 \text{ g} / \text{ cm}^3$  – плотность подложки;  $\lambda = 0.16 \text{ W} / (\text{ mK})$  – теплопроводность подложки при 20K;  $u$  – температура плёнки;  $t$  – время;  $x$  – координата с началом на внешней от подложки плоскости плёнки, направленная перпендикулярно в сторону подложки, а  $y$  – координата – лежащая в плоскости пленки и направлена от одного контакта к другому контакту (Рис. 2.1).

Функция  $f(x, y, t)$  имеет вид

$$f(x, y, t) = \frac{P(x, y, t)}{(c_{NbN} \cdot \rho_{NbN})}, \quad (2.2)$$

где  $P(x, y, t)$  – объёмная плотность мощности источника тепла (плёнки),  $c_{NbN} = 17 \text{ J} / (\text{ kg} \cdot \text{ K})$  – удельная теплоёмкость NbN плёнки при  $T = 14 \text{ K}$  (сумма решёточной и электронной теплоёмкости),  $\rho_{NbN} = 8.4 \text{ g} / \text{ cm}^3$  – плотность плёнки.

Учитывая, что сила тока линейно возрастает за время  $t_0$  от 0 до  $I_{max} = 1.12 \text{ A}$  (в нашем случае  $t_0 = 0.25 \text{ ms}$ ), величина  $P(x, y, t)$  определяется законом Джоуля-Ленца:

$$P(x, y, t) = P(t) = \begin{cases} \rho \cdot j_0^2 \cdot t^2, & \text{если } x \leq d, t \leq t_0; \\ 0, & \text{если } x > d, t > t_0. \end{cases} \quad (2.3)$$

Здесь  $\rho \approx 440 \mu\Omega \cdot cm$  – удельное сопротивление плёнки в нормальном состоянии;  $j_0 = I_{max}/(d \cdot b \cdot t_0)$ ;  $d = 400 \text{ nm}$  толщина;  $b = 9 \text{ mm}$  ширина плёнки.

Начальным условием будет функция  $u(x, y, 0) = T_0$  ( $T_0 = 14 \text{ K}$ ), которая определяет начальную температуру системы контакты-плёнка-подложка-термостат.

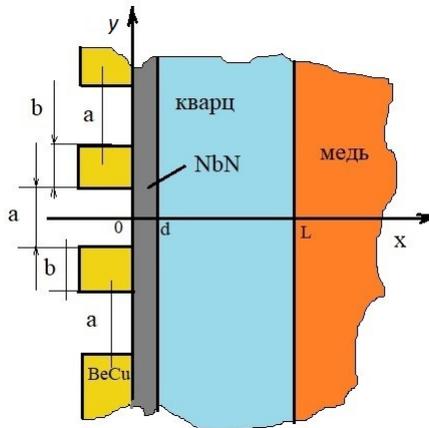
На левом конце задаем задачу третьего рода в силу того, что левая граница плёнки посредством тепловых контактов (токовых и потенциальных) находится в теплообмене со средой по закону Ньютона, имеющей температуру  $T_0 = 14 \text{ K}$  (рис. 2.1):

$$\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_{0,y,t} = H(y) \cdot [u(0, y, t) - T_0].$$

Коэффициент теплообмена  $H$  зависит от  $y$ , т. е.  $H = H(y)$ :

$$H(y) = \begin{cases} 0, & |y| \leq \frac{a}{2}; \\ H_0, & \frac{a}{2} < |y| \leq \frac{a}{2} + b; \\ 0, & \frac{a}{2} + b < |y| \leq \frac{3 \cdot a}{2} + b; \\ H_0, & \frac{3 \cdot a}{2} + b < |y|. \end{cases}$$

В межконтактной области  $H = 0$  и в области контакта  $H = H_0 = 50 \mu m^{-1}$ .



**Рис. 2.1.** Схема системы плёнка-подложка-термостат  
**Fig 2.1.** Layout of the membrane-substrate-thermostat system

На правом конце будут граничные условия первого рода. В итоге начально-краевые условия для уравнения (2.1) примут вид:

$$\begin{cases} u(x, y, 0) = T_0; \\ u'_x(0, y, t) = H(y)[u(0, y, t) - T_0]; \\ u(L, y, t) = T_0. \end{cases} \quad (2.4)$$

Решением уравнения (2.1) является распределение температуры в продольном сечении плёнки по координатам  $x$  и  $y$  в зависимости от времени  $t$  в системе контакты-плёнка-подложка-термостат.

