

Дідоборець Олександр,

Коба Тарас

(Дніпро, Україна)

**МОДЕЛЮВАННЯ МЕТОДОМ МОНТЕ-КАРЛО СПЕКТРІВ
ФЛІККЕР -ШУМУ В ЕПІТАКСІАЛЬНИХ ПЛІВКАХ $YBa_2Cu_3O_7$.**

Анотація: Моделюванням методом Монте-Карло процесів термообробки плівок $YBa_2Cu_3O_7$ показано, що для актуальних діапазонів частот і температур основними джерелами їх надлишкового фліккер-шуму є переходи кисню поблизу малокутових границь блоків.

Ключові слова: фліккер-шум, епітаксіальні плівки, шумовий параметр Хоуге, CuO-площина, малокутові границі блоків.

Annotation: Monte-Carlo modelling anneals of $YBa_2Cu_3O_7$ epitaxial films have been carried out, and the excess flicker noise in the operating frequency and temperature ranges were shown to be dominated by oxygen migration near small-angle block boundaries.

Key words: flicker noise, epitaxial films, Hooge noise parameter, CuO-plane, small-angle block boundaries.

Фліккер-шумами (ФШ) називають шуми, інтенсивність яких збільшується при зменшенні частоти (f), наприклад, як $1/f$. Інтенсивність ФШ, звичайно характеризують безрозмірним параметром Хоуге (α) [1].

Інтенсивність та спектр низькочастотного шуму (з залежністю, близькою до $1/f$) епітаксіальних плівок $YBa_2Cu_3O_7$ є важливими параметрами, які визначають можливості їх застосування у різних пристроях високотемпературної надпровідної (ВТНП) електроніки, наприклад у болометрах. Відомо, що параметр α у цих плівках на багато порядків перевищує відповідні значення для плівок простих металів. Велика величина параметра Хоуге ($\alpha > 10^{-3}$ при 93К) означає невисоку конкурентність ВТНП пристроїв. Прийнятні величини параметрів останніх можна одержати за рахунок високого значення

температурного коефіцієнта опору в області фазового переходу, але й у цьому випадку велика величина α не є сприятливою обставиною. Вона прогнозує швидку деградацію досягнутих параметрів, оскільки такі значення вказують на значну концентрацію метастабільних дефектів ВТНП плівок і на їхню інтенсивну низькотемпературну дифузію. У з'єднаннях $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ такими дефектами-флуктуаторами (ДФ) є атоми кисню CuO площини. Дана робота присвячена комп'ютерному моделюванню методом Монте-Карло просторових розподілів атомів кисню CuO -площини і розрахункам енергій бар'єра їх переходу (спектрів ДФ) у найближчі вузли ґраток, що залежить від наявності і конфігурації розташування сусідніх атомів кисню, від режимів післяростових термообробок (стартової і кінцевої температур, швидкості їх зміни), від ступеня заповнення киснем CuO площини, від наявності одноосьової деформації і блоковості плівок $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$. Розподіл атомів кисню на CuO -площині було отримано за стандартною схемою Метрополіса методом Монте-Карло в рамках так званої моделі ANNNI [2-4], що враховує взаємодії найближчих атомів кисню: 1) взаємодії, що притягає, V_2 ($\sim 0,30$ еВ), яка зумовлена ковалентним зв'язком атомів кисню через орбіталі розташованого між ними атома міді і 2) відштовхувальних взаємодій V_1 ($\sim 0,35$ еВ) і V_3 ($\sim 0,05$ еВ) атомів кисню, розташованих у середині суміжних і протилежних ребер квадрату субґратки міді, відповідно (див. рис.1.).

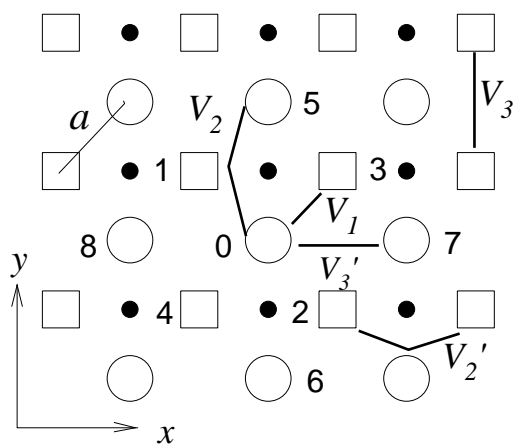


Рис.1. Потенціали взаємодій атомів кисню CuO -площині. Великі кружки і квадрати - заповнена киснем і порожня підґратка, темні кружки - атоми міді. $V_i \neq V_i'$ при наявності деформації. Нумерація вузлів використовується для позначення відстаней між ними.