### 3. Аппроксимация и численное решение двумерного неоднородного уравнения теплопроводности

Для аппроксимации дифференциального уравнения (2.1) конечно-разностными соотношениями введем пространственно – временную сетку с координатами  $x_i = (i - 1) \cdot h_x$ ,  $y_j = (j - 1) \cdot h_y$ ,  $t_n = n \cdot \tau$ , где  $h_x$ ,  $h_y$  – шаги сетки по координатам  $x$ ,  $y$  соответственно; ( $0 < x < 0.4$  мкм,  $0 < y < 9000$  мкм);  $\tau$  – шаг по времени;  $i = 1, 2, \dots, N_x$ ;  $j = 1, 2, \dots, N_y$ ;  $n = 0, 1, 2, \dots, K$ .

Воспользуемся локальной одномерной схемой А. А. Самарского [3; 5], которая является абсолютно устойчивой и обладает свойством суммарной аппроксимации, имеющей первый порядок точности по времени и второй – по пространственным переменным:  $O(\tau + h_x^2 + h_y^2)$ . Получим

$$\rho \cdot c \cdot \frac{u_{i,j}^{n+1/2} - u_{i,j}^n}{\tau} = \lambda \cdot \frac{u_{i+1,j}^{n+1/2} - 2 \cdot u_{i,j}^{n+1/2} + u_{i-1,j}^{n+1/2}}{h_x^2} + f_{i,j}^{n+1/2}, \quad (3.1)$$

$$\rho \cdot c \cdot \frac{u_{i,j}^{n+1} - u_{i,j}^{n+1/2}}{\tau} = \lambda \cdot \frac{u_{i,j+1}^{n+1} - 2 \cdot u_{i,j}^{n+1} + u_{i,j-1}^{n+1}}{h_y^2} + f_{i,j}^{n+1}. \quad (3.2)$$

Аппроксимируя начально-краевые условия (2.4), получим

$$\begin{cases} u_{i,j}^0 = T_0; \\ \frac{u_{1,j}^n - u_{0,j}^n}{h_x} = H_j \cdot (u_{0,j}^n - T_0); \\ u_{N_x,j}^n = T_0. \end{cases} \quad (3.3)$$

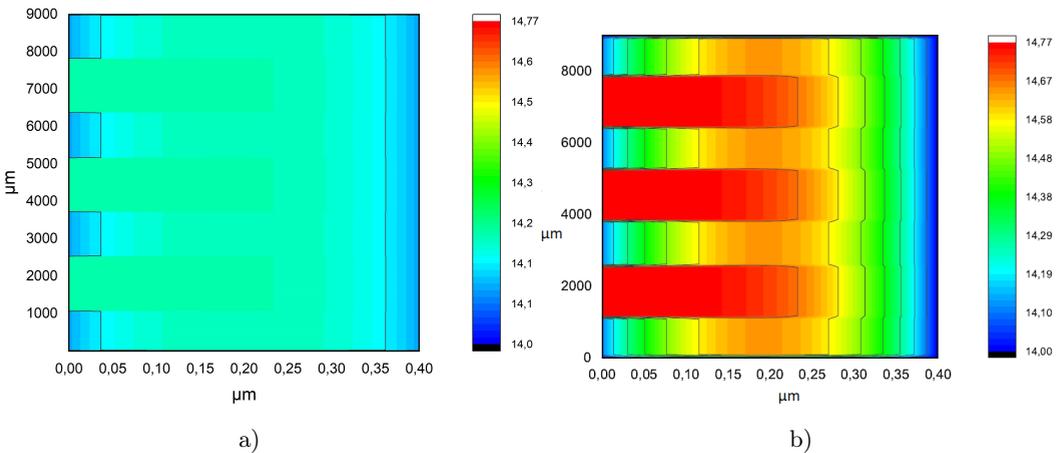
Из (3.3) видно, что погрешность аппроксимации левого граничного условия имеет 1-й порядок точности  $O(h_x)$ .

Решение уравнений (3.1)–(3.3) проводилось в два этапа. Первый этап – проводим дискретизацию только в направлении оси  $x$  на промежуточном временном шаге, решаем систему линейных алгебраических уравнений (СЛАУ) (3.1). В уравнении (3.1) определяя значение  $u_{N_x,j}^{n+1/2}$  из правого граничного условия находим поле температур  $u_{i,j}^{n+1/2}$  на промежуточном временном слое. Второй этап – то же самое в направлении оси  $y$ , но уже на целом шаге по времени (3.2).

Каждое СЛАУ сводится к стандартному трехдиагональному виду и решается методом прогонки [6; 7].

В интегрированной среде разработки Microsoft Visual Studio был написан код программы, которая решает двумерное неоднородное уравнение теплопроводности на языке C++. Для расчета были взяты следующие значения параметров  $N_x = 91$ ,  $N_y = 401$ , значение индекса  $K$  зависит от условий задачи. Написанная программа выдает результат в виде матрицы  $91 \times 401$  элементов с шагом по времени  $\tau = 100 \mu s$ .

Результаты расчета представлены на Рис. 3.1, а-б и Рис. 3.2, а-б. Характерной особенностью этих рисунков, изображающих эволюцию распределения температуры, является неоднородность в виде «холодной тени контактов», которая практически исчезает спустя 5  $ms$ . Импульс возрастает линейно в течении 300  $\mu s$ . На Рис. 3.1, а показано распределение температуры внутри поперечного сечения пленки в момент времени 100  $\mu s$  после начала импульса и на Рис. 3.1, б в конце импульса (300  $\mu s$ ).



**Рис. 3.1.** Распределение тепла внутри пленки при  $t = 100 \mu s$  (а) и  $t = 300 \mu s$  (б)

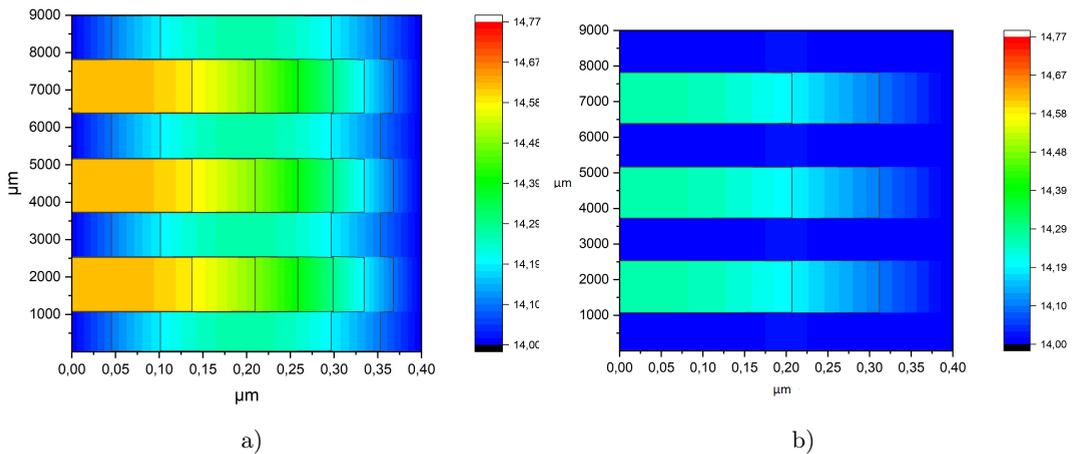
**Fig 3.1.** Heat distribution inside the membrane at  $t = 100 \mu s$  (a) and  $t = 300 \mu s$  (b)

Из полученных результатов, приведенных на Рис. 3.1, а-б видно, что максимальная температура нагрева находится внутри плёнки и наибольшее ее значение достигается в конце импульса.

После прекращения подачи импульса можно наблюдать незначительное изменение относительно конечного момента подачи (Рис. 3.2, а). Далее уже на 3-й  $ms$  можно увидеть значительное охлаждение плёнки до 14.19 К (Рис. 3.2, б).

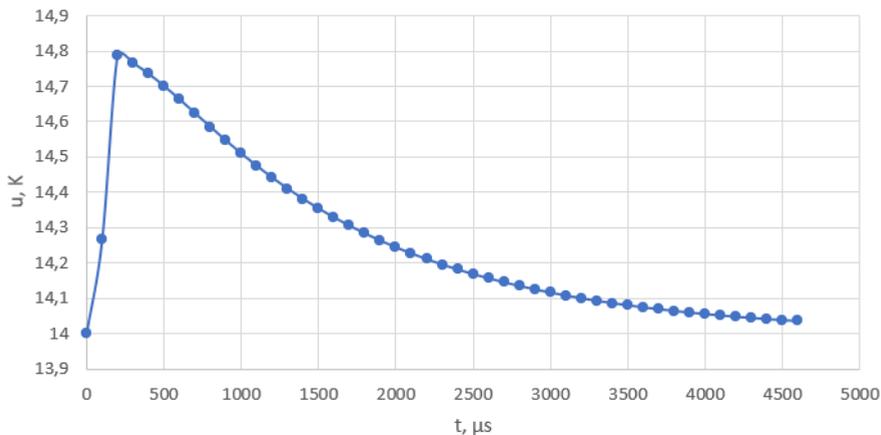
#### 4. Обсуждение полученных результатов