Імовірність w_{ij} переходу атома в сусідній вакантний вузол f з вузла i визначається наступним співвідношенням

$$w_{if} = \begin{cases} 1, & \Delta V \leq 0 \\ \exp(-\Delta V / T), & \Delta V \geq 0 \end{cases}, \quad (1)$$

де $\Delta V = V_f - V_i$, V_f і V_i - сумарна енергія взаємодії атома кисню з оточенням у вихідному вузлі і після стрибка, відповідно. Були використані періодичні граничні умови.

Розподіли кисню розраховувалися шляхом модельної термообробки що починалася при високих температурах T_0 , при яких хаотичний розподіл атомів кисню задавалося за допомогою генератора випадкових чисел, і закінчувалася при низькій температурі $T_{рів}$ відповідно до

$$T = T_0 \exp(-gn) + T_{рів}, \quad (2)$$

де g - швидкість термообробки, n - число Монте-Карло кроків. Спектр енергій ДФ визначався шляхом підрахунку кількості бар'єрів з даною енергією для всіх пар позицій, з яких одна порожня, а друга зайнята атомом. Ці енергії розраховувалися в наближенні гармонійного потенціалу ями, мінімум якого розташований на позиції кисню, відповідно до процедури, запропонованої в [5]

$$E_{\bar{o}} = V_o + (V_f - V_i) / 2 + (V_f - V_i)^2 / 16 V_o, \quad (3)$$

де V_o - висота бар'єра для ізолюваного атома, у якого всі сусідні вузли порожні як до стрибка, так і після. Величина V_o використовувалася як підгінний параметр. Її величина була рівною ~ 0.3 еВ.

Комп'ютерне моделювання розподілу атомів кисню поблизу границь блоків і розрахунок відповідних спектрів ДФ дозволили встановити границі областей переважних джерел ФШ на f - T - площині. Виявлено, що для актуальних частот і температур ВТНП мікроелектроніки основними джерелами цього шуму є ДФ, розташовані поблизу малокуткових границь блоків і інших двовимірних дефектів, енергія активації дифузії кисню поблизу яких $< 0,5$ еВ (див. рис.2).

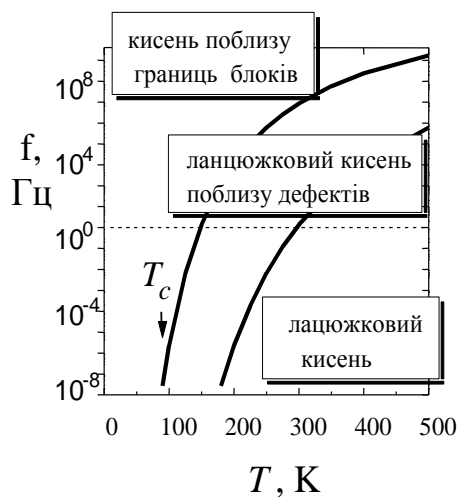


Рис.2. Переважні джерела шуму на f - T - площині. Пунктирна пряма поділяє частотну вісь на область вимірів ($f > 1$ Гц) і область деградаційних процесів

ДЖЕРЕЛА ТА ЛІТЕРАТУРА

- [1] Sh. Kogan. Electronic noise and fluctuations in solids. University press. Cambridge (1996). 354p.
- [2] D. Fontaine, L.T. Wille, S.C. Moss. Phys. Rev. B36, 5709 (1987).
- [3] A.G. Khachaturn, J.W. Morris, jr. Phys. Rev. Lett. 61, 215 (1988).
- [4] M. Goldman, C.P. Burmester, L.T. Wille, R. Gronsky. Phys.Rev. B50, 1337 (1994).
- [5] A.M. Bowler, E.S. Hood. J. Chem. Phys. 94, 5162 (1991).