Численный анализ распределения температуры внутри плёнки нитрида ниобия на основе двумерного уравнения теплопроводности показал, что импульс тока высокой плотности нагревает плёнку до малых температур, при которых незначительно изменяются сверхпроводящие свойства материала, например, критическая плотность тока. Это обеспечивается токовыми и потенциальными контактами благодаря хорошему теплоотводу. Из представленных на Рис. 3.1–3.2 результатов видно, что максимальная



**Рис. 3.2.** Распределение тепла внутри пленки при  $t = 400 \mu\text{s}$  (a) и  $t = 3 \text{ ms}$  (b)  
**Fig 3.2.** Heat distribution inside the membrane at  $t = 400 \mu\text{s}$  (a) and  $t = 3 \text{ ms}$  (b)

температура нагрева плёнки увеличивается незначительно на 0,8 К. В момент подачи импульса вся система имеет температуру окружающей среды, а именно 14 К. Линейный рост импульса тока способствует нагреванию плёнки нитрида ниобия до температуры 14.77 К. Для теплопроводящих контактов был выбран материал бериллиевая бронза, что было описано в предыдущей работе [2].



**Рис. 4.1.** Изменение максимальной температуры пленки NbN от времени  
**Fig 4.1.** Change in the maximum temperature of the NbN membrane from time to time

На Рис. 4.1 представлено изменение максимальной температуры внутри плёнки нитрида ниобия в течении 20  $\text{ms}$ . Из графика видно, что своего максимума температура достигает, как и следовало ожидать, в момент завершения подачи импульса, а именно 14,8 К на 300  $\mu\text{s}$ .

## 5. Заключение

Из полученных результатов можно сделать вывод, что численный анализ процесса теплообмена плёнки нитрида ниобия при нагревании импульсом тока на основе двумерного уравнения теплопроводности уточняет результаты предыдущей работы [2] и дает более правильное представление об эволюции неоднородного распределения температуры в продольном сечении плёнки. Таким образом, применение прижимных контактов из бериллиевой бронзы позволяет проводить исследование ВАХ сверхпроводников с токами высокой плотности ( $10^4 - 10^5 \text{ A/cm}^2$ ) без значительного локального нагрева образцов.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. 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. 19, No. 2. DOI: <https://doi.org/10.1088/0953-2048/29/2/023001>
2. Кузьмичев Н. Д., Васютин М. А., Данилова Е. В., Лапшина Е. А. Математическое моделирование процесса теплоотдачи пленки нитрида ниобия при импульсном нагреве током // *Журнал Средневожского математического общества*. 2021. Т. 23, № 1. С. 82-90. DOI: <https://doi.org/10.15507/2079-6900.23.202101.82-90>
3. Тихонов А. Н., Самарский А. А. Уравнения математической физики: учеб. пособие. - 6-е изд., испр. и доп. - М.: Изд-во Моск. ун-та, 1999. 799 с.
4. Таблицы физических величин. Справочник. / под ред. акад. И.К. Кикоина. М., Атомиздат. 1976. 1008 с.
5. Кузнецов Г. В., Шеремет М. А. Разностные методы решения задач теплопроводности: учеб. пособие. Томск: Изд-во ТПУ, 2007. – 172 с.
6. Формалев В.Ф., Ревизников Д.Л. Численные методы. М.: ФИЗМАТЛИТ, 2006. 406 с.
7. Турчак Л. И., Плотников П. В. Основы численных методов. - М.: ФИЗМАТЛИТ, 2005. 304 с.

*Поступила 29.09.2021; доработана после рецензирования 13.10.2021  
принята к публикации 16.11.2021*

*Информация об авторах:*

**Кузьмичев Николай Дмитриевич**, профессор кафедры конструкторско-технологической информатики, ФГБОУ ВО «Национальный исследовательский Мордовский государственный университет 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](mailto:kuzmichevnd@yandex.ru)

**Данилова Екатерина Витальевна**, аспирант кафедры прикладной математики, дифференциальных уравнений и теоретической механики, ФГБОУ ВО «Национальный исследовательский Мордовский государственный университет им. Н. П. Огарёва», (430005, Россия, г. Саранск, ул. Большевикская, д. 68/1), ORCID: <https://orcid.org/0000-0003-0554-3795>, [daniлова29-94@mail.ru](mailto:daniлова29-94@mail.ru)

**Васютин Михаил Александрович**, доцент кафедры конструкторско-технологической информатики, ФГБОУ ВО «Национальный исследовательский Мордовский государственный университет им. Н. П. Огарёва», (430005, Россия, г. Саранск, ул. Большевикская, д. 68/1), кандидат физико-математических наук, ORCID: <http://orcid.org/0000-0002-4856-7407>, [vasyutinm@mail.ru](mailto:vasyutinm@mail.ru)

*Авторы прочитали и одобрили окончательный вариант рукописи.*

*Конфликт интересов:* авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

*Original article*

*MSC2020 35K200*

## Numerical analysis of heating by a current pulse of a niobium nitride membrane in its longitudinal section

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

*National Research Ogarev Mordovia State University (Saransk, Russian Federation)*

**Abstract.** A numerical calculation of the evolution of the temperature distribution in the longitudinal section of a niobium nitride membrane when it is heated by an electric current pulse is performed. Mathematical modeling was carried out on the basis of a two-dimensional initial-boundary value problem for an inhomogeneous heat equation. In the initial boundary value problem, it was taken into account that current and potential contacts to the membrane serve simultaneously as contacts for heat removal. The case was considered for the third from the left and the first from the right initial-boundary value problem. Analysis of the numerical solution showed that effective heat removal from the membrane can be provided by current-carrying and potential clamping contacts made, for example, of beryllium bronze. This makes it possible to study the current-voltage characteristics of superconducting membranes near the critical temperature of the transition to the superconducting state by currents close to the critical density without significant heating.

**Key Words:** inhomogeneous two-dimensional heat conduction equation, numerical analysis, evolution of temperature distribution, 1st and 3rd initial-boundary value problems, cross section, niobium nitride membrane, current contact, potential contact, pulsed heating by current

**For citation:** N. D. Kuzmichev, E. V. Danilova, M. A. Vasyutin. Numerical analysis of heating by a current pulse of a niobium nitride membrane in its longitudinal section. *Zhurnal Srednevolzhskogo matematicheskogo obshchestva*. 23:4(2021), 424–432. DOI: <https://doi.org/10.15507/2079-6900.23.202104.424-432>

## REFERENCES

1. A. Shurakov, Y. Lobanov, G. Goltsman, “Superconducting hot-electron bolometer: from the discovery of hot-electron phenomena to practical applications”, *Superconductor Science and Technology*, **29:2** (2016) (In Russ.). DOI: <https://doi.org/10.1088/0953-2048/29/2/023001>

2. 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 SVMO*, **23**:1 (2021), 82–90 (In Russ.). DOI: <https://doi.org/10.15507/2079-6900.23.202101.82-90>
3. A. N. Tikhonov, A. A. Samarskij, *Uravneniya matematicheskoy fiziki [Equations of mathematical physics]*, Moscow University Publ., 1999 (In Russ.), 799 p.
4. *Tablicy fizicheskikh velichin. Spravochnik [Tables of physical quantities. Reference book]*, ed. I. K. Kikoina, Atomizdat Publ., 1976 (In Russ.), 1008 p.
5. G. V. Kuznetsov, M. A. Sheremet, *Raznostnye metody resheniya zadach teploprovodnosti [Difference Methods for Solving Heat Conduction Problems]*, Tomsk State University Publ., Tomsk, 2007 (In Russ.), 172 p.
6. V. F. Formalev, D. L. Reviznikov, *Chislennyye metody [Numerical Methods]*, Fizmatlit Publ., 2006 (In Russ.), 406 p.
7. L. I. Tyrchak, P. V. Plotnikov, *Osnovy chislennykh metodov [Numerical Basics]*, Fizmatlit Publ., 2005 (In Russ.), 304 p.

*Submitted 29.09.2021; revised 13.10.2021; accepted 16.11.2021*

*Information about the author:*

**Nikolay D. Kuzmichev**, Professor, Department of Computer Science and CAD-technology, National Research Mordovia State University (68 Bolshevistskaya St., Saransk 430005, Russia), D. Sci. (Mathematics and Physics), ORCID: <http://orcid.org/0000-0001-6707-4950>, [kuzmichevnd@yandex.ru](mailto:kuzmichevnd@yandex.ru)

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

**Mikhael A. Vasyutin**, Associate Professor, Department of Computer Science and CAD-technology, National Research Mordovia State University (68 Bolshevistskaya St., Saransk 430005, Russia), Ph.D. (Mathematics and Physics), ORCID: <http://orcid.org/0000-0002-4856-7407>, [vasyutinm@mail.ru](mailto:vasyutinm@mail.ru)

*The authors have read and approved the final manuscript.*

*Conflict of interest:* the authors declare no conflict of interest.